
Diagnostics, Resource and Mechanics
of materials and structures

Editor-in-Chief: **Eduard S. Gorkunov**, RAS Academician (Russia)
Deputy Editors-in-Chief: **Sergey V. Smirnov**, **Sergey V. Gladkovsky**

Editorial Council

Chairman: **Eduard S. Gorkunov**, RAS Academician (Russia)

Anatoly A. Burenin (Russia)
Robert V. Goldshtein (Russia)
Irina G. Goryacheva (Russia)
Janez Grum (Slovenia)
Mikhail P. Lebedev (Russia)
Leopold I. Leontiev (Russia)
Evgeny V. Lomakin (Russia)
Valery P. Matveenko (Russia)
Nikolay A. Makhutov (Russia)
Mitko M. Mihovski (Bulgaria)
Nikita F. Morozov (Russia)
Vladimir V. Moskvichev (Russia)
Sergey V. Panin (Russia)
Sergey G. Psakhye (Russia)
Vasily M. Fomin (Russia)
Shao Wen-zhu (China)

Editorial Board

Boris V. Artemyev (Moscow)
Vladimir A. Bataev (Novosibirsk)
Aleksandr K. Belyaev (St.-Peterburg)
Vera V. Berezovskaya (Ekaterinburg)
Alexander A. Bogatov (Ekaterinburg)
Sergey V. Burov (Ekaterinburg)
Vladimir O. Vaskovsky (Ekaterinburg)
Dmitry I. Vichuzhanin (Ekaterinburg)
Mladen N. Georgiev (Sofia, Bulgaria)
Vladimir G. Degtyar (Miass)
Igor G. Emelyanov (Ekaterinburg)
Sergey M. Zadvorkin (Ekaterinburg)
Alexander G. Zalazinsky (Ekaterinburg)
Anatoly V. Konovalov (Ekaterinburg)
Vladimir N. Kostin (Ekaterinburg)
Aleksey V. Makarov (Ekaterinburg)
Lev A. Merzhievsky (Novosibirsk)
Radik R. Mulyukov (Ufa)
Vitaly V. Muravyov (Izhevsk)
Aleksandr P. Nichipuruk (Ekaterinburg)
Oleg A. Plekhov (Perm)
Anna M. Povlotskaya (Ekaterinburg)
Nataliya B. Pugacheva (Ekaterinburg)
Igor Yu. Pyshmintsev (Chelyabinsk)
Anatoly B. Rinkevich (Ekaterinburg)
Roman A. Savray (Ekaterinburg)
Alexander S. Smirnov (Ekaterinburg)
Yury V. Subachev (Ekaterinburg)
Alexander I. Ulyanov (Izhevsk)
Yulia V. Khudorozhkova (Ekaterinburg)

Elena E. Verstakova, editor of the English translation
Irina M. Tsiklina, editor of Russian texts
Ekaterina V. Blashchanevich, associate editor
Lyubov N. Lobova, associate editor
Galina V. Torlopova, associate editor
Raul N. Shakirov, site admin

Postal address: Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 34 Komsomolskaya st., 620049,
Ekaterinburg, Russian Federation
phone: +7 (343) 375-35-83,
fax: +7 (343) 374-53-30
e-mail: dream-journal@mail.ru
<http://dream-journal.org>

Главный редактор: Горкунов Эдуард Степанович – академик РАН, д.т.н.
Заместители главного редактора: **Сергей Витальевич Смирнов**, д.т.н.; **Сергей Викторович Гладковский**, д.т.н.

Редакционный совет:

Председатель совета – Горкунов Эдуард Степанович, академик РАН, д.т.н. (Россия)

Буренин Анатолий Александрович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Гольдштейн Роберт Вениаминович, д.ф.-м.н., член-корр. РАН (Россия)
Горячева Ирина Георгиевна, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Грум Янез, Ph.D, (Республика Словения)
Лебедев Михаил Петрович, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)
Леонтьев Леопольд Игоревич, академик РАН, д.т.н. (Россия)
Ломакин Евгений Викторович, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Матвеев Валерий Павлович, академик РАН, д.т.н. (Россия)
Махутов Николай Андреевич, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)
Миховски Митко Минков, д.т.н. (Республика Болгария)
Морозов Никита Федорович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Москвичев Владимир Викторович, д.т.н. (Россия)
Панин Сергей Викторович, д.т.н. (Россия)
Псахье Сергей Григорьевич, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Фомин Василий Михайлович, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)
Шао Вэнь-чжу, профессор (Китай)

Редакционная коллегия:

Главный редактор – **Горкунов Эдуард Степанович**, академик РАН, д.т.н. (Екатеринбург)

Зам. главного редактора – **Смирнов Сергей Витальевич**, д.т.н. (Екатеринбург)

Зам. главного редактора – **Гладковский Сергей Викторович**, д.т.н. (Екатеринбург)

Артемьев Борис Викторович, д.т.н., (Москва)
Батаев Владимир Андреевич, д.т.н. (Новосибирск)
Беляев Александр Константинович, д.ф.-м.н., (Санкт-Петербург)
Березовская Вера Владимировна, д.т.н., (Екатеринбург)
Богатов Александр Александрович, д.т.н. (Екатеринбург)
Буров Сергей Владимирович, к.т.н. (Екатеринбург)
Васьковский Владимир Олегович, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)
Вичужанин Дмитрий Иванович, к.т.н. (Екатеринбург)
Георгиев Младен Николов, д.т.н. (София, Республика Болгария)
Дегтярь Владимир Григорьевич, член-корр. РАН, д.т.н. (Миасс)
Емельянов Игорь Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург)
Задворкин Сергей Михайлович, к.ф.-м.н. (Екатеринбург)
Залазинский Александр Георгиевич, д.т.н. (Екатеринбург)
Коновалов Анатолий Владимирович, д.т.н. (Екатеринбург)
Костин Владимир Николаевич, д.т.н. (Екатеринбург)
Макаров Алексей Викторович, д.т.н. (Екатеринбург)
Мержиевский Лев Алексеевич, д.т.н. (Новосибирск)
Мулюков Радик Рафикович, д.ф.-м.н. (Уфа)
Муравьев Виталий Васильевич, д.т.н. (Ижевск)
Ничипурук Александр Петрович, д.т.н. (Екатеринбург)
Плехов Олег Анатольевич, д.ф.-м.н. (Пермь)
Поволоцкая Анна Монсеевна, к.т.н. (Екатеринбург)
Пугачева Наталия Борисовна, д.т.н. (Екатеринбург)
Пышминцев Игорь Юрьевич, д.т.н. (Челябинск)
Ринкевич Анатолий Брониславович, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)
Саврай Роман Анатольевич, к.т.н. (Екатеринбург)
Смирнов Александр Сергеевич, к.т.н. (Екатеринбург)
Субачев Юрий Владимирович, к.т.н. (Екатеринбург)
Ульянов Александр Иванович, д.т.н. (Ижевск)
Худорожкова Юлия Викторовна, к.т.н. (Екатеринбург)

Верстакова Елена Евгеньевна – редактор перевода текста на английский язык

Циклина Ирина Михайловна – редактор текста

Блащачевич Екатерина Владимировна – помощник редактора

Лобова Любовь Николаевна – помощник редактора

Торлопова Галина Викторовна – помощник редактора

Шакиров Рауль Нурович, к.т.н. – администратор сайта журнала

Адрес редакции:

Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Комсомольская, д. 34., ИМАШ УрО РАН

телефон: +7 (343) 375 35 83, факс +7 (343) 374-53-30

e-mail: dream-journal@mail.ru

<http://dream-journal.org>

CONTENTS

Ksendzenko L. S., Losev A. S. Methods for determining the periodicity parameter of a mathematical model of massif around a mine working.	6
Popkov A. A. Phase-difference location used to determine the direction of acoustic emission source.	14
Struzhanov V. V., Volkov S. S., Volkova T. A. Development of microstructure damage in structurally heterogeneous materials under deformation.	21
Stvolova S. S., Zubko I. Yu. Description of elastic anisotropy of quasicrystalline structures using a discrete atomistic approach.	31
Vetoshkin S. V., Bayandin Yu. V., Naimark O. B. Optimizing the reinforcement of a composite cylindrical shell as applied to dynamic loading conditions.	42

СОДЕРЖАНИЕ

Ксендзенко Л. С., Лосев А. С. Способы определения параметра периодичности математической модели массива вокруг горной выработки.	6
Попков А. А. Использование фазовой локации для определения направления источника акустической эмиссии.	14
Стружанов В. В., Волков С. С., Волкова Т. А. Развитие микроструктурной поврежденности при деформировании структурно-неоднородных материалов.	21
Стволова С. С., Зубко И. Ю. Описание упругой анизотропии квазикристаллических структур с помощью дискретно-атомистического подхода.	31
Ветошкин С. В., Баяндин Ю. В., Наймарк О. Б. Оптимизация схемы армирования композитной цилиндрической оболочки применительно к динамическим условиям нагружения.	42

**METHODS FOR DETERMINING THE PERIODICITY PARAMETER
 OF A MATHEMATICAL MODEL OF MASSIF AROUND A MINE WORKING**

L. S. Ksendzenko¹, A. S. Losev^{2*}

¹*Far Eastern Federal University, 8 Sukhanova st., Vladivostok, Russian Federation*

²*Federal State Institution of Science Institute for Applied Mathematics, Far-Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences, 7 Radio st., Vladivostok, Russian Federation*

*Corresponding author. E-mail: A.S.Losev@yandex.ru; address for correspondence: 7, ul. Radio, Vladivostok, 690041, Russian Federation. Tel: +7 (423) 231 23 75

The paper presents a comparative analysis of the analytical and numerical determination of the periodicity parameter of a model of zonal rock mass destruction around a deep circular tunnel and field data from different deposits. A methodology for a simultaneous application of the analytical and numerical approaches, depending on the problems to be solved at a deposit being investigated, is substantiated.

Key words: highly compressed rock mass, zonal array destruction, non-Euclidean mathematical model parameters.

DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.006-013

References

1. Guzev M.A., Paroshin A.A. Non-Euclidean Model of the Zonal Disintegration of Rocks around an Underground Working. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2001, vol. 42, iss. 1, pp. 131–139. DOI: 10.1023/A:1018877015940.
2. Qian Q.H., Zhou X.P. Non-Euclidean continuum model of the zonal disintegration of surrounding rocks around a deep circular tunnel in a non-hydrostatic pressure state. *Journal of Mining Science*, 2011, vol. 47, no. 1, pp. 37–46. DOI: 10.1134/S1062739147010059.
3. Tsihu T.S., Chzhu K., Ksi E. Effect of horizontal stresses on the phenomenon of zonal disintegration of rock masses with a circular tunnel. *Fiziko-tehnicheskie problemy razrabotki poleznykh iskopaemykh*, 2012, no. 2, pp. 88–97. (In Russian).
4. Zhou X-P., Shou Y-D. Excavation-induced zonal disintegration of the surrounding rock around a deep circular tunnel considering unloading effect. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 2013, vol. 64, pp. 246–257. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2013.08.010.
5. Zhou X., Qian Q., Song H. The effects of three-dimensional penny-shaped cracks of zonal disintegration of the surrounding rock masses around a deep circular tunnel. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 2015, vol. 28, iss. 6, pp. 722–734. DOI: 10.1016/S0894-9166(16)30012-X.
6. Qian Q., Zhou X. Quantitative analysis of rockburst for surrounding rocks and zonal disintegration mechanism in deep tunnels. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 2011, vol. 3, iss. 1, pp. 1–9. DOI: 10.3724/SP.J.1235.2011.00001.
7. Ksendzenko L.S. Developing a method for the determination of the parameters of zonal destruction structure of highly compressed rock mass around underground mine tunnels. *Vestnik Dalnevostochnogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2011, no. 3/4 (8/9), pp. 144–166. (In Russian).
8. Ksendzenko L.S., Makarov V.V., Opanasyuk V.N., Golosov A.M. *Zakonomernosti deformirovaniya i razrusheniya silno szhatykh gornykh porod i massivov* [Regularities in the Deformation and Destruction of Highly Compressed Rocks and Rock Masses]. Vladivostok, DVFU Publ., 2014. 219 p. (In Russian).
9. Makarov V.V., Guzev M.A., Odintsev V.N., Ksendzenko L.S. Periodical zonal character of damage near the openings in highly-stressed rock mass conditions. *Journal of Rock Mechanics and*

Geotechnical Engineering, 2016, vol. 8, iss. 2, pp. 164–169. DOI: 10.1016/j.jrmge.2015.09.010.
10. Li S., Wang H., Qian Q., Fan Q., Yuan L., Xue J., Zhang Q. In-situ monitoring research on zonal disintegration of surrounding rock mass in deep mine roadways. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, vol. 27, iss. 8, pp. 1545–1553.

Подана в журнал: 11.04.2016
УДК 622.281:539
DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.006-013

СПОСОБЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРА ПЕРИОДИЧНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МАССИВА ВОКРУГ ГОРНОЙ ВЫРАБОТКИ

Л. С. Ксендзенко¹, А. С. Лосев^{2*}

¹Дальневосточный федеральный университет, ул. Суханова, 8., Владивосток, Российская Федерация

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики Дальневосточного отделения Российской академии наук, ул. Радио, 7, Владивосток, Российская Федерация

*Ответственный автор. Электронная почта: A.S.Losev@yandex.ru; адрес для переписки: ул. Радио, 7, 690041, Владивосток, Российская Федерация. Телефон: +7 (423) 231-23-75

В работе проведен сравнительный анализ аналитического и численного определения параметра периодичности модели зонального разрушения массива горных пород вокруг глубокой выработки круглого сечения с натурными данными различных месторождений. Обосновывается методика совместного использования аналитического и численного подхода в зависимости от решаемых задач на исследуемом месторождении.

Ключевые слова: сильно сжатый массив, зональное разрушение массива, параметры неевклидовой математической модели.

1. Введение

На сегодняшний день исследования горных пород являются приоритетными направлениями во многих странах в решении задач, связанных с горным делом, задействованы специалисты различного уровня всего мира. В процессе поиска новых методов и подходов в этой научной области один из значимых результатов был получен М.А. Гузевым и А.А. Парошиным. Ими впервые была предложена неевклидова модель сплошной среды для описания распределения поля напряжений вокруг выработки круглого сечения [1]. Отказавшись от условия совместности деформаций Сен-Венана, для случая плоской деформации, авторы ввели функцию дефектности массива горной породы, удовлетворяющую бигармоническому уравнению с заданными граничными условиями. Полученный результат стал основой новых исследований и позволил по-новому взглянуть на явления зонального разрушения массива горных пород вокруг глубоких подземных выработок [2–8].

В частности, авторами работы [2] решена краевая задача о распределении поля напряжений вокруг выработки в случае плоской деформации и в условиях негидростатического нагружения. Задача представлена в виде двух составляющих, за счет разложения поля упругих напряжений в сумму полей: первое из них вызвано несовместными деформациями нарушенных зон, а второе – совместными деформациями ненарушенных зон. В первом случае упругие напряжения определяются с помощью неевклидовой модели, во втором – с помощью классической упруго механической модели. В итоге, с использованием силового критерия Кулона-Мора, установлено количество нарушенных зон, их местоположение, которые зависят от физико-механических свойств материала породы, а также от его неевклидовых параметров.

В работе [3] на основе представленной неевклидовой модели зональной дезинтеграции массива горных пород вокруг выработки круглого сечения, определено количество и размер нарушенных и ненарушенных зон. Показана зависимость количества и размера зон от продольного натурального напряжения, тангенциального и радиального напряжений, коэффициента промежуточного главного напряжения, а также классификационного коэффициента RMR (Rock Mass Rating).

В работе [4] предложена динамическая модель исследования явлений зональной дезинтеграции во вмещающем массиве горных пород вокруг глубоких круглых туннелей, подвергнутых динамической разгрузке в условиях гидростатического сжатия. На основе неравновесной термодинамики получено неевклидово динамическое уравнение, решение которого определяется прямыми и обратными преобразованиями Лапласа. Показано, что число нарушенных зон возрастает с увеличением гравитационного напряжения, параметра нарушенности горной породы (disturbance factor), скорости разгрузки, а также с уменьшением предела прочности на одноосное сжатие, геологического индекса прочности (GSI), параметра прочности m_i и коэффициента Пуассона ν .

