

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ ИЗМЕНЕНИЯ  
ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ И НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ  
В МАТЕРИАЛЕ ПРИ СИЛЬНОМ ТЕРМИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ**

При высокотемпературном воздействии в материалах происходят необратимые изменения внутренней структуры. Описание подобных процессов в рамках механики сплошной среды сталкивается с серьезными проблемами, связанными с тем, что в процессе перестройки внутренней структуры материала нарушается основное положение континуальной механики – требование непрерывности деформаций. В предлагаемой работе применяется метод динамики частиц (метод молекулярной динамики), как принципиально дискретный подход, не использующий предположения о континуальности. В работе рассмотрено решение двумерной задачи об изменении внутренней структуры материала и возникновении внутренних напряжений при сильном тепловом воздействии, неравномерном по одной из пространственных координат. В качестве исходного материала используется идеальный кристалл из частиц взаимодействующий посредством потенциала Леннарда – Джонса. Показано, что характеристики внутренней структуры существенно зависят от скорости охлаждения материала, проанализировано влияние характера теплового воздействия и дефектов внутренней структуры на остаточные напряжения в материале.

**1. Введение.** При высокотемпературном воздействии в материалах происходят необратимые изменения внутренней структуры. В сварных швах подобные изменения приводят к накоплению внутренних напряжений, негативно влияющих на прочностные и эксплуатационные свойства конструкций [1]. Описание подобных процессов в рамках механики сплошной среды сталкивается с серьезными проблемами, связанными с тем, что в процессе перестройки внутренней структуры материала нарушается основное положение континуальной механики – требование непрерывности деформаций. Возникающие в результате дефекты внутренней структуры нарушают внутреннюю геометрию материала, что приводит к серьезным проблемам во введении понятия деформации. Отказ от эвклидова геометрического описания деформационных свойств упругой сплошной среды позволяет построить теорию деформирования среды с дефектами внутренней структуры [2, 3]. Однако, в рамках теории сплошной среды не удается ответить на вопрос, как происходит зарождение дефектов, и выяснить влияние параметров теплового воздействия на свойства материала.

Поэтому в предлагаемой работе для описания изменения внутренней структуры и напряженного состояния в материале при сильном термическом воздействии применяется принципиально дискретный подход, не использующий предположения о континуальности материала. Метод динамики частиц [4, 5] состоит в представлении вещества множеством взаимодействующих частиц, движение которых описывается уравнениями динамики Ньютона. Свойства материала определяются потенциалом взаимодействия между частицами и пространственным расположением (упаковкой) частиц. Наиболее развитой разновидностью метода динамики частиц является метод молекулярной ди-

намики [6, 7], на протяжении нескольких десятилетий успешно применяющийся для описания физико-химических свойств материалов. В общем случае представительные частицы, используемые для построения компьютерного материала не обязательно интерпретируются как атомы или молекулы, а часто выступают как дискретный носители свойств материала. Однако и в этом случае также часто используется название молекулярная динамика, хотя термин динамика частиц более адекватно отвечает данному методу моделирования. Отметим, что рассматриваемый в предлагаемой работе метод динамики частиц, как и метод молекулярной динамики, дискретен на физическом уровне, что принципиально отличает его от метода крупных частиц [8] и родственных методов, использующих частицы как численный прием для решения континуальных уравнений движения сплошной среды.

В данной работе показано, что применение метода динамики частиц позволяет описать зарождение дефектов внутренней структуры и их эволюцию под действием тепловых движений, описать структурное трансформирование материала и рассчитать остаточные напряжения, вызванные наличием дефектов внутренней структуры. В перспективе данный подход может быть использован для нахождения оптимальных режимов обработки материалов, позволяющих минимизировать негативные последствия тепловых эффектов.

**2. Макроскопическая постановка задачи.** Рассмотрим двумерную задачу о прямоугольной области ( $0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y$ ) некоторого материала, находящегося изначально в ненагруженном состоянии. Предположим, что в момент времени  $t = 0$  материал мгновенно нагрет по закону:

$$T(x, y) = T_{\max} e^{-x^2/\sigma^2} \quad (2.1)$$

где  $T(x, y)$  – распределение температуры в материале,  $T_{\max}$  – максимальное значение температуры,  $\sigma$  – параметр, характеризующий ширину зоны нагрева. Будем считать, что  $T_{\max}$  превосходит температуру плавления материала. В течении короткого интервала времени  $0 \leq t \leq t_1$  рассматриваемый объем материала выдерживается в адиабатических условиях, после чего он быстро охлаждается по закону

$$T(t) = T(t_1) e^{-\beta t} \quad (2.2)$$

Время проведения эксперимента достаточно мало, чтобы теплопроводность могла заметно изменить распределение температуры внутри материала. В задаче используются периодические граничные условия. Требуется определить распределение остаточных напряжений в материале.