В работе [5] на основе новой неевклидовой модели исследовано влияние на зональную дезинтеграцию горных пород глубоких выработок пенни-образных трещин и естественного осевого напряжения. Применен коэффициент плотности энергии деформации при определении коэффициента интенсивности напряжений в вершинах пенни-образных трещин. Путем численных расчетов установлено, что величина и расположение зон разрыва чувствительны к микро- и макро-механическим параметрам, а также к величине напряжения в нетронutom массиве.

В работе [6] на основе неевклидовой модели изучается связь между зональной дезинтеграцией и горными ударами. Исследуется механизм зарождения вторичных микротрещин, механизм их перехода в неустойчивое состояние, распространение и объединение вторичных микротрещин, образование макротрещин (что ведет к горному удару).

Не смотря на уникальность работ все авторы [2–6] приходят к следующим заключениям:

- в условиях больших глубин закономерным является зональный характер разрушения массива горных пород вокруг подземных выработок;
- свойствами структур зонального разрушения являются повторение контура выработки и чередование разрушенных и относительно ненарушенных горных пород;
- неевклидовы математические модели, наиболее адекватно описывают явление зональной дезинтеграции.

Общим существенным пробелом в рассмотренных работах является отсутствие сравнения с натурными экспериментами и частичная проработка алгоритма определения параметров построенных математических моделей. Поэтому, актуальным остается вопрос качества определения параметров построенных моделей, а также влияние точности их вычисления на исследуемые физические эффекты и горные явления.

2. Распределение поля напряжений вокруг выработки круглого сечения

Обратимся к задаче о распределении поля напряжений вокруг выработки круглого сечения, которая рассматривается как плоская и стационарная, в условиях несжимаемости и гидростатичности нагружения на бесконечности [1]. Задача решается на основе полученного уравнения равновесия

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{1}{r}(\sigma_r - \sigma_{\varphi\varphi}) = 0, \quad (1)$$

бигармонического уравнения для функции дефектности

$$\Delta^2 R - \gamma^2 R = 0, \quad (2)$$

и граничных условий

$$R|_{r=r_0} = 0, \quad \frac{\partial R}{\partial r}|_{r=r_0} = 0, \quad (3)$$

где σ_{rr} – нормальное радиальное напряжение; $\sigma_{\varphi\varphi}$ – нормальное тангенциальное напряжение; $\sigma_{r\varphi}$ – касательное напряжение; Δ – оператор Лапласа; γ – параметр периодичности модели. В полярных координатах для бигармонического уравнения

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 R = \gamma^2 R \quad (4)$$

определено решение при условии $r \rightarrow \infty$ для расстояния от центра выработки до точки массива в виде равенства:

$$R(r) = aJ_0(\sqrt{\gamma}r) + bN_0(\sqrt{\gamma}r) + cK_0(\sqrt{\gamma}r), \quad (5)$$

где J_0, N_0, K_0 – функции Бесселя, Неймана и Макдональда нулевого порядка.

В [7] решение бигармонического уравнения (2), в отличие от [1], найдено для граничных условий:

$$\frac{\partial R}{\partial r}|_{r=r_0} = 0, \quad \frac{\partial R}{\partial r}|_{r=r^*} = 0, \quad (6)$$

соответствующих зональному характеру разрушения массива во всех зонах по принципу: первое граничное условие для функции R определяем как ее экстремальность на контуре выработки, а второе – как экстремальность в середине первой зоны разрушения и т.д.

В данной постановке задачи и полученном решении актуальным остается вопрос качественного и точного определения параметров рассматриваемой модели. Особенно важным моментом является степень точности определения параметра периодичности и его влияние на точность прогнозов, числа, положения и протяженности зон разрушения массива горных пород. В ходе рассмотрения данного вопроса было разработано два независимых подхода определения параметра γ .

3. Методика и результаты определения параметра периодичности модели зонального разрушения массива горных пород

Аналитический подход. На основе натуральных экспериментов для исследованных месторождений была получена аналитическая зависимость между параметром γ и расстоянием от контура выработки до середины первой зоны разрушения в единицах радиуса выработки

$$\gamma(r^*/r_0) = -10(r^*/r_0) + 23, \quad (7)$$

где r^* – середина первой зоны разрушения, считая от контура выработки; r_0 – радиус выработки, м [7].

Численный подход. Способ основан на численном подборе параметра γ , при котором параметры a и b функции дефектности принимают наибольшие отрицательные значения на контуре выработки, что характеризуется достижением функцией дефектности на контуре выработки экстремального значения и соответственно наличием зоны разрушения [8].

Каждый из предложенных подходов обладает своими достоинствами и недостатками, в частности, аналитический подход определяет параметр γ с точностью до целых, не до конца апробирован на неизвестных месторождениях, но является очень доступным и простым в плане вычисления. Численный подход является общим способом определения параметра γ , позволяющим вычислить искомый параметр с заданным уровнем точности, но требует весьма трудоемких вычислений.

В ходе расчета параметра периодичности для исследованных месторождений по обеим методикам было получено, что расхождение в точности в некоторых случаях достигает до 11,21 %.

При детальном рассмотрении для Норильского месторождения и угольной шахты Dingji (КНР) [10] было установлено, что в сравнении с натурными данными чувствительность построенной модели по отношению к параметру γ определяется двумя знаками после запятой. После чего для рассматриваемых месторождений был проведен сравнительный анализ натуральных [10] и экспериментальных данных с численным и аналитическим подходом.

Таблица 1 – Норильское месторождение

Значение параметра γ	Относительная погрешность вычисления ближней и дальней границ зон разрушения, %			
	I зона		II зона	
$\gamma=3$	0,71	4,86	19,06	6,8
$\gamma= 3,2$	2,14	5,36	17,18	5,29
$\gamma= 3,29$	3,57	5,67	16,25	4,53

Таблица 2 – Угольная шахта Dingji (КНР)

Значение параметра γ	Относительная погрешность вычисления ближней и дальней границ зон разрушения, %							
	I зона		II зона		III зона		IV зона	
$\gamma=9$	0	2,69	10,6	10,8	11,6	3,00	9,51	7,04
$\gamma= 9,9$	0	1,81	8,09	8,17	8,00	0,13	5,45	3,44
$\gamma= 9,93$	0	1,61	8	8,07	7,88	0,22	5,33	3,33

Расчет относительной погрешности для рассматриваемых месторождений показывает, что увеличение числа знаков после запятой положительно отражается на вычислении границ зон разрушения в общем случае (табл. 1–2). В частности, для Норильского месторождения можно заметить, что относительная погрешность вычисления границ первой зоны разрушения меньше в случае, когда $\gamma=3$, т.е. параметр принимает целочисленное значение (табл. 1). По Угольной шахте Dingji (КНР) анализ результатов показывает, что увеличение числа знаков после запятой в параметре γ понижает погрешность счета для вычисления границ всех зон разрушения (табл. 2). При более детальном рассмотрении можно сказать, что для первой зоны увеличение числа знаков носит уточняющий характер, так как погрешность уменьшается не более чем на 1 %, в то время как относительная погрешность остальных зон разрушения сокращается намного сильнее на 2–4 %.

4. Заключение

Таким образом, нельзя окончательно утверждать, какой из подходов вычисления параметра периодичности лучше. Поэтому в зависимости от поставленной задачи предлагается использовать оба подхода численный и аналитический. А именно – при первичном анализе выработки на новом месторождении, когда необходимо решить вопрос дальнейшей разработки выработки в данном месте, целесообразно использовать аналитический подход. Однако в случае более детального исследования, требующего определения числа зон, их радиальной протяженности, глубины появления зоны, точное положение последней зоны разрешения как границы области влияния одиночной выработки, конечно, требуются более точные данные, которые возможно получить численным методом.

В результате согласованного использования численного и аналитического способа определения параметра периодичности модели зонального разрушения массива горной породы достигается более качественная сходимость теоретических результатов с натурными. Данное согласование позволяет понизить ошибку относительной погрешности на этапе расчета параметров исследуемой модели, что существенно повышает точность и качество результатов полученных с её помощью в дальнейшей работе.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда № 14-11-00079.

Литература

1. Guzev M. A., Paroshin A. A. Non-Euclidean Model of the Zonal Disintegration of Rocks around an Underground Working // *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. – 2001. – Vol. 42, iss. 1. – P. 131–139. – DOI: 10.1023/A:1018877015940.
2. Qian Q., Zhou X. Non-Euclidean continuum model of the zonal disintegration of surrounding rocks around a deep circular tunnel in a non-hydrostatic pressure state // *Journal of Mining Science*. – 2011. – Vol. 47, no. 1. – P. 37–46. – DOI: 10.1134/S1062739147010059.
3. Циху Ц., Чжу К., Кси Е. Влияние горизонтальных напряжений на явление зональной дезинтеграции горных пород в массиве с выработкой круглого сечения // *ФТПРПИ*. – 2012. – № 2. – С. 88–97.
4. Zhou X-P., Shou Y-D. Excavation induced zonal disintegration of the surrounding rock around a deep circular tunnel considering unloading effect // *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*. – 2013. – Vol. 64. – P. 246–257. – DOI: 10.1016/j.ijrmms.2013.08.010.
5. Zhou X. P., Song H. F., Qian Q. H. The effects of three-dimensional penny-shaped cracks of zonal disintegration of the surrounding rock masses around a deep circular tunnel // *Acta Mechanica Solida Sinica*. – 2015. – Vol. 28, iss. 6. – P. 722–734. – DOI: 10.1016/S0894-9166(16)30012-X.
6. Qian Q. H., Zhou X. P. Quantitative analysis of rockburst for surrounding rocks and zonal disintegration mechanism in deep tunnels // *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*. – 2011. – Vol. 3, iss. 1. – P. 1–9. – DOI:10.3724/SP.J.1235.2011.00001.
7. Ксендзенко Л. С. Разработка метода определения параметров зональной структуры разрушения сильно сжатого массива вокруг подземных выработок // *Вестник Дальневосточного государственного технического университета*. – 2011. – № 3/4 (8/9). – С. 144–166.
8. Закономерности деформирования и разрушения сильно сжатых горных пород и массивов: монография / Л. С. Ксендзенко, В. В. Макаров, В. Н. Опанасюк, А. М. Голосов. – Владивосток : ДВФУ, 2014. – 219 с.
9. Periodical zonal character of damage near the openings in highly-stressed rock mass conditions / V. V. Makarov, M. A. Guzev, V. N. Odintsev, L. S. Ksendzenko // *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*. – 2016. – Vol. 8, iss. 2. – P. 164–169. –

DOI: 10.1016/j.jrmge.2015.09.010.

10. In-situ monitoring of zonal disintegration of surrounding rock mass in deep mine roadways / S. Li , H. Wang , Q. Qian , Q. Fan , L. Yuan , J. Xue , Q. Zhang // Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering. – 2008. – Vol. 27, iss. 8. – P. 1545–1553. – DOI: 10.1155/2015/ 230126.

PHASE-DIFFERENCE LOCATION USED TO DETERMINE THE DIRECTION OF ACOUSTIC EMISSION SOURCE

A. A. Popkov

Siberian transport university, 191 D. Kovalchuk st., 630049, Novosibirsk, Russian Federation

*Corresponding author. Email: zabagy@gmail.com; address for correspondence: ul. D. Kovalchuk 191, 630049, Novosibirsk, Russian Federation. Tel.:8-383-328-03-46

The paper describes the usage patterns of closely spaced acoustic emission transducers designed to determine the direction of propagation of acoustic emission impact by calculating the phase delays between the transducers. As a criterion for determining the reliability of the phase delay, correlation analysis is used. The experimental data have established a dependence between the direction of acoustic wave emission and the ratio of phase delays between the transducers.

Keywords: acoustic emission testing, location of emitters, phase-difference, determination of wave direction.

DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.014-020

References

1. *Nerazrushayushchiy kontrol: spravochnik* [Nondestructive Testing. Reference Book. V.V. Kluev, ed., vol. 7]. M., Mashinostroenie Publ., 2006, 829 p. (In Russian).
2. Stepanova L.N., Lebedev E.Yu., Kabanov S.I., Kanifadin K.V., Ramazanov I.S., Bekher S.A. Acoustic emission testing of the quality of a weld during natural cooling. *Kontrol. Diagnostika*, 2009, no. 3, pp. 61–67. (In Russian).
3. Stepanova L.N., Bekher S.A., Tenitilov E.S. Methods for the determination of the coordinates of defects in the acoustic emission testing of loose bearing rings. *Kontrol. Diagnostika*, 2010, no. 4, pp. 61–65. (In Russian).
4. Murav'ev V.V., Bekher S.A., Vlasov K.V. Analysis of Errors in Determining the Coordinates of Acoustic-Emission Sources in Sheet-Steel Structures. *Russian Journal of Nondestructive Testing*, 2008, vol. 44, iss. 7, pp. 480–485. DOI: 10.1134/S106183090807005X.
5. *Nerazrushayushchiy kontrol: spravochnik* [Nondestructive Testing. Reference Book. V.V. Kluev, ed., vol. 3]. M., Mashinostroenie Publ., 2006, 864 p. (In Russian).

Подана в журнал: 23.12.2015
УДК 534.6:534.88:620.111.1
DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.014-020

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФАЗОВОЙ ЛОКАЦИИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НАПРАВЛЕНИЯ ИСТОЧНИКА АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ

А. А. Попков

ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный университет путей сообщения», ул. Дуси Ковальчук, 191,
г. Новосибирск, Россия

Ответственный автор. Электронная почта: zabagy@gmail.com; Адрес для переписки: 630049, Россия,
г. Новосибирск, ул. Дуси Ковальчук, 191; Телефон: 8-383-328-03-46

В работе представлено описание модели использования близкорасположенных преобразователей акустической эмиссии для определения направления распространения акустико-эмиссионного воздействия путем вычисления фазовых задержек между преобразователями. В качестве критерия достоверности определения фазовой задержки использовался корреляционный анализ. Полученные экспериментальные данные позволили установить зависимость между направлением акустико-эмиссионной волны и отношением фазовых задержек между преобразователями.

Ключевые слова: акустическая эмиссия, локация источников акустической эмиссии, фазовая задержка, определение направления источника акустической эмиссии.

1. Введение

Неопределенность локации источников акустической эмиссии напрямую влияет на достоверность результатов акустико-эмиссионного контроля [1]. Современные критерии оценки степени опасности дефектов требуют применения кластеризации, в том числе с использованием данных о координатах источников акустической эмиссии. Для большинства реальных объектов характерно наличие помех – дискретных сигналов акустической эмиссии, не связанных с развитием усталостных дефектов [2]. Источниками таких сигналов могут являться допустимые дефекты, например растрескивание защитных покрытий, коррозионные повреждения, трение, внешние воздействия. Для исключения помех используется пространственная фильтрация, от правильного применения которой зависит достоверность результатов контроля.

В настоящее время для определения координат источников дискретной акустической эмиссии широко применяются методы [3], основанные на измерении разностей времен прихода сигналов на разнесенные на поверхности объекта контроля преобразователи (акустическая антенна). Методы имеют ограничения [4], связанные со значительным влиянием неопределенности измерения времени начала импульса и скорости его распространения на достоверность координат источников акустической эмиссии при контроле протяженных объектов и объектов сложной формы.

Для повышения точности локации дискретной акустической эмиссии перспективно использовать методы, основанные на регистрации фазы волны в системе близкорасположенных преобразователей (антенные или фазовые решетки) [5]. В отличие от временных методов, фазовый метод в меньшей степени зависит от неопределенности скорости распространения волнового пакета (акустического импульса).

Цель работы – определение зависимости фазовых задержек между близкорасположенными (расстояние меньше длины волны для несущей частоты сигнала) преобразователями от направления распространения акустико-эмиссионного воздействия.

2. Моделирование

Исследуемая модель включает в себя три пьезоэлектрических преобразователя, расположенные в вершинах равностороннего треугольника (рис. 1). Для обеспечения однозначности результатов фазового метода локации длина стороны треугольника ограничена длиной волны λ акустико-эмиссионного импульса. Регистрация акустических сигналов преобразователями осуществляется разными каналами акустико-эмиссионной системы.

В модели рассматривались источники, расположенные на расстояниях, существенно больших расстояния между преобразователями, поэтому кривизной фронта волны допустимо пренебречь. Все дальнейшие расчеты справедливы только для волн, фронт которых приближенно описывается плоскостью.

В процессе распространения волны на преобразователях возникает разность фаз, которая зависит от направления распространения волны (рис. 1). Фазы регистрируемых сигналов преобразователями 1, 2 и 3 рассчитываются по формуле $\varphi_i = \frac{2\pi}{T} t_i + \varphi_{i0}$, где i – номер преобразователя.