Приведенная выше постановка задачи является, по сути, макроскопической. Однако ее решение чрезвычайно затруднительно в рамках макроскопической механики сплошной среды, поскольку для этого необходимо описать плавление материала с последующим переходом в твердое состояние. При этом существенным фактором является изменение внутренней структуры материала – величины, плохо формализуемой в рамках механики сплошной среды. Поэтому в данной работе для решения указанной задачи выбран метод динамики частиц, в основу которого положены принципы не макроскопической, а микроскопической механики (см. табл. 1).

Рассматриваемая задача возникла как простейшая модель процессов, протекающих при сварке материалов. Разумеется, ее постановка сильно примитивизирована для того, чтобы претендовать на количественное описание сложных физико-химических процессов, происходящих при сварке. Однако, она позволяет исследовать важнейшее явление, приводящее к возникновению внутренних напряжений – изменение внутренней структуры под действием быстрого нагрева и охлаждения. Даже в такой упрощенной постановке данная задача чрезвычайно сложна для решения методами макромеха-

Таблица 1

	Континуальные методы	Метод динамики частиц
Представление вещества	Гладкое дифференцируемое многообразие	Совокупность материальных точек или твердых тел
Уравнения	В частных производных	Обыкновенные дифференциальные уравнения
Носитель свойств вещества	Определяющие уравнения	Потенциал взаимодействия, исходная упаковка частиц

ники, поэтому решение ее методом частиц представляет несомненный интерес и может служить для получения дополнительной информации, необходимой для построения макроскопических моделей поведения материалов при сильных термомеханических воздействиях.

**3. Микроскопическая постановка задачи.** Для решения предлагаемой задачи используется метод динамики частиц. В табл. 1 показаны основные отличия микромеханического подхода, используемого в методе динамики частиц, от макроскопического подхода, используемого в континуальных методах механики деформируемого твердого тела.

Микромеханический подход требует введения в постановку задачи дополнительных положений. Прежде всего это структура исходного материала. Поскольку цель данной работы состоит в том, чтобы решить рассматриваемую задачу в простейшей возможной постановке, в качестве исходной структуры выберем идеальную кристаллическую решетку. В двумерном случае единственной плотноупакованной решеткой является треугольная, которую и используем для задания начальных условий по координатам частиц. Отметим, что макроскопические упругие свойства данной решетки в линейном приближении являются изотропными. Начальные условия по скоростям должны отвечать выбранному распределению температур 1. Осуществляется это следующим образом: вектор скорости  $\mathbf{v}$  для каждой частицы выбирается случайным образом при выполнении соотношения  $|\mathbf{v}| < v_{\text{rand}}$ , причем вершины вектора  $\mathbf{v}$  равномерно распределены внутри круга радиуса  $v_{\text{rand}}$ . Величина  $v_{\text{max}}$  зависит от горизонтальной координаты  $x$  по закону

$$v_{\text{rand}} = v_{\text{max}} e^{-\frac{1}{2}x^2/\sigma^2} \quad (3.1)$$

Считая, что температура в данной точке пространства пропорциональна средней кинетической энергии частиц, находящихся в некоторой окрестности этой точки, мы получим для начальной температуры распределение (2.1).

В качестве закона взаимодействия частиц выберем потенциал Леннарда – Джонса

$$\Pi(r) = D \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right] \quad (3.2)$$

где  $D$  – энергия связи,  $a$  – длина связи (расстояние, соответствующее минимуму потенциала). Данный потенциал является простейшим видом взаимодействия, позволяющим качественно описать многие физико-механические процессы в твердых телах, поэтому он широко используется для моделирования в задачах общетеоретического характера. Уравнения движения частиц имеют вид

$$m \ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1}^N \frac{f(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|)}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n) - B \dot{\mathbf{r}}_k \quad (k = 1, 2, \dots, N) \quad (3.3)$$

где  $\mathbf{r}_k$  – радиус-вектор  $k$ -ой частицы,  $m$  – масса частицы,  $N$  – общее число частиц,  $f(r) = -\Pi'(r)$  – сила взаимодействия между частицами. Кроме потенциальных слагаемых, описывающих взаимодействие частиц, в уравнения 4 добавлено диссипативное слагаемое  $B\dot{\mathbf{r}}_k$ , используемое для охлаждения материала по закону (2.2), где  $B$  – коэффициент, определяющий скорость охлаждения.

Введем ряд параметров. Жесткость связи  $C$  для потенциала (3.2) равна

$$C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a) = 72D/a^2 \quad (3.4)$$

Период  $T_0$  малых колебаний частицы массы  $m$  при наличии упругой силы с жесткостью  $C$  равен

$$T_0 \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi\sqrt{m/C} \quad (3.5)$$

Величину  $T_0$  удобно брать в качестве микроскопического масштаба времени в системе. Скорость диссоциации (минимальная скорость, которую надо сообщить частице, находящейся в равновесии в потенциальном поле (3.2), чтобы она могла уйти на бесконечность) равна

$$v_d = \sqrt{\frac{2D}{m}} = \frac{3}{\pi} \frac{a}{T_0} \quad (3.6)$$

Величину  $v_{\text{rand}}$ , используемую для задания начального теплового движения (3.1) в системе, удобно сравнивать со скоростью диссоциации  $v_d$ . Достаточно очевидно, что при более или менее существенном превышении случайной скоростью  $v_{\text{rad}}$  порога диссоциации  $v_d$  произойдет нарушение внутренней структуры материала.