Разность фаз между сигналами рассчитывается по следующим формулам:

$$\Delta\varphi_1 = \varphi_3 - \varphi_2,$$

$$\Delta\varphi_2 = \varphi_1 - \varphi_3.$$

Волна распространяется между преобразователями 1 и 3 по лучу волны BM , между преобразователя 3 и 2 – по лучу NA (рис. 2). Так как BM и AN – кратчайшие расстояния между фронтами волны 1, 2 и 3, то AN и BM перпендикулярны прямой 3, и выполняется следующее равенство:

$$\angle AND = \angle BMD = 90^\circ. \quad (1)$$

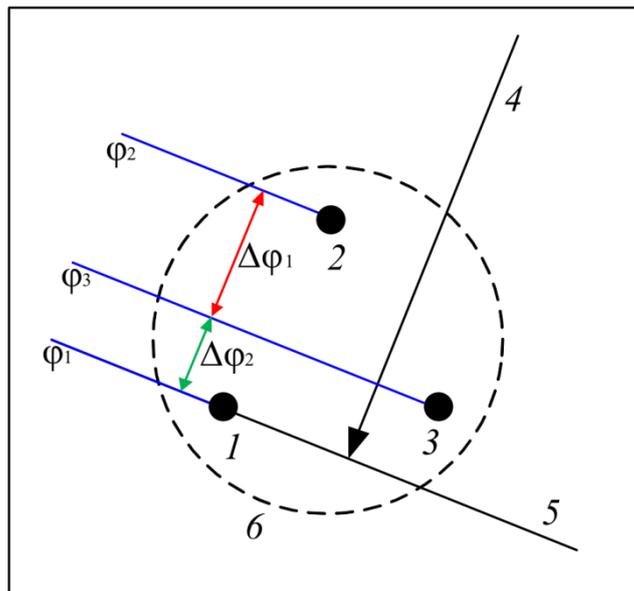


Рис. 1. Схема прохождения акустической волны через модель преобразователя: 1, 2, 3 – пьезоэлектрические преобразователи; 4 – направление волны; 5 – фронт волны; 6 – корпус датчика; $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ – фаза зарегистрированной волны; $\Delta\varphi_1, \Delta\varphi_2$ – разность фаз

Треугольники $\triangle AND$ и $\triangle BMD$ подобны по первому признаку теоремы о подобии треугольников, так как $\angle ADN = \angle BDM$ – стороны одного угла являются дополнительными

лучами сторон другого, $\angle AND = \angle BMD$ из равенства (1). В подобных треугольниках выполняется условие пропорциональности соответственных линейных элементов и в частности:

$$\frac{AN}{BM} = \frac{AD}{BD}. \quad (2)$$

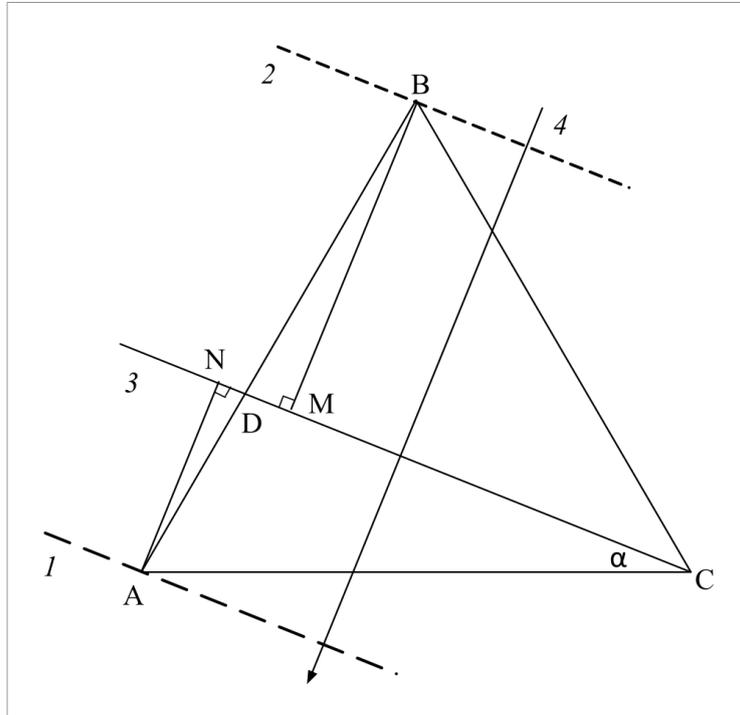


Рис. 2. Схема расстояний между фронтами волны: 1, 2, 3 – фронты волны, зарегистрированной на ПЭП 1, ПЭП 2, ПЭП 3 соответственно; 4 – направление распространения волны; пьезоэлектрические преобразователи: А – 1, В – 2, С – 3

После преобразований, основанных на теореме синусов для рассмотренных выше треугольников, было получено окончательное выражение направления распространения акустико-эмиссионного воздействия:

$$\alpha = NAC = 90^\circ - \text{arccctg} \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{\Delta\varphi_1}{\Delta\varphi_2} + \frac{1}{2} \right) \right) + \pi \cdot n. \quad (3)$$

3. Постановка эксперимента

Для проверки результатов решения обратной задачи проведены эксперименты на стальном листе размерами 500x500x8 мм из стали СтЗпс. Акустико-эмиссионные импульсы возбуждались источником Су-Нильсена (поз. 3 рис. 3) и регистрировались тремя преобразователями акустической эмиссии типа ПП 0,1–0,7, установленными в центр листа. Основная частота регистрируемых сигналов составляла (125 ± 5) кГц и соответствующая ей длина волны для моды волны при фазовой скорости $(5,2 \pm 0,2)$ мм/мкс составляла 41 мм. Расстояние между центрами преобразователей составляло 25 мм, что удовлетворяло условиям моделирования.

Для регистрации сигналов акустической эмиссии использовалась цифровая акустико-эмиссионная система СЦАД 16.03 (ФГУП «СибНИА им. С.А. Чаплыгина», СГУПС, Новосибирск) с дискретностью отсчета аналого-цифрового преобразователя 0,5 мкс.

Все углы отсчитывались относительно направления АС (рис. 2). Во время проведения эксперимента направление распространения акустико-эмиссионного воздействия относительно прямой, соединяющей центры преобразователей, составило $\alpha = (70 \pm 5)^\circ$.

Для определения степени подобия исследуемых сигналов с целью выявления фазовой задержки использовалась формула корреляции Пирсона:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_{i-\Delta n} - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 (y_{i-\Delta n} - \bar{y})^2}}, \quad (4)$$

где x_i и y_i – сигналы акустической эмиссии с номером измерения АЦП i ; Δn – сдвиг сигнала x относительно y ; n – количество измерений на рассматриваемом интервале.

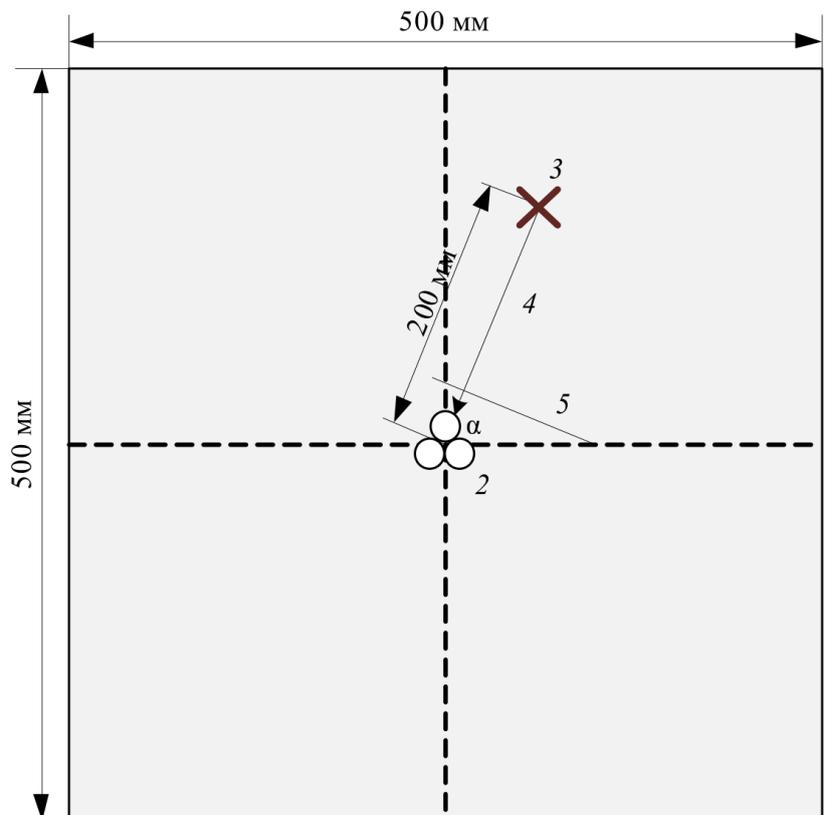


Рис. 3. Схема эксперимента: 1 – контролируемый объект стальной лист толщиной 8 мм; 2 – близкорасположенные преобразователи акустической эмиссии; 3 – место возбуждения события акустической эмиссии; 4 – направления распространения волны; 5 – фронт волны

Как видно из рис. 4, сигналы акустической эмиссии на соседних датчиках похожи по своей форме, но сдвинуты по фазе. Добавив поправку на разность фаз сигналов, можно добиться высокой степени подобия исследуемых сигналов на ограниченном интервале сравнения. Критерием степени подобия служит коэффициент корреляции (4). Коэффициент Δn соответствует сдвигу интервалов сравнения сигналов с преобразователей и принят как разность фаз $\Delta \varphi$ в пределах рассматриваемого интервала. При $\Delta \varphi_1 = 10 \cdot 2\pi/T$ рад и $\Delta \varphi_2 = 4 \cdot 2\pi/T$ рад коэффициенты корреляции достигли максимальных значений на рассматриваемых интервалах и составили $r_1=0,93$ и $r_2=0,87$ соответственно, что указывает на подобия исследуемых сигналов. Расчетный угол получен подстановкой значений $\Delta \varphi_1$ и $\Delta \varphi_2$ в формулу (3) и составил $\alpha = 73,5^\circ$.

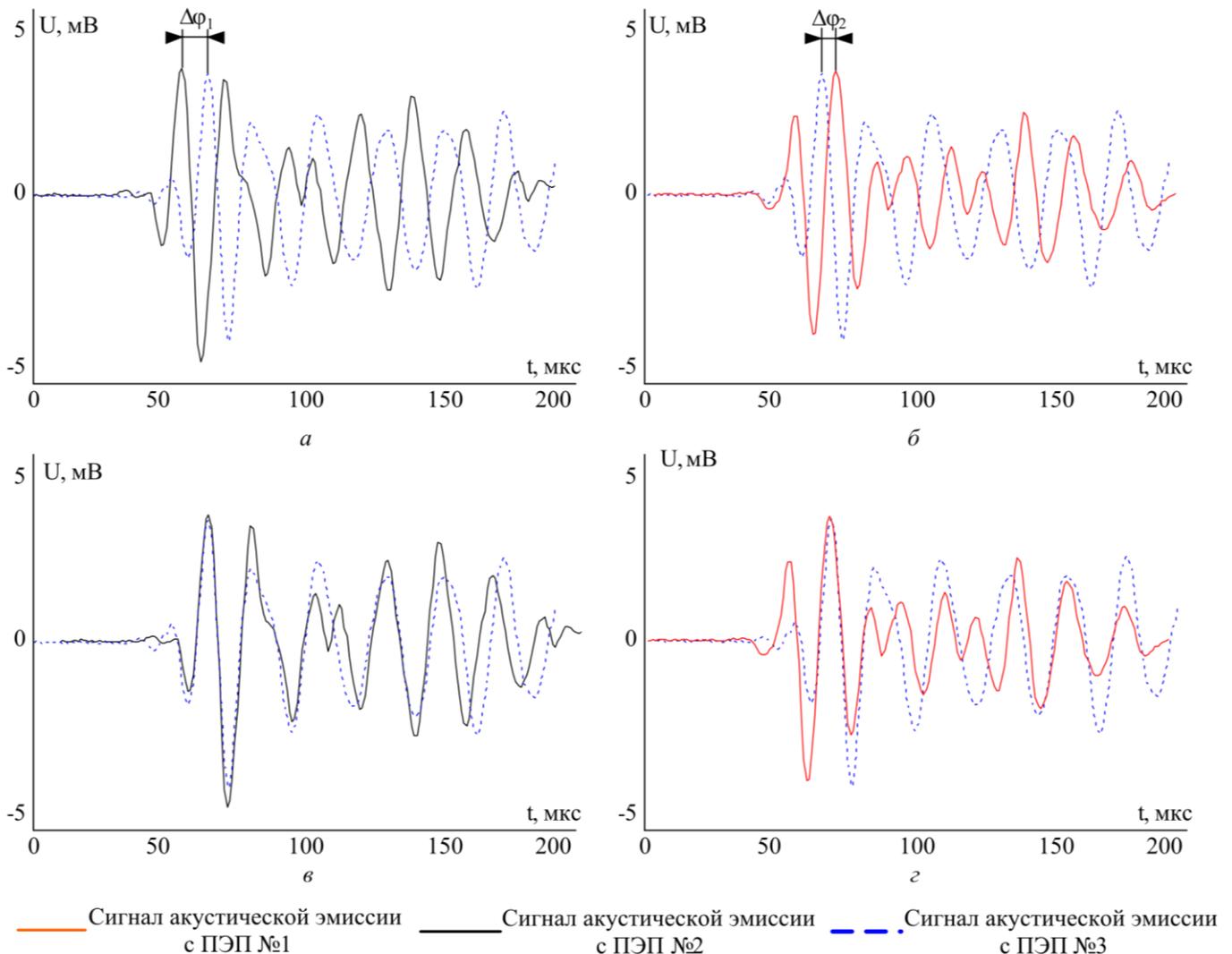


Рис. 4. Графики зависимости амплитуды сигналов от времени с поправкой на фазовую задержку (б, з) и без нее (а, в) между преобразователями 2 и 3 (а, б), 1 и 3 (в, з)

4. Заключение

Для рассчитанной модели фазовой локации с использованием близкорасположенных преобразователей, направление распространения акустико-эмиссионного воздействия пропорционально отношению разности фаз между преобразователями и не зависит от скорости распространения и частоты волны.

Применение фазовой локации источников акустической эмиссии близкорасположенными относительно длины волны преобразователями позволяет определить направления источника акустической эмиссии. В результате экспериментальных исследований для разработанной модели удалось определить направление источника акустической эмиссии с погрешностью в $3,5^\circ$.

Литература

1. Неразрушающий контроль. Справочник : в 8 т. / под общ. ред. В. В. Клюева. Т. 7 : в 2 кн. Кн. 1. В. И. Иванов, И. Э. Власов. Метод акустической эмиссии. Кн. 2. Вибродиагностика / Ф. Я. Балицкий, А. В. Барков, Н. А. Баркова и др. – 2-е изд., испр. – М. : Машиностроение, 2006. – 829 с.: ил.

2. Акустико-эмиссионный контроль качества сварного шва в процессе остывания / Л. Н. Степанова, Е. Ю. Лебедев, С. И. Кабанов, К. В. Канифадин, И. С. Рамазанов, С. А. Бехер // Контроль. Диагностика. – 2009. – № 3. – С. 61–67.
3. Степанова Л. Н., Бехер С. А., Тенитилов Е. С. Методика определения координат дефектов при акустико-эмиссионном контроле свободных колец подшипников // Контроль. Диагностика. – 2010. – № 4. – С. 61–65.
4. Murav'ev V. V., Bekher S. A., Vlasov K. V. Analysis of Errors in Determining the Coordinates of Acoustic-Emission Sources in Sheet-Steel Structures // Russian Journal of Nondestructive Testing. – 2008. – Vol. 44, iss. 7. – P. 480–485. – DOI: 10.1134/S106183090807005X.
5. Неразрушающий контроль. Справочник : в 8 т. / под общ. ред. В. В. Клюева. Т. 3 : И. Н. Ермолов, Ю. В. Ланге. Ультразвуковой контроль. – 2-е изд., испр. – М. : Машиностроение, 2006. – 864 с.: ил.