В качестве микроскопической единицы для измерения напряжений, удобно взять напряжение  $\sigma_0$ , определяемое формулой

$$\sigma_0 \stackrel{\text{def}}{=} f_*/a, \quad f_* \stackrel{\text{def}}{=} |\min f(r)|, \quad f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r) \quad (3.7)$$

Здесь  $f_*$  – величина, характеризующая прочность связи: предельное значение силы притяжения между частицами. Для потенциала Леннарда – Джонса 3 величина  $f_*$  связана с энергией взаимодействия соотношением

$$f_* = \frac{504}{169} \sqrt[6]{\frac{7}{13}} \frac{D}{a} \approx 2.7 \frac{D}{a} \quad (3.8)$$

Таким образом, напряжение  $\sigma_0$  представляет собой прочность межатомной связи, отнесенную к длине связи.

В качестве единицы измерения скорости охлаждения возьмем

$$B_0 \stackrel{\text{def}}{=} 2\sqrt{mC} \quad (3.9)$$

– критическое значение коэффициента диссипации. При  $B \geq B_0$  частица в потенциальном поле (3.2) не может совершать колебательных движений из-за слишком высокой диссипации, что соответствует очень высокой скорости охлаждения.

В табл. 2 приведены значения основных параметров, использованных при решении задачи. Под вертикальным направлением кристаллической решетки понимается такое, при котором одна из сторон треугольников направлена вдоль оси  $x$ . Радиус обрезания потенциала  $a_{\text{cut}}$  представляет собой максимальное расстояние, на котором учитывается взаимодействие между частицами.

Таблица 2

Параметр	Символ	Значение
Число частиц	$N$	$10^4-10^6$
Максимальная тепловая скорость	$v_{\max}$	$3v_d$
Эффективная ширина зоны нагрева	$\sigma$	$0.8L_x$
Продолжительность нагрева	$t_1$	$10T_0$
Коэффициент отвода тепла	$B$	$10^{-3}B_0-3B_0$
Продолжительность расчета	$t_{\max}$	$30T_0-600T_0$
Направление решетки	–	Вертикальное
Пропорции: длина/ширина	$L_x/L_y$	3
Шаг интегрирования	$\Delta t$	$0.015T_0$
Радиус обрезания потенциала	$a_{\text{cut}}$	$2.1a$

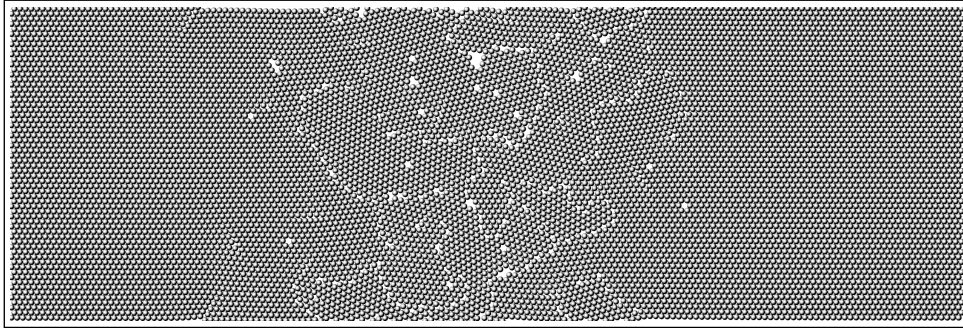
#### 4. Изменение внутренней структуры материала при термическом воздействии.

На 1 представлен образец, содержащий 10000 частиц после проведения расчета. Время расчета  $30 T_0$ , охлаждение осуществлялось при  $B = 0.03B_0$ . Указанное время охлаждения достаточно для перехода материала в кристаллическое состояние, хотя при этом еще сохраняется значительное тепловое движение. Видно, что по краям образца сохранилась исходная кристаллическая структура, однако в его центральной части структура материала изменилась. Появились области, имеющие различные направления кристаллической решетки. На границах и внутри этих областей образовалось большое количество дефектов. На фиг. 2 показан тот же образец, однако для улучшения визуализации сохранены только частицы, находящиеся вблизи дефектов внутренней структуры. Формально это реализуется таким образом, что сохраняются только частицы, имеющие на расстоянии  $1.1a$  менее 6 соседей ( $1.1a$  – приближенно равно расстоянию разрыва связи для потенциала Леннарда – Джонса, 6 – координационное число идеальной треугольной решетки). Далее частицы, удовлетворяющие указанному критерию, будем называть граничными.