DEVELOPMENT OF MICROSTRUCTURE DAMAGE IN STRUCTURALLY HETEROGENEOUS MATERIALS UNDER DEFORMATION

V. V. Struzhanov¹, S. S. Volkov^{1*}, T. A. Volkova²

¹*Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620049, 34 Komsomolskaya st., Ekaterinburg, Russian Federation*

²*Urals State University of Railway Transport, 620034, 66 Kolmogorova st., Ekaterinburg, Russian Federation*

*Corresponding author. E-mail: volkovss48@yandex.ru; address for correspondence: ul. Komsomolskaya 34, 620049, Ekaterinburg, Russian Federation. Tel.: +7 (343)375-3594; fax: +7 (343)374-5330

The proposed model represents a micro-heterogeneous medium with random properties of elastic-brittle microstructure elements and with fractures forming during the deformation of structurally heterogeneous materials. The probability of stress exceeding the ultimate strength in one element determines the probability of the failure of this element and the relative damage at the micro level. The suggested methodology for the calculation of damage is based on the use of a single parameter, specifically, the distribution density of the ultimate strengths of structural elements. Defining the increment step for the macro strain axis, we draw segments of the stress-strain curve taking into account the changed properties on each interval. The influence of damage on the stress-strain curve is observed. Uniaxial stress-strain diagram calculation for the exponential distribution of ultimate microstructure strengths in a model material is studied using the proposed methodology.

Keywords: random properties, microstructure damage, ultimate strength, stress-strain curve.

DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.021-030

References

1. Sih G.C.. Fracture mechanics in retrospect in contrast to multiscaling in prospect. In: *Proceedings of the 17-th National Conference of Italian Group of Fracture*, A. Finelli, L. Nobile, eds., Bologna, June 16–18, 2004, pp. 15–37.
2. Szurmi Ph. Microstructural Engineering of Materials. *Science*, 1997, vol. 277, no. 5330, pp. 1183. DOI: 10.1126/science.277.5330.1183.
3. Olson G.B. Computational Design of Hierarchically Structured Materials. *Science*, 1997, vol. 77, pp. 1237–1242. DOI: 10.1126/science.277.5330.1237.
4. Kornev V.M., Kurguzov V.D. Multiparametric sufficient criterion of quasi-brittle fracture for complicated stress state. *Engineering Fracture Mechanics*, 2008, vol. 75, iss. 5, pp. 1099–1113. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2007.04.023.
5. Taylor D. The theory of critical distances. *Engineering Fracture Mechanics*, 2008, vol. 75, pp. 1696–1705. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2007.04.007.
6. Trusov P.V., Volegov P.S., Yanz A.Yu. Two-Scale Models of Polycrystals: Evaluation of Validity of Ilyushin's Isotropy Postulate at Large Displacement Gradients. *Physical Mesomechanics*, vol. 19, iss. 1, pp. 21–34. DOI: 10.1134/S1029959916010033.
7. Volkov S.D., Stavrov V.P. *Statisticheskaya mekhanika kompozitnykh materialov* [Statistical Mechanics of Composite Materials]. Minsk, Belarus. Gos. Univ. Publ, 1978. (In Russian).
8. Volkov S.D. *Statistical Strength Theory*. Series: *Russian Monographs and Texts on Advanced Mathematics and Physics*, vol. XI. New York, Gordon and Breach, 1962.
9. Vildeman V.E., Sokolkin Yu.V., Tashkinov A.A. *Mekhanika neuprugogo deformirovaniya i razrusheniya kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of Non-Elastic Deformation and Fracture of Composite Materials]. Moscow, Nauka Publ., 1997. (In Russian).

10. Volkova T.A., Volkov S.S. Microstructure damage related to deformation properties of grain composites. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2008, vol. 49, iss. 3, pp. 242–250. DOI: 10.1016/j.tafmec.2008.02.004.
11. Volkova T.A., Volkov S.S. Microstructure damage related to stress- strain curve for grain composites. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2009, vol. 52, iss. 2, pp. 83–90. DOI: 10.1016/j.tafmec.2009.08.007.
12. Zaitsev A.V. Second-order moment functions for the random structure of unidirectionally reinforced fibrous composites. In: *Vestnik UGTU-UPI. Mekhanika microneodnorodnykh materialov i razrushenie* [Herald of UGTU-UPI. Mechanics of Micro-Heterogeneous Materials and Fracture]. Ekaterinburg, GOU VPO UGTU-UPI Publ., 2006, no. 11 (82), pp. 161–167. (In Russian).
13. Surikova N.S., Panin V.E., Derevyagina L.S., Lutfullin R.Ya., Manzhina E.V., Kruglov A.A., Sarkeeva A.A. Micromechanisms of Deformation and Fracture in a VT6 Titanium Laminate under Impact Load. *Phys. Mesomech.*, 2015, vol. 18, iss. 3, pp. 250–260. DOI: 10.1134/S1029959915030091.
14. Schastlivtsev V.M., Tabachikova T.I., Yakovleva I.L., Klyueva S.Yu., Kruglova A.A., Khlusova E.I., Orlov V.V. Microstructure and properties of low-carbon weld steel after thermomechanical strengthening. *The Physics of Metals and Metallography*, 2012, vol. 113, iss. 5, pp. 480–488. DOI: 10.1134/S0031918X12050067.
15. Yokobori T. *An Interdisciplinary Approach to Fracture and Strength of Solids*. Groningen, Wolters-Noordhoff Scientific Ltd, 1968.
16. Tamuzs V.P., Kuksenko V.S. *Micromekhanika rasrushenia polimernykh materialov* [Micromechanics of Fracture of Polymeric Materials]. Riga, Zinatne Publ., 1978, 296 p. (In Russian).
17. Struzhanov V.V., Bashurov V.V., Tartashnik K.A. On one approach to the modeling of elastic-brittle material properties. In: *Vestnik UGTU-UPI. Mekhanika microneodnorodnykh materialov i razrushenie* [Herald of UGTU-UPI. Mechanics of Micro-Heterogeneous Materials and Fracture]. Ekaterinburg, GOU VPO UGTU-UPI Publ., 2004, no. 22 (52), pp. 99–109. (In Russian).
18. Privalova V.V., Struzhanov V.V. Some regularities in the behavior of elastic-brittle material under cyclic tension. *Uchenye zapiski Komsomolskogo-na-Amure gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Ser. Nauki o prirode i tekhnike*, 2012, no. I–1 (9), pp. 94–99. (In Russian).
19. *Encyclopedia of Physics*. Flügge S., ed. Mechanics of Solids I, vol. VI a/1, S. Truesdell, ed. Berlin–Heidelberg–New York, Springer-Verlag, 1973.
20. Fridman Ya.B. *Mekhanicheskie svoistva metallov* [Mechanical Properties of Metals. Part 1. Deformation and Fracture]. M., Mashinostroenie Publ., 1974, 472 p. (In Russian).
21. Volkov S.S. *Mekhanika anizotropnykh kompozitov* [Mechanics of Anisotropic Composites]. Ekaterinburg, UrO RAN Publ., 2010, 85 p. (In Russian).

Подана в журнал: 17.04.2016
УДК 539.3
DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.021-030

РАЗВИТИЕ МИКРОСТРУКТУРНОЙ ПОВРЕЖДЕННОСТИ ПРИ ДЕФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРНО-НЕОДНОРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. В. Стружанов¹, С. С. Волков^{1*}, Т. А. Волкова²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения Уральского отделения Российской академии наук, ул. Комсомольская, 34, Екатеринбург, Российская Федерация

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский государственный университет путей сообщения», ул. Колмогорова, 66, Екатеринбург, Российская Федерация

*Ответственный автор. Электронная почта: volkovss48@yandex.ru; адрес для переписки: ул. Комсомольская 34, Екатеринбург, Российская Федерация; телефон: +7(343) 375–35–94; факс: +7 (343)374–53–30

Предложена модель микронеоднородной среды со случайными свойствами элементов микроструктуры и поврежденностью, возникающей при деформировании структурно-неоднородных материалов. Поврежденность микроструктуры рассчитывается как вероятность превышения в элементах микроструктуры случайного напряжения над случайным пределом прочности. Приведена методика расчета поврежденности, основанная на использовании одного параметра, а именно, плотности распределения пределов прочности структурных элементов. Расчет поврежденности дает возможность на каждом шаге нагружения находить макроскопические свойства композита и строить соответствующие участки диаграммы деформирования. Показано влияние поврежденности на диаграмму деформирования. В качестве примера применения методики выполнены расчеты диаграммы одноосного растяжения для экспоненциального закона распределения пределов прочности микроструктуры модельного материала.

Ключевые слова: случайные свойства, поврежденность микроструктуры, предел прочности, диаграммы деформирования.

1. Введение

Значительный интерес в настоящее время проявляется к разработке многоуровневых моделей конструкционных материалов [1–6]. Изучение влияния свойств микроструктуры металлов проводится на моделях, учитывающих микро- и макросвойства деформируемой среды. Металлы рассматриваются как частный случай стохастических композиционных материалов [7–11]. Элементы на макроуровне обладают постоянными детерминированными свойствами. Элементы микроструктуры – это элементы второго порядка малости. Они обладают случайными деформационными и прочностными свойствами.

Методы прогнозирования деформационных свойств композитов различной структуры достаточно хорошо разработаны [7, 9, 10]. Для анализа неоднородности микроструктуры композита используются методы теории вероятностей. В большинстве работ при этом рассматриваются двухкомпонентные композиты с дискретными законами распределения. При этом применение непрерывных распределений предоставляет значительно больше возможностей для исследования [10]. Данные экспериментов позволяют найти параметры распределения случайных свойств микроструктуры материала [7, 12]. При этом изучаются микрошлифы металлов, распределение легирующих элементов, анализируется наличие микрополостей и микротрещин [13, 14]. Используются методы металлографии и электронной микроскопии.

В процессе эксплуатации развивается поврежденность элементов микроструктуры. Многомасштабные критерии разрушения были получены для хрупких сред в работах [4,5]. На ранних стадиях разрушение имеет рассеянный, дисперсный характер [15–17]. Свойства микроструктуры при этом можно считать статистически независимыми. Относительное число разрушенных элементов микроструктуры находится с помощью микроструктурного условия прочности. Это условие зависит от вида нагружения материала и включает параметры распределения случайных микроструктурных напряжений [11, 18].

Накопление поврежденности в ходе нагружения влияет на связь между напряжениями и деформациями и приводит к постепенной деградации свойств материала. На начальной стадии упругого деформирования в микроструктуре возникает незначительная поврежденность [9, 19, 20], которой, как правило, пренебрегают. Дальнейшее развитие поврежденности уже оказывает существенное влияние, что отражается нелинейной зависимостью напряжений и деформаций. Таким образом, микроструктура и её поврежденность определяют свойства структурно-неоднородных материалов и, в конечном итоге, эксплуатационные возможности элементов конструкций.

В данной работе сделана попытка, опираясь на некоторые известные положения механики структурно-неоднородных материалов, а также на полученные оригинальные результаты, построить методику расчета поврежденности микроструктуры и на этой базе создать алгоритм прогнозирования диаграммы связи напряжений и деформаций, отражающей упругую и неупругую стадии деформирования. Особенность исследования заключается в том, что используется только один параметр, а именно, плотность распределения пределов прочности элементов микроструктуры.

2. Поврежденность микроструктуры материалов

В исследовании используется математическая модель микронеоднородной среды, содержащей элементы одного типа – упруго-хрупкие. Рассмотрим элементарный макрообъем материала, состоящий из множества элементов микроструктуры, размеры которых существенно меньше размера данного макрообъема.

Свойства элементов микроструктуры имеют случайный характер, и, следовательно, их пределы прочности определяются случайной величиной $S(X)$, где X – точка микрообъема. Микроструктурный предел прочности $S(X)$ определяется в зависимости от вида напряженного состояния. В общем случае рассматривается тензорная форма записи напряжений [11]. В различных теориях прочности понятие предела прочности определяется как предельно допустимое значение некоторой функции компонентов тензора напряжений. Для такой функции обычно используется термин *эквивалентное напряжение*. Для произвольного напряженного состояния случайную величину $S(X)$ представим как предельно допустимое значение эквивалентных напряжений в элементах микроструктуры.

Пусть в результате воздействия внешних усилий в микрообъеме возникло случайное поле напряжений, характеризуемое случайным эквивалентным напряжением $\sigma(X)$. Тогда микроструктурное условие прочности можно представить как разницу между случайным эквивалентным напряжением $\sigma(X)$ и случайным пределом прочности $S(X)$:

$$w(X) = \sigma(X) - S(X).$$

Если параметр $w(X) > 0$, то напряжение в точке X больше предела прочности, поэтому в элементе микроструктуры произойдет разрушение. При $w(X) < 0$ разрушение не происходит, так как напряжение находится в допустимой области безопасных значений.

Множество реализаций случайной величины ограничено (в силу естественных причин $0 < S(X) < \infty$, $0 < \sigma(X) < \infty$) и обладает мощностью континуума. Поэтому эти реализации полностью заполняют некоторый отрезок $[a, b]$ на действительной оси $0x$, причем

$a \leq 0 \leq b$. Пусть известна плотность распределения $f_w(x)$ непрерывной случайной величины w , тогда поврежденность микроструктуры q (объемное содержание разрушенных элементов микроструктуры) равна

$$q = \int_0^{\infty} f_w(x) dx. \quad (1)$$

Упростим задачу, полагая, что реализовано однородное (неслучайное) поле напряжений с эквивалентным детерминированным напряжением σ . Тогда в элементе микроструктуры произойдет разрушение, если $w(X) = \sigma - S(X) > 0$. Реализации непрерывной случайной величины S расположены в отрезке $[S_1, S_2]$, где S_1 – прочность самого слабого элемента микроструктуры; S_2 – наиболее крепкого ($S_1 > 0, S_2 > 0$). Если на этом отрезке задана плотность распределения случайной величины S , которая естественно совпадает по своим характеристикам с плотностью случайной величины w , то поврежденность вычисляется по формуле

$$q = \int_{S_1}^{\sigma} f(x) dx, \quad (2)$$

являющейся результатом преобразования формулы (1).

Приведем расчет поврежденности, предполагая, что случайная величина S распределена по закону, близкому к экспоненциальному с плотностью распределения:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < S_1 \\ \frac{1}{S} \exp\left(-\frac{x - S_1}{S}\right) & \text{при } x \geq S_1 \end{cases},$$

где $S = \langle S(X) \rangle$ – математическое ожидание пределов прочности. Тогда

$$q = \int_{S_1}^{\sigma} f(x) dx = 1 - \exp\left(-\frac{\sigma - S_1}{S}\right).$$

На рис. 1 показан график плотности распределения предела прочности зерен микроструктуры. Площадь заштрихованной области над интервалом $[S_1, \sigma]$ равна относительной микроструктурной поврежденности.

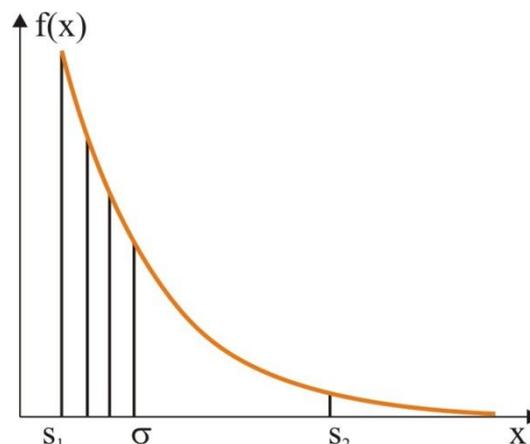


Рис. 1. Плотность распределения микроструктурного предела прочности

3. Макромодули поврежденного материала

Модули микроструктуры являются случайными величинами. Это $K(X)$ – модуль объемной деформации; $G(X)$ – модуль сдвиговой деформации; $E(X)$ – модуль Юнга. Полагаем, что коэффициент Пуассона ν – детерминированная величина, одинаковая для любого элемента микроструктуры. Математические ожидания модулей: $E = \langle E(X) \rangle$, $K = \langle K(X) \rangle$, $G = \langle G(X) \rangle$. Тензор случайных модулей упругости $\Theta(X)$ выражается через случайные модули $K(X)$ и $G(X)$ следующим образом [9, 18]:

$$\Theta(X) = 3K(X) \mathbf{V} + 2G(X)\mathbf{D},$$

где \mathbf{V} – объемная, \mathbf{D} – девиаторная составляющие единичного тензора четвертого ранга \mathbf{I} .