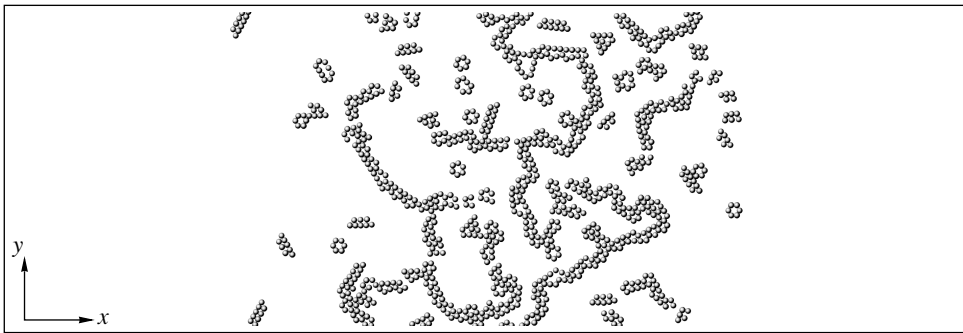
Проследим, как меняется внутренняя структура образца в ходе расчета. На фиг. 3 показан график зависимости доли граничных частиц  $n/N$  [%] от времени. Общее число частиц в образце равно 100000. Согласно графику, в начальный момент времени граничные частицы отсутствуют – образец представляет собой идеальный кристалл. Далее, число граничных частиц скачкообразно возрастает, что соответствует мгновенному нагреву образца, приводящему к полному нарушению внутренней структуры в его центральной части. До момента  $t = t_1 = 10T_0$  не осуществляется отвода тепла ( $B = 0$ ) и доля граничных частиц практически не меняется (участок *a* на фиг. 3). Затем начинается отвод тепла ( $B = 0.03B_0$ ), приводящий к резкому уменьшению доли граничных частиц (участок *b* на фиг. 3). Однако количество граничных частиц уменьшается не до нуля, а до некоторого фиксированного значения, соответствующего возникновению поликристаллической структуры в образце. В ходе расчета измеряется девиация скоростей частиц  $\Delta v$  – среднее квадратическое значение скорости

$$\Delta v \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N v_k^2} \quad (4.1)$$

характеризующее интенсивность теплового движения в системе. По мере охлаждения прекращается изменение доли граничных частиц – при отсутствии теплового движения внутренняя структура материала оказывается “замороженной”. Если, однако, при