При расчете макроскопических свойств материала к тензору средних модулей упругости $\mathbf{C} = \langle \Theta(X) \rangle$ добавляется тензор поправок \mathbf{h} [6, 9, 18].

$$\mathbf{h} = 3 \Delta K \cdot \mathbf{V} + 2 \Delta G \cdot \mathbf{D},$$

где ΔK и ΔG поправки к средним модулям объемной ΔK и сдвиговой G деформации. В результате получаем тензор эффективных модулей упругости $\tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{C} + \mathbf{h}$.

Для пористых материалов, в которых часть микроэлементов разрушена, возможно ввести случайную индикаторную функцию $\lambda(X)$, равную единице для неразрушенного микроэлемента и нулю для разрушенного. Тогда $p = \langle \lambda(X) \rangle$ – относительное содержание целых подэлементов, а $q = 1 - p$ – поврежденность (относительное содержание разрушенных подэлементов). В работе [9] для таких материалов получены следующие выражения:

$$\Delta K = -pqK \sum_{n=1}^{\infty} (p^n - (-q)^n) d^n; \quad \Delta G = -pqG \sum_{n=1}^{\infty} (p^n - (-q)^n) t^n. \quad d = \frac{3K}{3K + 4G}, \quad t = \frac{6(K + 2G)}{5(3K + 4G)}.$$

Полученные ряды являются геометрическими прогрессиями. Для их сходимости достаточно условия $\max \{ pd, qd, pt, qt \} < 1$. Суммируя прогрессии, получим

$$\Delta K = -K \frac{pq d}{(1 - pd)(1 + qd)}; \quad \Delta G = -G \frac{pq t}{(1 - pt)(1 + qt)}.$$

Зная поправки ΔK , ΔG , вычислим макромодули (эффективные модули) упругости материала $\tilde{K} = K + \Delta K$, $\tilde{G} = G + \Delta G$:

$$\tilde{K} = pK \left(1 - \frac{qd}{(p + qd)(1 - d)} \right); \quad \tilde{G} = pG \left(1 - \frac{qt}{(p + qt)(1 - t)} \right).$$

Этот же результат можно выразить через средний модуль Юнга и коэффициент Пуассона:

$$\begin{aligned} \tilde{K} &= \frac{pE}{3(1 - 2\nu)} \left(1 - \frac{qd}{(p + qd)(1 - d)} \right), & d &= \frac{1 + \nu}{3(1 - \nu)}, \\ \tilde{G} &= \frac{pE}{2(1 + \nu)} \left(1 - \frac{qt}{(p + qt)(1 - t)} \right), & t &= \frac{8 - 10\nu}{15(1 - \nu)}. \end{aligned} \quad (3)$$

Пользуясь известными формулами [20], найдем макро модули (эффективные модули) $\tilde{E}, \tilde{\nu}$:

$$\tilde{E} = \frac{9\tilde{K}\tilde{G}}{3\tilde{K} + \tilde{G}}; \quad \tilde{\nu} = \frac{3\tilde{K} - 2\tilde{G}}{6\tilde{K} + 2\tilde{G}}. \quad (4)$$

На рис. 2 представлена зависимость макро модуля Юнга \tilde{E} от поврежденности q при различных значениях коэффициента Пуассона ν . Начальный модуль Юнга сплошного материала принят равным единице. Чем больше начальный коэффициент Пуассона, тем быстрее накапливаются изменения от q . С приближением критической поврежденности макро модуль \tilde{E} переходит в область отрицательных значений.

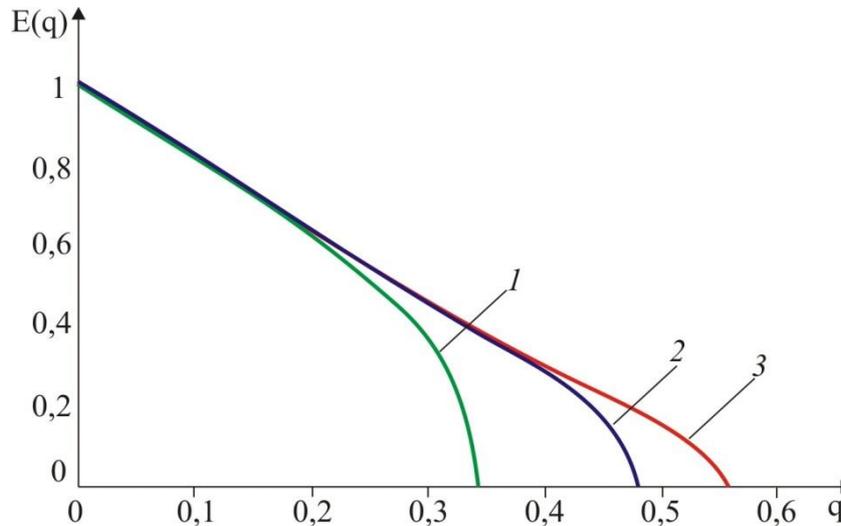


Рис. 2. Зависимость макро модуля Юнга E от поврежденности микроструктуры q при различных коэффициентах Пуассона: 1 – $\nu = 0,35$; 2 – $\nu = 0,31$; 3 – $\nu = 0,27$

4. Поврежденность микроструктуры и диаграмма деформирования при одноосном растяжении

Осуществим теперь одноосное растяжение структурно-неоднородного материала с начальным макро модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона ν . Случайный предел прочности $S(X)$ представляет собой случайное временное сопротивление разрыва для одноосного растяжения с математическим ожиданием (средним значением) S . Деформирование производим поэтапно по жесткой схеме, задавая однородную по объему макродеформацию растяжения $e = e_i = i \Delta e$ ($i = 1, 2, \dots, n, \Delta e - \text{const}$). Тогда на каждом $(i+1)$ -м этапе макро напряжение определяется выражением

$$\sigma = \sigma_{i+1} = \sigma_i + \tilde{E}_i(q_i) \cdot \Delta e. \quad (5)$$

Здесь \tilde{E}_i – макро модуль, вычисленный для поврежденности q_i , достигнутой на предыдущем этапе.

Таким образом, зависимость напряжения от деформации можно рассчитать, используя следующий алгоритм. Пусть на i -м шаге известны величины $\sigma_i, e_i, \tilde{E}_i$. Производя догрузку по формуле (5), находим σ_{i+1} . Затем по формуле (2), где $\sigma = \sigma_{i+1}$ для известной плотности распределения пределов прочности микро элементов вычисляем поврежденность q_{i+1} . Нако-

нец, по формулам (3, 4) определяем новое значение макро модуля \tilde{E}_{i+1} . После этого осуществляем следующее догружение и так далее.

На рис. 3 показаны результаты расчетов поврежденности материала при $E = 100$ ГПа, $\nu = 0,31$, $\Delta e = 0,002$. Пусть $S_1 = 80$ МПа – прочность самого слабого элемента микроструктуры. Пределы прочности микроструктуры подчиняются экспоненциальному закону распределения, заданному выше. Рассмотрим три варианта значений математического ожидания предела прочности: 1 – $S = 250$ МПа; 2 – $S = 300$ МПа; 3 – $S = 400$ МПа. Отметим, что быстрее всего развивается поврежденность для материала с низким уровнем математического ожидания прочности, что соответствует кривой 1 на рис. 3.

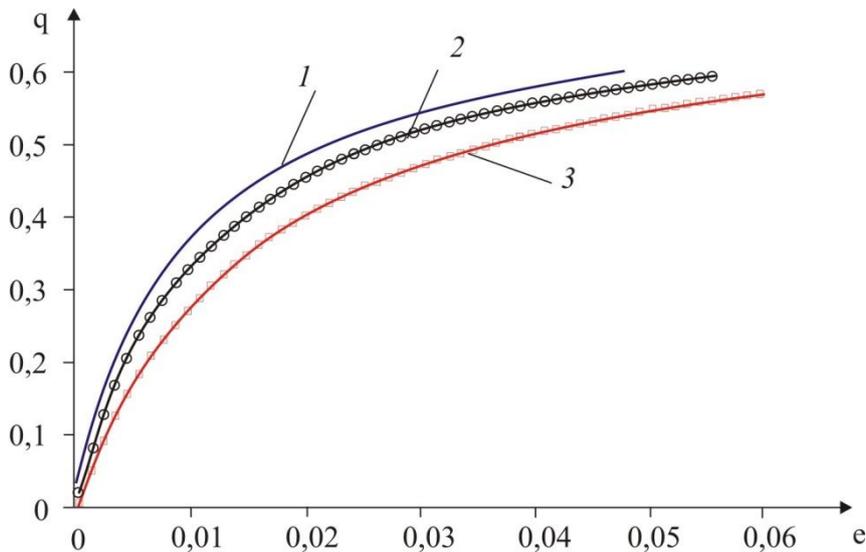


Рис. 3. Зависимость поврежденности от величины деформации при различных параметрах распределения пределов прочности микроструктуры: 1 – $S = 250$ МПа; 2 – $S = 300$ МПа; 3 – $S = 400$ МПа

На рис. 4 представлены зависимости между напряжениями и деформациями для тех же самых параметров.

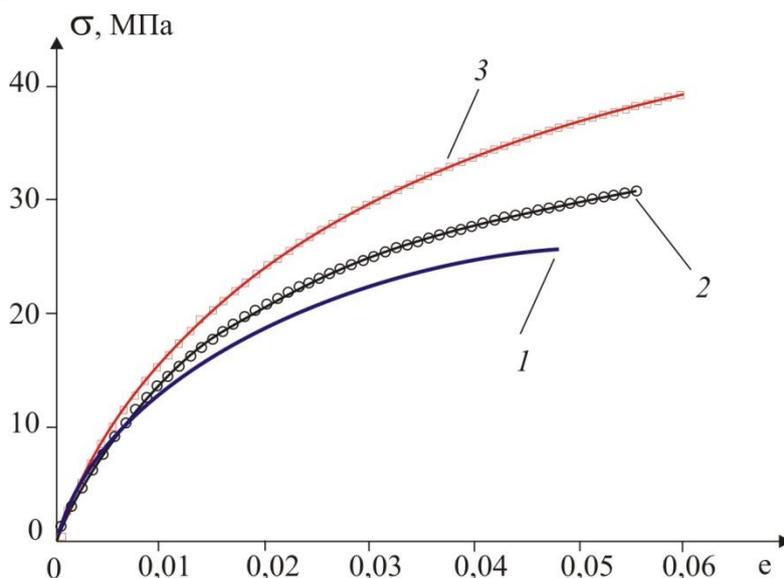


Рис. 4. Диаграммы деформирования при различных параметрах распределения пределов прочности микроструктуры: 1 – $S = 250$ МПа; 2 – $S = 300$ МПа; 3 – $S = 400$ МПа

5. Заключение

Разработана методика расчета поврежденности материала, опирающаяся на использование плотности распределения пределов прочности его микроструктурных элементов. Приведен алгоритм прогнозирования диаграммы деформирования материала по заданной плотности распределения пределов прочности элементов микроструктуры. Данные результаты открывают возможность проектирования материалов с наперед заданными свойствами при варьировании свойств микроструктуры. Также, используя изложенную теорию, можно выйти на решение обратной задачи – определения параметров микроструктуры по экспериментально построенной макродиаграмме деформирования.

Литература

1. Sih G. C. Fracture mechanics in retrospect in contrast to multiscaling in prospect // The 17-th National Conference of Italian Group of Fracture, Bologna, June 16–18, 2004 : proceedings / by education of A. Finelli, L. Nobile. – P. 15–37.
2. Szuromi Ph. Microstructural Engineering of Materials // Science. – 1997. – Vol. 277, no. 5330. – P. 1183. – DOI: 10.1126/science.277.5330.1183.
3. Olson G. B. Computational Design of Hierarchically Structured Materials // Science. – 1997. – Vol. 77. – P. 1237–1242. – DOI: 10.1126/science.277.5330.1237.
4. Kornev V. M., Kurguzov V. D. Multiparametric sufficient criterion of quasi-brittle fracture for complicated stress state // Engineering Fracture Mechanics. – 2008. – Vol. 75, iss. 5. – P. 1099–1113. – DOI: 10.1016/j.engfracmech.2007.04.023.
5. Taylor D. The theory of critical distances // Engineering Fracture Mechanics. – 2008. – Vol. 75. – P. 1696–1705. – DOI: 10.1016/j.engfracmech.2007.04.007.
6. Trusov P. V., Volegov P. S., Yanz A. Yu. Two-Scale Models of Polycrystals: Evaluation of Validity of Ilyushin's Isotropy Postulate at Large Displacement Gradients // Physical Mesomechanics. – Vol. 19, iss. 1. – P. 21–34. – DOI: 10.1134/S1029959916010033.
7. Волков С. Д., Ставров В. П. Статистическая механика композитных материалов. – Минск : БГУ, 1978. – 206 с.
8. Volkov S. D. Statistical Strength Theory. Series: Russian Monographs and Texts on Advanced Mathematics and Physics. Vol. XI. – New York : Gordon and Breach, 1962.
9. Вильдеман В. Э., Соколкин Ю. В., Ташкинов А. А. Механика неупругого деформирования и разрушения композитных материалов / под ред. Ю. В. Соколкина. – М. : Наука. Физматлит, 1997. – 288 с.
10. Volkova T. A., Volkov S. S. Microstructure damage related to deformation properties of grain composites // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2008 – Vol. 49, iss. 3. – P. 242–250. – DOI: 10.1016/j.tafmec.2008.02.004.
11. Volkova T. A., Volkov S. S. Microstructure damage related to stress- strain curve for grain composites // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. – 2009. – Vol. 52, iss. 2. – P. 83–90. – DOI: 10.1016/j.tafmec.2009.08.007.
12. Зайцев А. В. Моментные функции второго порядка случайной структуры однонаправленно армированных волокнистых композитов // Вестник УГТУ-УПИ. Механика микронеоднородных материалов и разрушение : сборник научных трудов. – Екатеринбург : УГТУ-УПИ, 2006. – № 11 (82). – С. 161–167.
13. Micromechanisms of Deformation and Fracture in a VT6 Titanium Laminate under Impact Load / N. S. Surikova, V. E. Panin, L. S. Derevyagina, R. Ya. Lutfullin, E. V. Manzhina, A. A. Kruglov, A. A. Sarkeeva // Physical Mesomechanics. – 2015. – Vol. 18, iss. 3. – P. 250–260. – DOI: 10.1134/S1029959915030091.
14. Microstructure and properties of low-carbon weld steel after thermomechanical strengthening / V. M. Schastlivtsev, T. I. Tabatchikova, I. L. Yakovleva, S. Yu. Klyueva, A. A. Kruglova,

- E. I. Khlusova, V. V. Orlov // *The Physics of Metals and Metallography*. – 2012. – Vol. 113, iss. 5. – P. 480–488. – DOI: 10.1134/S0031918X12050067.
15. Yokobori T. *An Interdisciplinary Approach to Fracture and Strength of Solids*. – Groningen : Wolters-Noordhoff Scientific Ltd, 1968.
16. Тамуж В. П., Куксенко В. С. *Микромеханика разрушения полимерных материалов*. – Рига : Зинатне, 1978. – 296 с.
17. Стружанов В. В., Башуров В. В., Тарташник К. А. Об одном подходе к моделированию свойств упругохрупкого материала // *Вестник УГТУ-УПИ. Механика микронеоднородных материалов и разрушение : сборник научных трудов*. – Екатеринбург : ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2004. – № 22 (52). – С. 99–109.
18. Привалова В. В., Стружанов В. В. Некоторые закономерности изменения свойств упругохрупкого материала в ходе циклического растяжения // *Ученые записки Комсомольского-на Амуре государственного технического университета. Сер. Науки о природе и технике*. – 2012. – № I–1 (9). – С. 94–99.
19. *Encyclopedia of Physics / by education of S. Flügge. Vol. VI a/1. Mechanics of Solids I / by education of S. Truesdell*. – Berlin–Heidelberg–New York : Springer-Verlag, 1973.
20. Фридман Я. Б. *Механические свойства металлов. Часть 1. Деформация и разрушение*. – М. : Машиностроение, 1974. – 472 с.
21. Волков С. С. *Механика анизотропных композитов*. – Екатеринбург : УрО РАН, 2010. – 85с.

DESCRIPTION OF ELASTIC ANISOTROPY OF QUASICRYSTALLINE STRUCTURES USING A DISCRETE ATOMISTIC APPROACH

S. S. Stvolova*, I. Yu. Zubko

Perm National Research Polytechnic University, 29, Komsomolski Pr Perm, Russian Federation

*Corresponding author. E-mail: sofi1234@mail.ru; zoubko@list.ru address for correspondence: 29, Komsomolski Pr, 614990, Perm, Russian Federation.

Prediction of the physical and mechanical properties of nanostructured materials is generally realized within discrete atomistic simulation. Such approach often provides a unique way of studying nanomaterials and requires some restrictions imposed on the used interatomic potentials. A huge amount of different potentials has been used; namely, pairwise, many-particle potentials, the embedded atom method, covalent bond potentials etc. It is well known that, in some cases, computed mechanical properties may differ from experimental data even qualitatively. The paper aims at the demonstration of the ability of different potentials to explain elastic anisotropy by studying invariant representation of the tensor of elastic moduli in the exact form, which has been built using different potentials of interatomic interaction. This makes it possible to study the abilities of different potentials in order to describe the anisotropy of elastic response. The paper demonstrates the ability of two-particle or multi-particle potentials of interatomic interaction on the basis of the Morse potential for the description of the anisotropy of elastic material properties using the obtained invariant representation with an example of two-dimensional quasi-crystalline structures. The pairwise potentials, in contrast to the many-particle embedded atom potential, are shown to be unable to explain elastic anisotropy.

Keywords: discrete-atomistic approach, elastic anisotropy, plain quasi-crystals, many-particle potentials, embedded atom method, generalized Morse potential.

DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.031-041

References

1. Arroyo M., Belytschko T. Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy-Born rule. *Phys. Rev. B*, 2004, vol. 69, iss. 11, p. 5415. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.115415.
2. Reddy C.D., Rajendran S., Liew K.M. Equilibrium configuration and continuum elastic properties of finite sized graphene. *Nanotechnology*, 2006, vol. 17, no. 3, pp. 864–870. DOI: 10.1088/0957-4484/17/3/042.
3. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Nyashin Yu.I. *Bolshie uprugoplasticheskie deformatsii, teoriya, algoritmy, prilozheniya* [Large Elastic-Plastic Deformations, Theory, Algorithms, Applications]. M., Nauka Publ., 1986, 232 p. (In Russian).
4. Clayton J. *Nonlinear Mechanics of Crystals*. London, Springer, 2011, 715 p.
5. Simonov M.V., Zubko I.Yu. Finding equilibrium lattice parameters of different HCP-monocrystals with use of Mie interatomic potential. *Vestnik PNIPU. Mekhanika*, 2012, no. 3, pp. 204–217. (In Russian).
6. Zubko I.Yu., Simonov M.V. Energy-based approach to estimation of elastic moduli of finite sized specimens with HCP-lattice. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta*, 2013, vol. 323, no. 2, pp. 194–200. (In Russian).
7. Zubko I.Yu. Computation of elastic moduli of graphene monolayer in non-symmetric formulation using energy-based approach. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 2015, vol. 18, no. 2, pp. 37–50. (In Russian).

8. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 1984, vol. 29, no. 12, pp. 6443–6453. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443.
9. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine A*, 1984, vol. 50, iss. 1, pp. 45–55. DOI: 10.1080/01418618408244210.
10. Sutton A.P., Chen J. Long-range Finnis–Sinclair potentials. *Philosophical Magazine Letters*, 1990, vol. 61, iss. 3, pp. 139–146. DOI: 10.1080/09500839008206493.
11. Israilishvili J.N. *Intermolecular and surface forces*. Academic Press: Harcourt Brace and Company, 1998, 450 pp.
12. Chernykh K.F. *Vvedenie v anizotropnyuyu uprugost* [Introduction into Anisotropic Elasticity]. M., Nauka Publ., 1988, 190 p. (In Russian).

About the authors

Stvolova Sofya Sergeevna – a 4-th year student of Perm National Research Polytechnic University, Department of Mathematical Modelling of Systems and Processes (e-mail: sofi1234@mail.ru)

Zubko Ivan Yurievitch – Ph.D. in physical and mathematical sciences, Associate Professor, Department of Mathematical Modelling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (e-mail: zoubko@list.ru)

Подана в журнал: 29.04.2016
УДК 538.911, 539.32
DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.031-041

ОПИСАНИЕ УПРУГОЙ АНИЗОТРОПИИ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ ДИСКРЕТНО-АТОМИСТИЧЕСКОГО ПОДХОДА

С. С. Стволова*, И. Ю. Зубко

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Комсомольский пр., 29, Пермь, Российская Федерация*

*Ответственный автор. Электронная почта: sofi1234@mail.ru; адрес для переписки: 614990,
Комсомольский пр., 29, Пермь, Российская Федерация

Прогнозирование физико-механических свойств наноструктурированных материалов в рамках дискретно-атомистического моделирования, зачастую представляющего собой единственный способ исследования таких объектов, накладывает ряд требований на используемые потенциалы межатомного взаимодействия. В частности, используемые потенциалы должны описывать анизотропию механических свойств кристаллических материалов. Известно множество потенциалов различного типа – двух- и многочастичные, метод погруженного атома, потенциалы ковалентной связи. Получаемые с их помощью оценки механических свойств в ряде случаев могут даже качественно отличаться от экспериментальных данных. Для демонстрации возможностей различных потенциалов описывать анизотропию упругих свойств кристаллических материалов в работе получено инвариантное представление тензора упругих модулей в виде конечных сумм для потенциалов произвольного типа. Это позволяет исследовать возможности различных потенциалов описывать анизотропию упругого отклика. С помощью полученного инвариантного представления тензора линейно-упругих модулей на примере двумерных квазикристаллических структур продемонстрированы возможности нескольких двух- и многочастичных потенциалов, построенных на основе предложенной авторами модификации потенциала Морзе. Показано, что в отличие от многочастичного потенциала погруженного атома, парные потенциалы в принципе не могут описать анизотропии упругих свойств.

Ключевые слова: дискретно-атомистическое моделирование, упругая анизотропия, плоские квазикристаллы, многочастичные потенциалы, метод погруженного атома, обобщенный потенциал Морзе.

1. Введение

В связи с широким применением новых армированных наночастицами композиционных и других наноструктурированных материалов возникает необходимость прогнозирования их физико-механических свойств. Классические подходы механики континуума напрямую не применимы к таким объектам, как отдельная наночастица или элемент наноструктурированного материала. Однако тела с малым числом атомов являются удобным объектом для изучения в рамках дискретно-атомистических подходов. В работе рассматриваются материалы с кристаллическим строением с произвольным типом связи, потенциал межатомного взаимодействия для которой записывается в виде, допускающем применение как потенциала погруженного атома для металлической связи, так и многочастичных потенциалов, используемых при описании ковалентной связи в углеродных материалах. Целью работы является исследование возможности потенциалов различного типа описывать анизотропию тензора линейно-упругих свойств.

При постановке задачи оценки упругих свойств наночастиц используются понятия механики сплошной среды, которые к подобным объектам с дискретным строением напря-

мую применять нельзя. Будем считать, что образцу конечного размера ставится в соответствие упругое сплошное тело, проявляющее аналогичную реакцию на приложение внешних механических воздействий. Для определения деформаций кристалла задаются две его конфигурации – начальная и текущая. Однородной деформацией кристаллического нанообразца назовем изменения длин и углов между прямыми линиями, соединяющими атомы, и описываемые однородным тензором второго ранга, который соответствует аффинору \mathbf{F} , используемому в механике континуума. Пусть \mathbf{R}_k – радиус-вектор произвольного k -го атома образца в начальной конфигурации, тогда в текущей конфигурации его положение задается вектором $\mathbf{r}_k = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_k$ (правило Коши-Борна [1, 2]). Задача определения упругих модулей наночастиц рассматривается в энергетической постановке, согласно которой плотность потенциальной энергии деформированного кристаллического образца приравнивается плотности упругой энергии тела и искомые упругие модули находятся как ее вторые производные по параметрам деформирования вблизи отсчетной конфигурации.

При описании малых упругих деформаций твердых тел в большинстве работ используется модель линейно-упругой среды, когда в качестве меры деформаций рассматривается линейный тензор малых деформаций. Закон Гука для анизотропного линейно-упругого тела имеет вид линейной связи тензора напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$ и тензора $\boldsymbol{\varepsilon}$, задаваемой с помощью анизотропного тензора четвертого ранга $\mathbf{\Pi}$ линейно-упругих свойств материала:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{\Pi} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (1)$$

При использовании симметричных $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}$ тензор $\mathbf{\Pi}$ симметричен относительно перестановок внутри первой и последней пар индексов:

$$\Pi_{ijkl} = \Pi_{jikl} = \Pi_{ijlk}. \quad (2)$$

Массовая плотность внутренней энергии u совпадает при отсутствии тепловых явлений с плотностью упругой энергии и для линейно-упругой среды имеет вид:

$$\hat{\rho} u = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{\Pi} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (3)$$

Эта величина представляет собой положительно определенную квадратичную форму, т.е. $u > 0$ при $\boldsymbol{\varepsilon} \neq \mathbf{0}$ и $u = 0$ при $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$. Отсюда следует дополнительная симметрия $\mathbf{\Pi}$ относительно перестановки пар индексов:

$$\Pi_{ijkl} = \Pi_{klij}. \quad (4)$$

Компоненты тензора $\mathbf{\Pi}$ (упругие модули) в анизотропном случае имеют ясный физический смысл в материальных осях, связанных со структурой материала, например в кристаллографических осях для монокристаллов или в осях, связанных с ориентацией армирующих элементов композиционного материала. Использование тензора малых деформаций подразумевает при замене системы отсчета допустимость наложения только малого поворота системы отсчета, поэтому закон (1) применим лишь для деформируемых тел, не испытывающих (больших) поворотов относительно инерциальной системы отсчета, в которой решается задача. По отношению к малым поворотам тензор $\boldsymbol{\varepsilon}$ является инвариантным. Второй тензор напряжений Пиоли-Кирхгофа связан с тензором напряжений Коши как $\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{J}^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{P}_{\Pi} \cdot \mathbf{F}^T$ [3] и при малых упругих искажениях выражается через линейный тензор деформаций $\boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{F} + \mathbf{F}^T)/2 - \mathbf{I}$:

$$\mathbf{P}_{\Pi} = \mathbf{H} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (5)$$

2. Энергетический подход при дискретно-атомистическом моделировании

В общем случае потенциальная энергия системы взаимодействующих атомов [4] представляется как сумма

$$\Phi = \sum_{i=1}^M \Phi_1(\mathbf{R}_{(i)}) + \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \Phi_2(\mathbf{R}_{(ji)}) + \sum_{i=1}^{M-2} \sum_{j=i+1}^{M-1} \sum_{k=j+1}^M \Phi_3(\mathbf{R}_{(ji)}, \mathbf{R}_{(ki)}, \mathbf{R}_{(kj)}) + \dots, \quad (6)$$

где $\mathbf{R}_{(i)}$ – радиус-вектор, задающий положение i -го атома; $\mathbf{R}_{(ij)} = \mathbf{R}_{(j)} - \mathbf{R}_{(i)}$; M – полное число атомов образца; $\Phi_1(\mathbf{R}_{(i)})$ – часть потенциальной энергии атомов, которая не зависит от их взаимодействия, а определяется полем некоторой внешней силы; $\Phi_2(\mathbf{R}_{(ij)})$ – потенциальная энергия парного взаимодействия или двухчастичный потенциал; $\Phi_3(\mathbf{R}_{(ij)}, \mathbf{R}_{(ki)}, \mathbf{R}_{(kj)})$ – трехчастичный потенциал. Двухчастичный потенциал межатомного взаимодействия характеризует изменение потенциальной энергии при изменении расстояния между парами атомов. Этот потенциал с помощью некоторой функциональной зависимости описывает, что при сближении два атома начинают отталкиваться, а при удалении притягиваться. Поскольку атомы нельзя сдвинуть бесконечно близко, то в ноле такая функция стремится к бесконечности. При увеличении расстояния между парой атомов эта функция выходит на горизонтальную асимптоту, а сила взаимодействия, модуль которой равен тангенсу угла наклона касательной к графику функции $\Phi_2(\mathbf{R}_{(ij)})$ стремится к нулю. Трехчастичный потенциал учитывает не только расстояние между двумя атомами, как в случае двухчастичного потенциала, но влияние конфигурации ближайших атомов. Заметим, что силы взаимодействия каждого выбранного атома со всеми остальными атомами образца, вычисляемые с помощью двухчастичного потенциала, аддитивны. Для многочастичных потенциалов аддитивности сил взаимодействия нет. В рассматриваемом случае действие внешних сил не рассматривается, поэтому далее $\Phi_1(\mathbf{R}_{(i)}) = 0$.

При исследовании механических свойств кристаллов рассматриваются конфигурации с однородным распределением атомов, каждая из которых характеризуется набором параметров межатомного расстояния (для простых решеток это один параметр, для сложных решеток параметров может быть несколько). Принимается, что отсчетная конфигурация является равновесной и может быть определена из условия минимума потенциальной энергии набора взаимодействующих атомов по параметрам решетки.

Для расчета упругих модулей кристаллических систем в рамках энергетического подхода в статической постановке [5–7] принимается, что плотность упругой энергии и плотность потенциальной системы взаимодействующих атомов кристалла в текущей конфигурации совпадают. Тогда производные от плотности потенциальной энергии дискретной системы атомов по мерам деформации дадут выражения для вычисления компонент тензоров напряжений (с помощью первых производных) и компонент тензора линейно-упругих свойств (вторые производные). Пусть $\hat{\Phi}(\mathbf{F})$ – полная потенциальная энергия однородно деформированного кристаллического образца в текущей конфигурации. Энергия образца в отсчетной конфигурации $\Phi_0 = \hat{\Phi}(\mathbf{I})$ соответствует материалу с заданной кристаллической структурой и минимальным значением потенциальной энергии по параметрам решетки. Относя изменение полной потенциальной энергии деформированного кристаллического образца к его объему в отсчетной конфигурации Ω_0 , получим плотность упругой энергии и тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа:

$$\mathbf{P} = \Omega_0^{-1} \partial(\hat{\Phi}(\mathbf{F}) - \Phi_0) / \partial \mathbf{F}^T = \Omega_0^{-1} \partial \hat{\Phi}(\mathbf{F}) / \partial \mathbf{F}^T. \quad (7)$$

Тензор напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$ находится как $\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{J}^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{P}$, где $J = \det \mathbf{F} = \hat{\Omega} / \Omega_0$, т. е. тензор напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma} = \hat{\Omega}^{-1} \mathbf{F} \cdot \partial \hat{\Phi}(\mathbf{F}) / \partial \mathbf{F}^T$.

Рассмотрим представление потенциальной энергии в случае учета только двухчастичного взаимодействия, используя для простоты вместо набора векторов, соединяющих различные пары атомов, обозначение $\Delta \mathbf{R}$ и $\Delta \mathbf{r}$ в двух конфигурациях:

$$\hat{\Phi}(\mathbf{F}) = \sum \hat{\Phi}(|\Delta \mathbf{r}|) = \sum \hat{\Phi}(|\mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{R}|) = \sum \hat{\Phi}(\sqrt{\Delta \mathbf{R} \cdot \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{R}}),$$

где $\sum(\cdot)$ — упрощенное обозначение суммы потенциалов (6). Производная по тензору деформационного градиента \mathbf{F} в этом случае приводит к выражению:

$$\Omega_0 \mathbf{P} = \partial \hat{\Phi}(\mathbf{F}) / \partial \mathbf{F}^T = \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) \partial \sqrt{\Delta \mathbf{R} \cdot \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{R}} / \partial \mathbf{F}^T = \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) |\Delta \mathbf{r}|^{-1} \Delta \mathbf{R} \Delta \mathbf{r},$$

следовательно, для тензора напряжений Коши получим выражение

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{\Omega}^{-1} \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) \Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{r} / |\Delta \mathbf{r}|, \quad \mathbf{P}_{II} = \Omega_0^{-1} \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) \Delta \mathbf{R} \Delta \mathbf{R} / |\Delta \mathbf{r}|, \quad (8)$$

симметричное для любого потенциала межатомного взаимодействия.