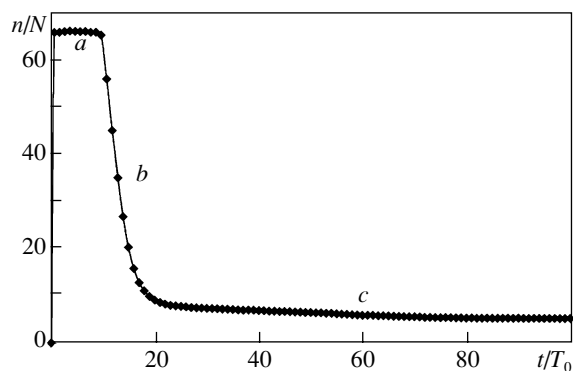
Фиг. 1



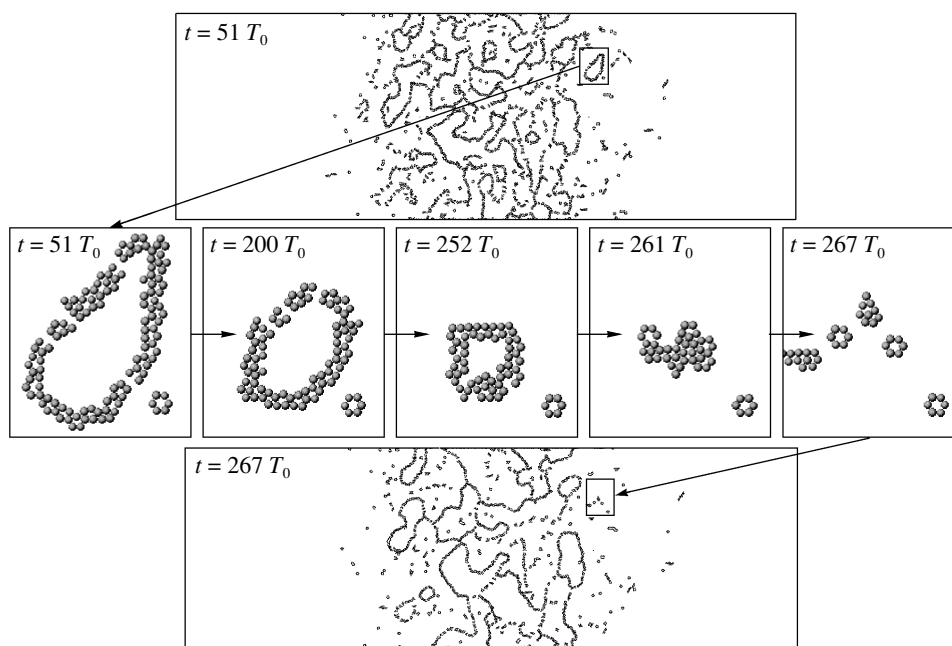
Фиг. 2

достижении девиацией скоростей некоторого порогового значения охлаждение прекратить ( $B = 0$ ), как это сделано на фиг. 3 при  $\Delta v_{\min} = 0.001 v_d$ , то сохранение некоторого, хотя и низкого уровня теплового движения приводит к медленному уменьшению доли граничных частиц – в материале происходит релаксация под действием внутренних напряжений, вызванных дефектами внутренней структуры (участок  $c$  на фиг. 3). Процесс релаксации проиллюстрирован на фиг. 4. На рисунке показано состояние образца, содержащего 100000 частиц ( $B = 0.03B_0$ ), для двух моментов времени:  $t = 51T_0$  и  $t = 267T_0$ . Хорошо видно, что внутренняя структура образца претерпела значительные изменения. Фиг. 4 позволяет проследить эти изменения на примере одного из элементов внутренней структуры – уединенного зерна. Последовательные кадры на фиг. 4 показывают постепенное уменьшение размера зерна, приведшее в конечном итоге к его распаду на совокупность точечных дефектов и дислокаций. В конце концов число граничных частиц стабилизируется примерно на значении 4% от общего числа частиц. При этом, по крайней мере на промежутке времени порядка  $300T_0$ , сохраняются незначительные флуктуации в числе граничных частиц.

**5. Влияние скорости отвода тепла на внутреннюю структуру материала.** На фиг. 5 приведены графики зависимости доли граничных частиц от скорости охлаждения. Образец содержит  $10^5$  частиц. По горизонтальной оси отложено логарифмическое значение коэффициента диссипации  $\lg(B/B_0)$ , характеризующее скорость отвода тепла. График  $l$  соответствует охлаждению до момента времени  $t_{\max} = 300T_0$ . Согласно графику, доля граничных частиц возрастает с увеличением  $\lg(B/B_0)$ , причем зависимость

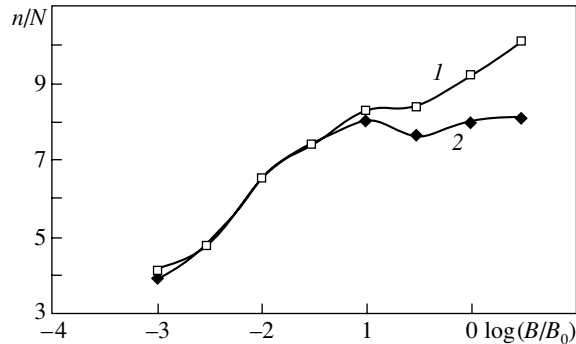


Фиг. 3



Фиг. 4

близка к линейной. При медленном охлаждении (низкие значения коэффициента  $B$ ) происходят процессы кристаллизации, что приводит к низкому количеству дефектов и образованию больших монокристаллических зерен. При увеличении скорости отвода тепла увеличивается количество дефектов в образце, а размер зерен, напротив, уменьшается. Фактически, при быстром отводе тепла материал застывает в своем актуальном состоянии, что приводит к получению внутренней структуры, близкой к аморфной. Однако, при этом не удается получить равновесное состояние – из-за высокой скорости охлаждения внутренняя структура материала оказывается неравновесной, и, очень медленно, но движение частиц продолжается. Указанное обстоятельство приводит к парадоксальному факту, что скорость охлаждения материала немонотонно зави-



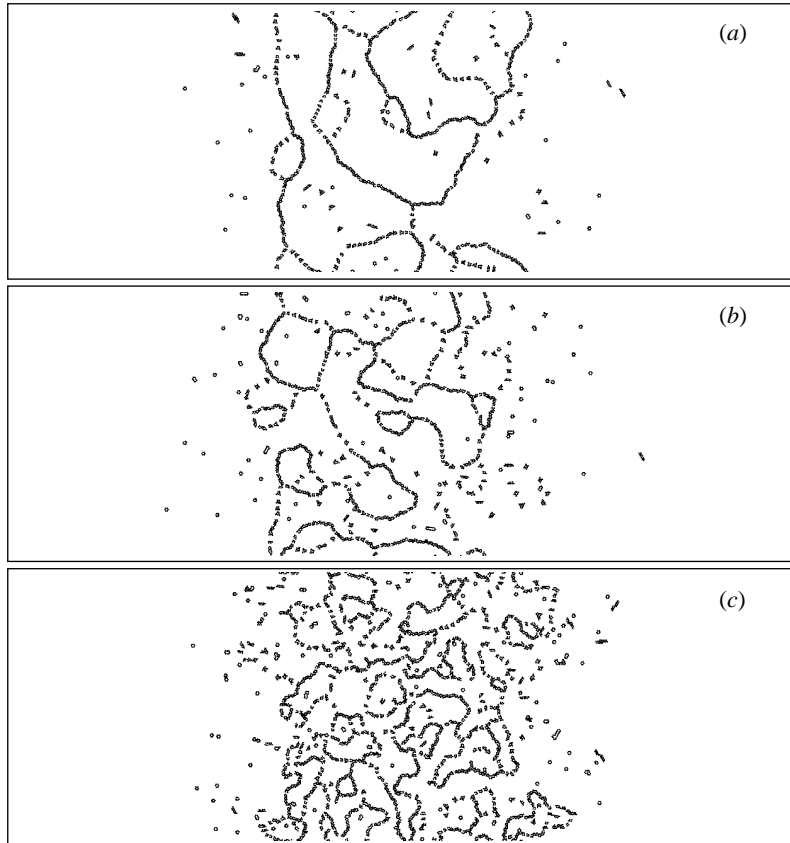
Фиг. 5

сит от значения коэффициента диссипации  $B$  – при высокой диссипации охлаждение на достаточно длительных интервалах времени происходит медленнее из-за сохранения релаксационного движения частиц материала.

Для полного устранения теплового движения рассматриваемые образцы подвергались дополнительному охлаждению на промежутке времени  $300T_0 < t < 600T_0$  с коэффициентом диссипации  $0.03B_0$ , одинаковым для всех образцов. Данное значение коэффициента диссипации выбрано как оптимальное для рассматриваемых интервалов времени. В результате девиация скоростей частиц во всех рассматриваемых образцах при  $t = 600T_0$  не превышала  $4.5 \cdot 10^{-4}v_d$ . График 2 на фиг. 5 показывает относительное количество дефектов в образцах, подвергнутых дополнительному охлаждению. Графики 1 и 2 совпадают при промежуточных значениях скорости отвода тепла, однако различаются при низких и, особенно, высоких значениях  $B$ . Это подтверждает сказанное выше – наиболее быстрый переход в состояние равновесия реализуется при не слишком высоких значениях коэффициента диссипации, аморфная же структура, полученная при высоких значениях  $B$ , оказывается неравновесной. Внутренняя структура образцов после дополнительного охлаждения показана на фиг. 6. Из рисунков видно, что при низкой скорости охлаждения  $B = 0.001B_0$  (фиг. 6, а) образуются крупные зерна, содержащие тысячи частиц. При относительно быстром охлаждении  $B \geq 0.03B_0$  (фиг. 6, с) образуется мелкозернистая структура, зерна содержат большое количество дефектов, что приближает структуру материала к аморфной. Фиг. 6, b соответствует промежуточной ситуации, реализующейся при  $B = 0.003B_0$ .

**6. Определение напряжений на микроуровне.** Изменение структуры материала приводит к возникновению остаточных напряжений, которые могут существенным образом влиять на его механические и эксплуатационные свойства. Вычислим внутренние напряжения, возникающие в рассмотренной задаче. Согласно макроскопическому определению напряжений, они могут быть вычислены как отношение суммарной силы, действующей на некоторой площадке внутри материала, к площади рассматриваемой площадки. При переходе к дискретным структурам, однако, такое определение может быть использовано лишь в случае, когда к рассматриваемой площадке примыкает достаточно много частиц, чтобы эффектами дискретизации можно было бы пренебречь. В противном случае данное определение не позволяет найти напряжения однозначным образом [9]. Это делает его неприменимым вблизи дефектов внутренней структуры – в местах, наиболее критичных с точки зрения концентрации напряжений. Воспользуемся альтернативным определением, позволяющим вычислить тензор напряжений для сколь угодно малого элемента внутренней структуры.





Фиг. 6

Для идеальных кристаллических структур с парным взаимодействием частиц тензор напряжений Коши в длинноволновом приближении может быть вычислен по формуле [10, 11]:

$$\boldsymbol{\tau} = -\frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \frac{1}{a_{\alpha}} f(a_{\alpha}) \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \quad (6.1)$$

где  $\mathbf{a}_{\alpha}$  – радиус-вектор атома (узла) решетки, проведенный из рассматриваемого атома;  $\alpha$  – индекс, пробегающий номера всех узлов, с которым взаимодействует данный;  $a_{\alpha}$  – модуль  $\mathbf{a}_{\alpha}$ ; функция  $f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r)$  представляет собой силу взаимодействия между частицами (притяжение отрицательно);  $V_0$  – объем элементарной ячейки;  $\mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}$  – тензор второго ранга, представляющий собой тензорное произведение двух векторов  $\mathbf{a}_{\alpha}$  (диада). Рассмотрим поликристаллическую упаковку частиц. Выделим в ней некоторую область  $\Omega$ , достаточно большую, чтобы ориентации решеток зерен, формирующих поликристалл, можно было бы считать равномерно распределенными по направлениям. Можно показать, что среднее значение тензора напряжений в области  $\Omega$  может быть вычислено как осреднение формулы (6.1) по  $\Omega$ :

$$\boldsymbol{\tau} = -\frac{1}{2V} \sum_n \sum_{\alpha} \frac{1}{a_{n\alpha}} f(a_{n\alpha}) \mathbf{a}_{n\alpha} \mathbf{a}_{n\alpha} \quad (6.2)$$