При учете многочастичного взаимодействия в методе погруженного атома [8–10] потенциальная энергия системы атомов определяется выражением, в котором учтено, что отталкивание всех атомов описывается согласно закону парного взаимодействия, а притяжение описывается нелинейной функцией $\gamma(\cdot)$, задающей влияние окружения произвольного атома (функция погружения). Окружение определяется множеством S_i номеров атомов, участвующих в формировании электронного газа вокруг i -го атома:

$$\hat{\Phi}(\mathbf{F}) = \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \varphi^+(|\mathbf{r}_{(ji)}|) + \sum_{i=1}^M \gamma \left(\sum_{j \in S_i} \varphi^- (\mathbf{r}_{(ji)}) \right). \quad (9)$$

Производная от первого слагаемого даст выражение, аналогичное полученной ранее сумме. Второе слагаемое – при использовании обозначений $(\varphi^- (\mathbf{r}_{(ij)}))' \equiv \mathbf{f}_{(ij)}^-$:

$$\begin{aligned} d \gamma \left(\sum_{j \in S_i} \varphi^- (\mathbf{r}_{(ij)}) \right) / d \mathbf{F}^T &= \gamma' \left(\sum_{j \in S_i} \varphi^- (\mathbf{r}_{(ij)}) \right) \sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^-; \\ \mathbf{P} &= \Omega_0^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{r}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) \right\}; \\ \boldsymbol{\sigma} &= \hat{\Omega}^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{r}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) \right\}; \end{aligned} \quad (10)$$

$$\mathbf{P}_{II} = \Omega_0^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{F}_{(ij)}^- \right) \right\}, \quad (11)$$

где $\mathbf{F}_{(ij)}^- \equiv \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{f}_{(ij)}^-$. Так как вектор $\mathbf{f}_{(ij)}^-$ (или $\mathbf{F}_{(ij)}^-$) не обязательно направлен вдоль $\mathbf{r}_{(ij)}$ (или $\mathbf{R}_{(ij)}$), то получаемые тензоры (10–11) могут быть несимметричными.

Для вычисления упругих модулей в несимметричном случае при малых деформациях необходимо найти производную от тензора напряжений (11):

$$d^2u / d\mathbf{F}^2 = \Omega_o^{-1} d \left(\sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{f}_{(ij)}^- \mathbf{R}_{(ij)} \right) \right) / d\mathbf{F}.$$

В итоге получим тензор четвертого ранга:

$$\Omega_o \partial \mathbf{P}_{II} / \partial \mathbf{F} = \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \frac{(\varphi^+)'' |\mathbf{r}_{(ij)}| - (\varphi^+)'}{|\mathbf{r}_{(ij)}|^3} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \frac{(\varphi^+)'}{|\mathbf{r}_{(ij)}|} \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\} + \sum_{i=1}^M \left\{ \gamma'' \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) + \gamma' \sum_{j \in S_i} \left(\mathbf{g}_{(ij)} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right) \right\},$$

где \mathbf{e}_k – векторы фиксированного пространственного базиса; производные γ' и γ'' функции γ имеют аргумент $\sum_{j \in S_i} \varphi^- (\mathbf{r}_{(ij)})$, а тензор второго ранга $\mathbf{g}_{(ij)}$ определен как $\mathbf{g}_{(ij)} \equiv \partial \mathbf{f}_{(ij)}^- / \partial \mathbf{r}_{(ij)} = \partial^2 \varphi^- (\mathbf{r}_{(ij)}) / \partial \mathbf{r}_{(ij)}^2$. При малых деформациях $\mathbf{F} \rightarrow \mathbf{I}$ инвариантное представление тензора \mathbf{H} линейно-упругих модулей для кристаллического материала в отсчетной конфигурации имеет вид:

$$\Omega_o \mathbf{H} = \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \frac{(\varphi^+)'' |\mathbf{R}_{(ij)}| - (\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|^3} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \frac{(\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|} \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\} + \sum_{i=1}^M \sum_{j \in S_i} \left\{ \gamma'' \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{F}_{(ij)}^- \right) \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{F}_{(ij)}^- \right) + \gamma' \sum_{j \in S_i} \left(\mathbf{G}_{(ij)} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right) \right\}, \quad (12)$$

где $\mathbf{G}_{(ij)} = \partial^2 \varphi^- (\mathbf{R}_{(ij)}) / \partial \mathbf{R}_{(ij)}^2$; $\mathbf{F}_{(ij)}^- = d\varphi^- (\mathbf{R}_{(ij)}) / d\mathbf{R}_{(ij)}$. В общем случае выражение (12) не обладает симметрией в парах первых и вторых диад, которая возможна только в случае $\mathbf{F}_{(ij)}^- \parallel \mathbf{R}_{(ij)}$. Без учета погружения $\gamma(x) = -1/2x$:

$$\Omega_o \mathbf{H} = \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \frac{(\varphi^+)'' |\mathbf{R}_{(ij)}| - (\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|^3} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \frac{(\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|} \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\} - \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \mathbf{G}_{(ij)} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\}.$$

3. Исследование упругой анизотропии для различных потенциалов

Рассмотрим применение полученных соотношений в частном случае двумерных квазикристаллических структур. Для описания металлической связи в дискретно-атомистическом моделировании используется метод погруженного атома [8–10], являющийся примером многочастичного потенциала. Для того чтобы группы атомов взаимодействовали на большом расстоянии согласно экспериментальным законам (описываются потенциалами Морзе или Ми [11]), а на малых расстояниях учитывалась металлическая (многочастичная) связь, предлагается модификация метода, основанная на применении обобщенного потенциала Морзе:

$$\frac{\Phi}{\beta} = \frac{1}{m-n} \left[\sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \left\{ n \exp\left(m\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) - m(1-c_{ij}) \exp\left(n\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) \right\} - \frac{m}{2} \sum_{i=1}^M \left\{ \sum_{j=1, j \neq i}^M c_{ij} \exp\left(n\gamma\left(|\mathbf{r}_{(ji)}| - \alpha\right)\right)^p \right\}^{1/p} \right], \quad (13)$$

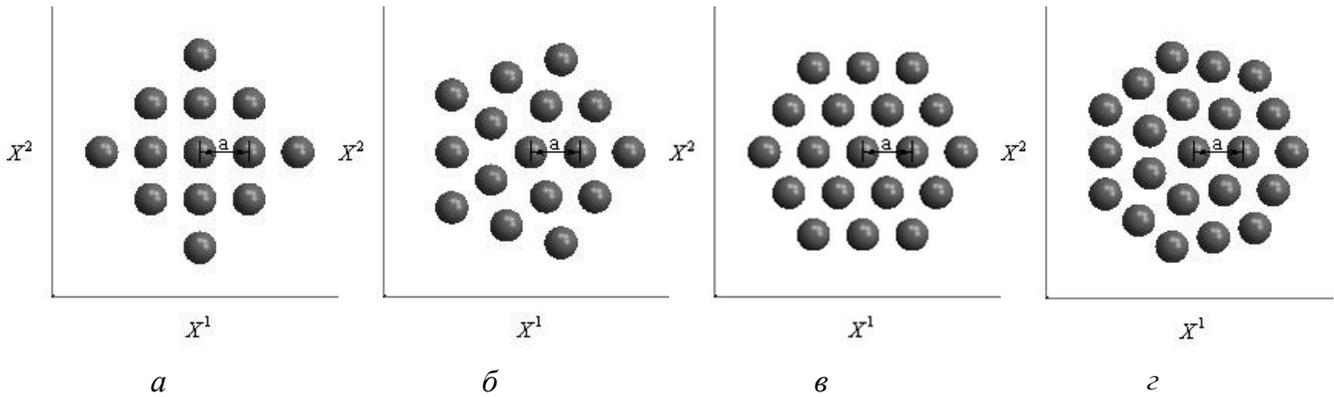
где M – число всех атомов образца; $m, n \in \mathbb{Z}$; $c_{ij} \in \{0, 1\}$; $p \in \{1, 2\}$; $c_{ij} = 1$ для атомов, участвующих в образовании электронного газа вблизи положения i -го атома; $c_{ij} = 0$ для всех остальных атомов. Размер окрестности для учета соседей может быть от одной до нескольких координационных сфер. Также заданием параметров c_{ij} , учитывающих для каждого атома взаимное притяжение к нему трех ближайших соседей, может быть описана и ковалентная связь [7]. При $p = 1$ и любом числе атомов или для двух изолированных атомов $M = 2$ и любого p потенциал (13) совпадает с обобщенным потенциалом Морзе:

$$\frac{\Phi}{\beta} = \frac{1}{m-n} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \left\{ n \exp\left(m\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) - m \exp\left(n\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) \right\}. \quad (14)$$

При условии, что для всех атомов $c_{ij} = 0$ также получается обобщенный потенциал Морзе, при $p = 2$ получается аналог потенциала Финниса-Синклэра [9]. Параметр α задает равновесное расстояние для изолированной пары атомов; β – энергия связи этих двух атомов. При $m = 2$ и $n = 1$ получается классический потенциал Морзе:

$$\frac{\Phi}{\beta} = \frac{1}{m-n} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \left\{ \exp\left(-2\gamma\left(|\mathbf{r}_{(ji)}| - \alpha\right)\right) - 2 \exp\left(-\gamma\left(|\mathbf{r}_{(ji)}| - \alpha\right)\right) \right\}.$$

Для плоских квазикристаллических структур с осями симметрии различного порядка (рисунок) получено, что при использовании парных потенциалов для оси симметрии любого порядка, кроме четвертого, тензор упругих свойств содержит только две ненулевые независимые компоненты. При этом коэффициент Пуассона для этих структур равен $1/3$, т.е. в действительности получался только один независимый упругий модуль (таблица). Для кристалла с осью симметрии 4-го порядка коэффициент Пуассона отрицателен и существует два независимых упругих модуля. Во всех случаях начальная равновесная конфигурация определялась из условия минимума полной потенциальной энергии системы по параметру a межатомного расстояния (рисунок). Объемная плотность упругой энергии структур определялась по отношению к площади образцов. Известная из экспериментов и теоретических оценок зависимость механических свойств от размеров тела наблюдалась и для рассмотренных структур, хотя отдельно этот вопрос не исследовался, поскольку целью была проверка способности различных потенциалов описывать анизотропию упругих свойств, характер которой не связан с размерами образца.



Элементы плоских квазикристаллических структур с осями симметрии:
а – 4-го порядка; б – 5-го порядка; в – 6-го порядка; з – 7-го порядка

Значения упругих модулей, коэффициента Пуассона и модуля Юнга при различных потенциалах межатомного взаимодействия и коэффициентах m и n

Потенциал	Ось симметрии			
	4-го порядка	5-го порядка	6-го порядка	7-го порядка
Потенциал Морзе $m = 2, n = 1,$ $\alpha\gamma = 3.14$	$H_{1111} = H_{2222} = 25.52\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = -2.63\beta / \alpha^2$ $E = 27.27\beta / \alpha^2$ $\nu = -0.09$	$H_{1111} = H_{2222} = 22.78\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = 7.59\beta / \alpha^2$ $E = 20.25\beta / \alpha^2$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 24.48\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = 8.16\beta / \alpha^2$ $E = 21.76\beta / \alpha^2$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 22.41\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = 7.47\beta / \alpha^2$ $E = 19.92\beta / \alpha^2$ $\nu = 1/3$
Потенциал Морзе $m = 5, n = 4,$ $\alpha\gamma = 3.14$	$H_{1111} = H_{2222} = 131.0\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = -2.00\beta / \alpha^2$ $E = 131.0\beta / \alpha^2$ $\nu = -0.01$	$H_{1111} = H_{2222} = 125.9\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = 41.98\beta / \alpha^2$ $E = 111.9\beta / \alpha^2$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 191.3\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = 63.77\beta / \alpha^2$ $E = 170.1\beta / \alpha^2$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 111.8\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = H_{1212} = 37.26\beta / \alpha^2$ $E = 99.35\beta / \alpha^2$ $\nu = 1/3$
Потенциал (13) $m = 2, n = 1,$ $\alpha\gamma = 3.14,$ $p = 2, c_{ij} = 1$	$H_{1111} = H_{2222} = 2.95\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = 2.03\beta / \alpha^2$ $H_{1212} = -0.06\beta / \alpha^2$ $E = 1.55\beta / \alpha^2$ $\nu = 0.69$	$H_{1111} = H_{2222} = 2.77\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = 2.63\beta / \alpha^2$ $H_{1212} = 0.07\beta / \alpha^2$ $E = 0.27\beta / \alpha^2$ $\nu = 0.95$	$H_{1111} = H_{2222} = 2.86\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = 2.81\beta / \alpha^2$ $H_{1212} = 0.03\beta / \alpha^2$ $E = 0.10\beta / \alpha^2$ $\nu = 0.98$	$H_{1111} = H_{2222} = 2.80\beta / \alpha^2$ $H_{1122} = 2.42\beta / \alpha^2$ $H_{1212} = 0.19\beta / \alpha^2$ $E = 0.71\beta / \alpha^2$ $\nu = 0.86$

Из условия положительной определенности тензора линейно-упругих свойств **H** для двумерной среды, как в рассмотренных примерах, следуют ограничения $E > 0, \nu \in (-1; 1)$. Модуль Юнга определяется соотношением $E = (H_{1111}^2 - H_{1122}^2) / H_{1111}$; коэффициент Пуассона – $\nu = H_{1122} / H_{1111}$. При использовании потенциала (13) погруженного атома для различ-

ных двумерных структур вне зависимости от значений параметров потенциал получалось одинаковое число независимых модулей. Это число лишь частично соответствует результатам линейной теории упругости [12]. Отличие от классических результатов для двумерной среды дает структура с осью симметрии 6-го порядка, которая должна описываться только двумя независимыми ненулевыми упругими модулями. Метод погруженного атома при этом дает три независимых компоненты тензора упругих свойств. Также для всех рассмотренных случаев при использовании потенциала (13) получается заниженное значение сдвигового модуля $G=H_{1212}$. Эти особенности требуют дополнительного исследования. Тем не менее для более сложных случаев симметрии метод погруженного атома, в отличие от парных потенциалов, дает физически более корректные результаты.

4. Заключение

Для тензора упругих модулей, вычисляемого в статическом подходе при дискретно-атомистическом моделировании, получена инвариантная запись. С помощью этого представления в работе показано, что парные потенциалы позволяют описать только изотропию упругих свойств, поэтому их применение для кристаллических тел не всегда допустимо. На примере предложенной авторами статьи модификации метода погруженного атома и обобщенного потенциала Морзе показано, что многочастичные потенциалы позволяют более адекватно прогнозировать упругую анизотропию кристаллов.

Благодарность

Работа выполнена в рамках задания № 2014/152 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части госзадания Минобрнауки РФ (код проекта — 1911), а также при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №14-01-00069, грант №15-01-08678).

Литература

1. Arroyo M., Belytschko T. Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy–Born rule // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69, iss. 11. – P. 5415. – DOI: 10.1103/PhysRevB.69.115415.
2. Reddy C. D., Rajendran S., Liew K. M. Equilibrium configuration and continuum elastic properties of finite sized graphene // *Nanotechnology.* – 2006. – Vol. 17, no. 3. – P. 864–870. – DOI: 10.1088/0957-4484/17/3/042.
3. Поздеев А. А., Трусков П. В., Няшин Ю. И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
4. Clayton J. *Nonlinear Mechanics of Crystals.* – London: Springer, 2011. – 715 p.
5. Симонов М. В., Зубко И. Ю. Определение равновесных параметров решетки различных ГПУ-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия Ми // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика.* – 2012. – № 3. – С. 204–217.
6. Зубко И. Ю., Симонов М. В. Энергетический способ расчета упругих модулей образцов конечных размеров с ГПУ-решеткой // *Известия Томского политехнического университета.* – 2013. – Т. 323, № 2. – С. 194–200.
7. Зубко И. Ю. Вычисление упругих модулей монослоя графена в несимметричной постановке с помощью энергетического подхода // *Физическая мезомеханика.* – 2015. – Т. 18, № 2. – С. 37–50.
8. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B.* – 1984. – Vol. 29, no. 12. – P. 6443–6453. – DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6443.

9. Finnis M. W., Sinclair J. E. A simple empirical N-body potential for transition metals // Philosophical Magazine A. – 1984. – Vol. 50, iss. 1. – P. 45–55. – DOI: 10.1080/01418618408244210.
10. Sutton A. P., Chen J. Long-range Finnis–Sinclair potentials // Philosophical Magazine Letters. – 1990. – Vol. 61, iss. 3. – P. 139–146. – DOI: 10.1080/09500839008206493.
11. Israilishvili J. N. Intermolecular and surface forces. – Academic Press: Harcourt Brace and Company, 1998. – 450 pp.
12. Черных К. Ф. Введение в анизотропную упругость. – М. : Наука, 1988. – 190 с.

Об авторах

Стволова Софья Сергеевна – студентка 4-го курса Пермского национального исследовательского политехнического университета, кафедра математического моделирования систем и процессов (e-mail: sofi1234@mail.ru).

Зубко Иван Юрьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (e-mail: zoubko@list.ru).

OPTIMIZING THE REINFORCEMENT OF A COMPOSITE CYLINDRICAL SHELL AS APPLIED TO DYNAMIC LOADING CONDITIONS

S. V. Vetoshkin*, Yu. V. Bayandin, O. B. Naimark

Institute of Continuous Media Mechanics, Str. Academician Korolev 1, Perm, Russia

*Corresponding author. E-mail: sega-w92@mail.ru; address for correspondence: 614013 Perm, Ak. Korolev st., 1, BON on the 4th floor, room. 401; Tel.: +7 (952) 321 79 25.

The manufacture of composite products often requires using combinations of several materials, forming a multilayer structure with the layers stacked in different direction, proper selection of the stacking sequence, etc. Due to these features, the process of developing composite structures is more time-consuming than the production of conventional materials.

This paper describes a method for selecting the optimal characteristics of a composite material by studying the behavior of the structure under complex dynamic loads. The results of numerical simulation have been used to develop a model of a dynamically loaded composite shell of revolution with optimal material characteristics.

Keywords: composite materials, calculation of cylindrical shells, basalt fiber, ANSYS.

DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.042-047

References

1. Czigány T. Basalt fiber reinforced hybrid polymer composites. *Materials Science Forum*, 2005, vols. 473–474, pp. 59–66. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.473-474.59.
2. Liu Qiang, Shaw Montgomery T., Parnas Richard S., McDonnell Anne-Marie. Investigation of basalt fiber composite aging behavior for applications in transportation. *Polymer Composites*, 2006, vol. 27, iss. 5, pp. 475–483. DOI: 10.1002/pc.20215.
3. Czigány T. Special manufacturing and characteristics of basalt fiber reinforced hybrid polypropylene composites: Mechanical properties and acoustic emission study. *Composites Science and Technology*, 2006, vol. 66, iss. 16, pp. 3210–3220. DOI: 10.1016/j.compscitech.2005.07.007.
4. Malkov I.V., Sirovoi G.V., Nepran I.L. Analyzing the characteristics of the local SSS of a junction between a metal flange and a composite shell. *Otkrytye informatsionnye i kompyuternye integrirovannye tekhnologii*, 2010, no. 48, pp. 80–87. (In Russian).
5. Kashevarova G.G. *Studying the bearing capacity of clasp joints in shells made of composite materials with metal inclusions*. Ph.D thesis, 1980, Perm, 159 p. (In Russian).

Подана в журнал: 11.04.2016
УДК 621.002.3-419; 620.22-419.
DOI: 10.17804/2410-9908.2016.3.042-047

ОПТИМИЗАЦИЯ СХЕМЫ АРМИРОВАНИЯ КОМПОЗИТНОЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ОБОЛОЧКИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ДИНАМИЧЕСКИМ УСЛОВИЯМ НАГРУЖЕНИЯ

С. В. Ветошкин^{1*}, Ю. В. Баяндин², О. Б. Наймарк³

Институт механики сплошных сред УрО РАН, ул. Академика Королёва, 1, Пермь, Россия

* Ответственный автор. Электронная почта: sega-w92@mail.ru; Адрес для переписки: 614013 Пермь, Ак. Королева, 1, БОН, 4 этаж, ком. 401; Телефон: +7 (952) 321-79-25.

Для создания композитных изделий часто требуется применение комбинаций из нескольких материалов, использование большого количества слоев, уложенных в различных направлениях, правильного подбора последовательности их укладки и т.д. Эти особенности делают процесс разработки конструкций из композиционных материалов значительно более трудоемким в сравнении с изделиями из традиционных материалов.

В работе описана методика выбора оптимальных характеристик материала изделия из композиционного материала путем исследования поведения конструкции под действием комплекса динамических нагрузок. В ходе проведения расчета на основе выходных данных была разработана модель оболочки вращения под действием динамической нагрузки с оптимальными свойствами композиционного материала.

Ключевые слова: композиционные материалы, расчет цилиндрических оболочек, базальтовое волокно, ANSYS.

1. Введение

Объект исследования работы – моделирование эксперимента по динамическому гидронагружению оболочки вращения из композитного материала.

Цель работы – оптимизация угла намотки образца для минимизации критических напряжений и деформаций в конструкции при действии нагрузки (импульса нагружения).

В настоящее время исследованию характеристик композиционных материалов и определению напряженно-деформированного состояния (НДС) конструкции уделено большое внимание в научной литературе. Например, в статье [1] рассматривалось поведение композитных образцов из базальтового волокна при различных видах нагружения. Были определены свойства композита, такие как прочность на изгиб, жесткость, статическая и динамическая вязкость разрушения. С помощью микроскопа был проанализирован характер разрушения.

В работах [2, 3] рассматривалось применение тканых композитов из базальтопластика в автомобиле- и машиностроении. У композитных образцов были определены модуль Юнга, предел прочности на сдвиг и сжатие. Также уделено внимание межфазному взаимодействию волокна и связующего, были рассмотрены зависимости содержания волокна и связующего.

В [4] определено НДС при моделировании соединения металлического фланца с композитным цилиндрическим корпусом РДТТ с применением программного комплекса ANSYS. Получены зависимости формы шипа фланца от величины нагрузки внутренним давлением. Результаты моделирования показали значительное повышение механических характеристик соединения с минимальными расходами на проектирование.

В основе диссертационной работы [5] проведено исследование несущей способности петлевых соединений оболочек из композиционных материалов с металлическими включениями.

В представленной работе при помощи средств пакета Ansys Workbench была создана параметрическая трехмерная модель рассматриваемого композитного изделия, полученного методом намотки. В модуле Composite PrePost была смоделирована перекрестно-армированная слоистая структура образца. В связи с условиями работы натурального образца созданной расчетной модели в качестве используемого материала были выбраны стекловолокно и базальтовый ровинг.

При варьировании угла армирования в модели был проведен анализ изменения НДС, что позволило определить оптимальный угол намотки и локализовать элементы модели с максимальными значениями напряжений.

В работе поэтапно были выполнены следующие задачи:

- создана модель многослойной структуры оболочки вращения;
- проведен анализ НДС оболочки, нагруженной динамическим давлением;
- в ходе постановки нескольких задач был определен оптимальный угол намотки образца.

2. Постановка задачи и методы решения

Материал конструкции представляет собой композит с ортотропными свойствами, из набора слоев с перекрестной намоткой для базальтового волокна ($\pm\phi$) и слоя кольцевой намотки из стекловолокна. Эффективные свойства однонаправленных базальтового и стекловолокна задавались в цилиндрической системе координат и представлены в таблице.

Эффективные упругие свойства базальтового и стекловолокна

Свойства ортотропного материала	Базальтовое волокно	Стекловолокно
Модуль Юнга E_r , МПа	80 527	71 144
Модуль Юнга E_θ, E_z , МПа	20 706	18 294
Коэффициент Пуассона ν_θ, ν_z	0,26	0,26
Коэффициент Пуассона ν_z	0,35	0,36
Модуль сдвига G_θ, G_z , МПа	7400	6100
Модуль сдвига G_z , МПа	5500	4900

В расчете было рассмотрено поведение материала конструкции при заданных различных значениях нагрузки, соответствующих нагружению оболочки в различные моменты времени, которые определялись по данным датчика давления из эксперимента по динамическому испытанию на копре. Был произведен анализ выходных данных и определена схема армирования, при которой максимальные значения напряжений и деформаций в каждом расчете были наименьшими в сравнении с другими схемами.

Рассматриваемая конструкция представляет собой оболочку вращения в форме «ракетного двигателя». Со стороны днища (левого торца) модель жестко закреплена, со стороны сопла (правого торца) – свободна. С внутренней части приложено равномерно распределенное давление на стенки оболочки (рис. 1). Постановка задачи заключалась в повторении натуральных испытаний, проводимых по схеме, представленной на рис. 1.

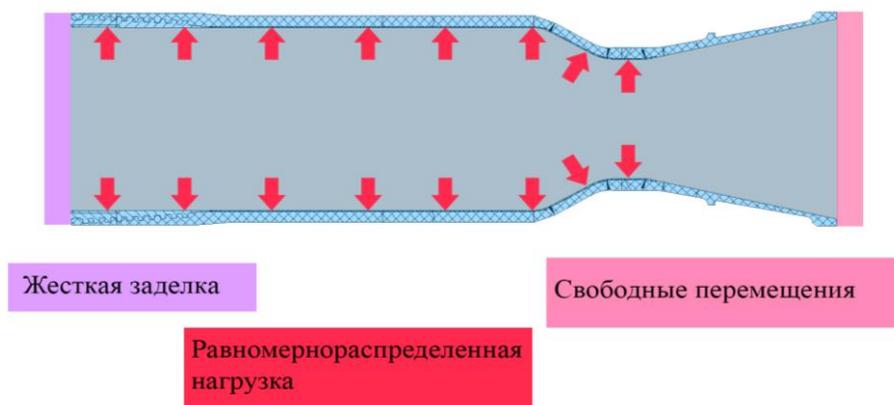


Рис. 1. Схема задания граничных условий и нагрузки на оболочку

Зависимость амплитуды нагружения представлена на графике (рис. 2). Максимальная величина давления достигает 60 МПа, длительность импульса равнялась 10 мс.

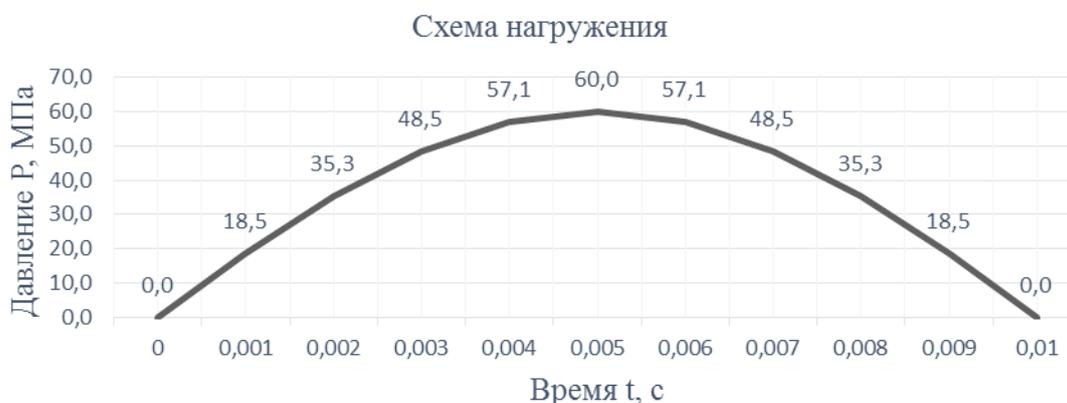


Рис. 2. Импульс нагружения

3. Результаты и обсуждение

Основная задача – постановка серии расчетов с одинаковыми граничными условиями и разными свойствами композиционного материала, зависящими от угла намотки φ , варьируемому от 10° до 80° с шагом в 5° . В каждой задаче фиксировались максимальные значения компонент напряжений в цилиндрической системе координат. С помощью полученных данных был определен оптимальный угол армирования, при котором напряжения достигают наименьшие значения, чем при другом значении угла армирования. На рис. 3 представлены зависимости максимальных напряжений по трем компонентам в цилиндрической системе координат от угла намотки.

Компоненты напряжений в трех взаимно перпендикулярных направлениях комбинировались в критерий оптимальности с учетом нормировки каждой из компонент напряжений на максимальные, рассчитанные по следующей формуле:

$$\sigma_k = \frac{\sigma_r}{\sigma_{r_{max}}} + \frac{\sigma_\theta}{\sigma_{\theta_{max}}} + \frac{\sigma_z}{\sigma_{z_{max}}}, \quad (1)$$

где σ_k – расчетный коэффициент; $\sigma_{r,\theta,z}$ – значение напряжений в модели при заданном угле намотки; $\sigma_{r,\theta,z,max}$ – максимальные значения каждой компоненты напряжений в цилиндрической системе координат среди всех значений φ .

График зависимости коэффициента напряжений от угла намотки представлен на рис. 4. Угол намотки с наименьшим коэффициентом напряжений является оптимальным. Для цилиндрической части оболочки (именно в этой части модели напряжения были максимальны) оптимальный угол армирования составил $\varphi \sim 43^\circ$.

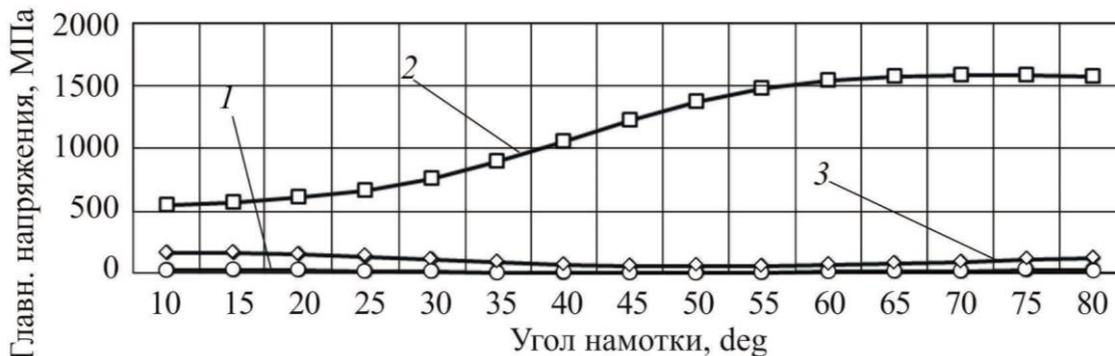


Рис. 3. График зависимости напряжений от угла намотки на цилиндрической части: 1 – радиальные напряжения по r; 2 – окружные напряжения по θ ; 3 – осевые напряжения по z



Рис. 4. График зависимости коэффициента компонент напряжений от угла намотки

4. Заключение

Проведен анализ поведения тонкостенной цилиндрической оболочки из композитного материала под действием гидростатического давления в конечно-элементном пакете Ansys. В анализе рассмотрен случай напряженно-деформированного состояния материала осесимметричной оболочки, нагруженной равномерно-распределенным давлением на внутренних стенках оболочки согласно заданному импульсу нагружения с граничными условиями, повторяющими схему закрепления образца, используемыми в натурных испытаниях. В работе рассмотрены зависимость роста напряжений от приложенного давления на внутренних стенках в различные моменты времени согласно импульсу нагружения и изменение формы оболочки.

В ходе выполнения работы было проведено моделирование структуры композитного материала с использованием базальтовых и стеклопластиковых волокон с заданным углом армирования согласно схеме намотки. Угол намотки определен как входной параметр, при варьировании которого определялись наименьшие максимальные напряжения в элементах конструкции, что позволило определить оптимальный угол намотки для данной конструкции. Были построены графики зависимости главных напряжений и деформаций от угла намотки для наглядной локализации минимума напряжений при заданном угле. В результате обработки полученных расчетных данных для цилиндрической части оболочки был определен оптимальный угол армирования – $\varphi \sim 43^\circ$.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Сколтех в рамках научного проекта MRA-319.

Литература

- 1 Czigány T. Basalt Fiber Reinforced Hybrid Polymer Composites // Materials Science Forum. – 2005. – Vols. 473–474. – P. 59–66. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.473-474.59.
- 2 Investigation of basalt fiber composite aging behavior for applications in transportation / Qiang Liu, Montgomery T. Shaw, Richard S. Parnas, Anne-Marie McDonnell // Polymer Composites. – 2006. – Vol. 27, iss. 5. – P. 475–483. – DOI: 10.1002/pc.20215.
- 3 Czigány T. Special manufacturing and characteristics of basalt fiber reinforced hybrid polypropylene composites: Mechanical properties and acoustic emission study // Composites Science and Technology. – 2006. – Vol. 66, iss. 16. – P. 3210–3220. – DOI: 10.1016/j.compscitech.2005.07.007.
- 4 Малков И. В., Сыровой Г. В., Непран И. Л. Анализ характеристик локального НДС соединения металлического фланца с композитным корпусом // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии. – 2010. – № 48. – С. 80–87.
- 5 Кашеварова Г. Г. Исследование несущей способности петлевых соединений оболочек из композиционных материалов с металлическими включениями : дисс. ... канд. техн. наук. – Пермь, 1980. – 159 с.