Здесь  $V$  – объем области  $\Omega$ ; латинский индекс  $n$  пробегает все частицы принадлежащие  $\Omega$ ; греческий индекс  $\alpha$  пробегает все частицы, с которыми взаимодействует частица  $n$ ; в остальном обозначения аналогичны (6.1). Таким образом формула (6.1) справедлива как для области содержащей достаточно много монокристаллических зерен, так и для достаточно большой области, находящейся внутри монокристаллического зерна. В случае малой области макроскопическое определение тензора напряжений теряет смысл, поэтому примем (6.2) в качестве определения тензора напряжений на микроуровне. Формула (6.2) может использоваться для областей, содержащих малое количество частиц, вплоть до одной частицы. При этом, однако, могут возникнуть сложности, связанные с неоднозначностью определения объема представительной области для малой совокупности частиц [9]. Эта проблема может быть устранена рассмотрением величины

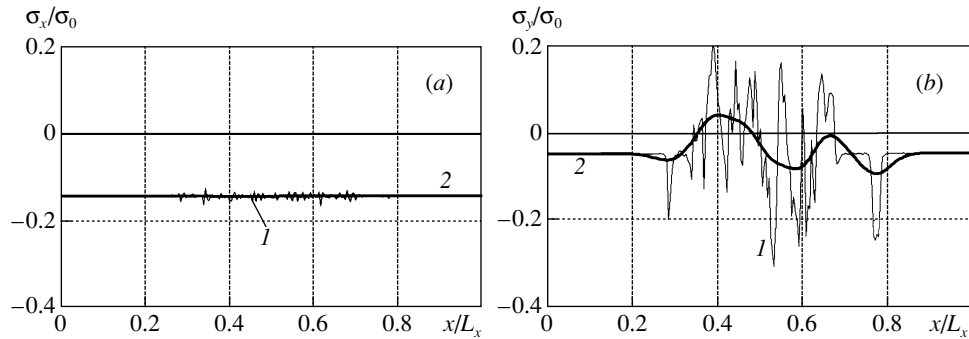
$$\rho \boldsymbol{\tau} = -\frac{1}{2M} \sum_n \sum_{\alpha} \frac{1}{a_{n\alpha}} f(a_{n\alpha}) \mathbf{a}_{n\alpha} \mathbf{a}_{n\alpha} \quad (6.3)$$

где  $M$  – суммарная масса частиц, принадлежащих рассматриваемой области;  $\rho$  – плотность материала. Переход от (6.2) к (6.3) соответствует переходу от осреднения по объему к осреднению по массе. Величины  $\boldsymbol{\tau}$  и  $\rho$  плохо определены на микроуровне, в силу того, что они используют понятие объема, однако их произведение лишено этого недостатка.

**7. Средние остаточные напряжения.** При расчете методом динамики частиц пространство разбивается на квадратные ячейки с ребром равным  $a_{\text{cut}}$  – радиусу обрезания потенциала и создаются списки частиц, принадлежащих ячейкам. Это позволяет добиться пропорциональности между временем расчета и числом частиц [5]. Воспользуемся этим разбиением для вычисления распределения напряжений в образце. Обозначим  $\Omega_k$  – вертикальный столбец ячеек (множество ячеек, имеющих одинаковое значение  $x_k$  – горизонтальной координаты центра ячейки), где индекс  $k$  пробегает номера всех вертикальных столбцов. Тогда среднее значение тензора напряжений в окрестности  $x = x_k$  может быть вычислено по формуле (6.2) для области  $\Omega_k$ . На фиг. 7 показаны результаты вычисления распределения вдоль оси  $x$  средних напряжений в образце, изображенном на фиг. 6, *a*. Напряжения  $\sigma_x$  изображены на фиг. 7, *a*, напряжения  $\sigma_y$  – на фиг. 7, *b*. Графики, изображенные тонкой линией 1, получены по описанной выше методике. Графики, изображенные толстой линией 2, используют дополнительное сглаживание в направлении  $x$  для получения макроскопического распределения напряжений<sup>1</sup>.

Рассмотрим фиг. 7, *a*. Согласно рисунку, средние напряжения  $\sigma_x$  приближенно постоянны вдоль оси  $x$ . Если воспользоваться макроскопическим определением, согласно которому напряжение равно отношению суммарной силы межатомных взаимодействий на рассматриваемом сечении к площади сечения, то из условия равновесия областей  $\Omega_k$  следует постоянство напряжения  $\sigma_x$ . Малые осцилляции значения  $\sigma_x$  на фиг. 7, *a* связаны с использованием микроскопического определения тензора напряжений и характеризуют различие между этими двумя определениями. Однако видно, что при осреднении вдоль оси  $x$  осцилляции полностью устраняются, и оба определения дают одинаковый результат.

<sup>1</sup> Сглаживание осуществлялось следующим образом: значение в каждой точке заменялось на среднее арифметическое из данного значения и его ближайших двух соседей, причем эта процедура повторяется 100 раз с учетом периодичности области. Общее число значений по оси  $x$  равно 241.



Фиг. 7

Фиг. 7, *b*, отражает распределение напряжений  $\sigma_y$  вдоль оси  $x$ . В отличие от  $\sigma_x$ , напряжение  $\sigma_y$  имеет очень большой разброс значений, что связано с изменениями внутренней структуры материала.

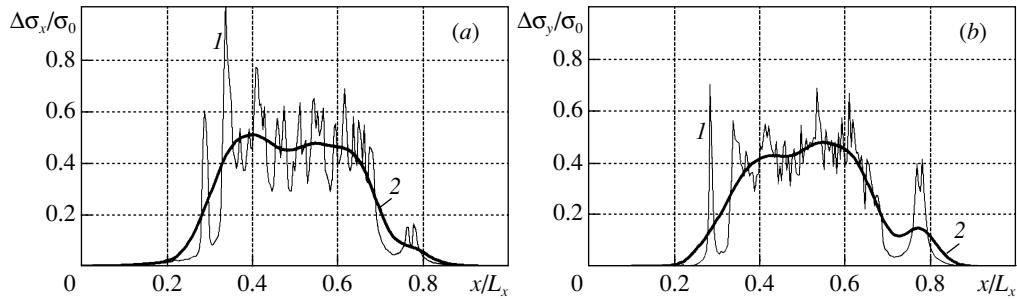
Напомним, что исходная конфигурация, до применения теплового воздействия, была ненапряженной. В ходе нагрева и охлаждения произошло изменение структуры материала, приведшие к изменению его равновесного объема (в данном случае увеличению). Поскольку, в силу периодичности граничных условий, полный объем образца измениться не может, средний уровень напряжений  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  оказался отрицательным, что соответствует сжатию материала.

Внутри материала, вокруг образовавшихся в результате термического воздействия элементов внутренней структуры возникают концентрации напряжений, резко отклоняющиеся от среднего уровня как в положительную, так и в отрицательную сторону. Именно эти концентрации напряжений и влияют на прочностные свойства образца. Однако, среднее напряжение, вычисленное в сечении, не может адекватно отразить напряженное состояние внутри материала, так как при осреднении значительная часть этих колебаний исчезает. В этом случае предпочтительнее использовать девиацию напряжений, представляющую собой среднеквадратическое отклонение напряжения в данной точке материала от среднего напряжения в сечении. Для вычисления девиации напряжений  $\Delta\sigma_x$  и  $\Delta\sigma_y$  в работе используются следующие формулы:

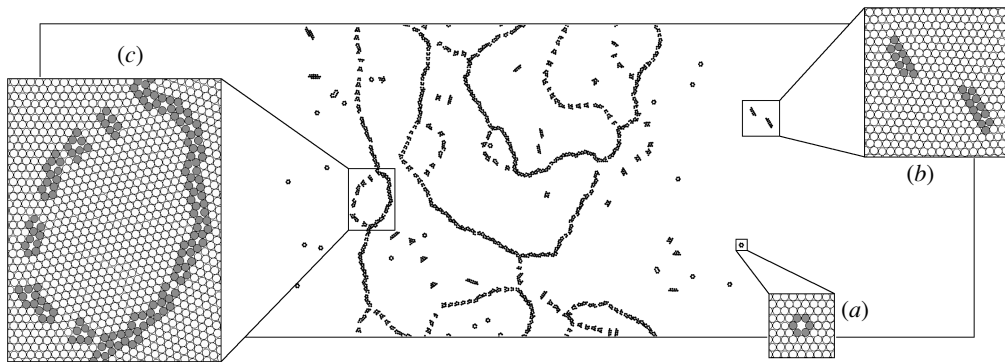
$$\Delta\sigma_x(x_k) = \sqrt{\frac{1}{N_y - 1} \sum_{n=1}^{N_y} (\sigma_x(x_k, y_n) - \sigma_x(x_k))^2} \quad (7.1)$$

$$\Delta\sigma_y(x_k) = \sqrt{\frac{1}{N_y - 1} \sum_{n=1}^{N_y} (\sigma_y(x_k, y_n) - \sigma_y(x_k))^2}$$

где  $N_y$  – число ячеек в вертикальном столбце;  $\sigma_x(x_k)$  и  $\sigma_y(x_k)$  – средние напряжения в столбце  $\Omega_k$ ;  $\sigma_x(x_k, y_n)$  и  $\sigma_y(x_k, y_n)$  – средние напряжения в ячейке с координатами  $x_k, y_k$ . Все средние напряжения рассчитываются по формуле (6.1). Полученные графики девиации напряжений  $\Delta\sigma_x$  приведены на фиг. 8, *a*, девиации  $\Delta\sigma_y$  – на фиг. 8, *b*. Графики, изображенные толстой линией, получены в результате сглаживания, аналогично тому, как это было сделано на фиг. 7. Сравнение фиг. 7 и фиг. 8 показывает, что распределения девиаций напряжений  $\Delta\sigma_x$  и  $\Delta\sigma_y$  имеют близкую форму и амплитуду, в то время как распределения напряжений  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  отличаются существенным образом. Напряжение  $\sigma_x$  практически не зависит от горизонтальной координаты, стало быть в нем



Фиг. 8

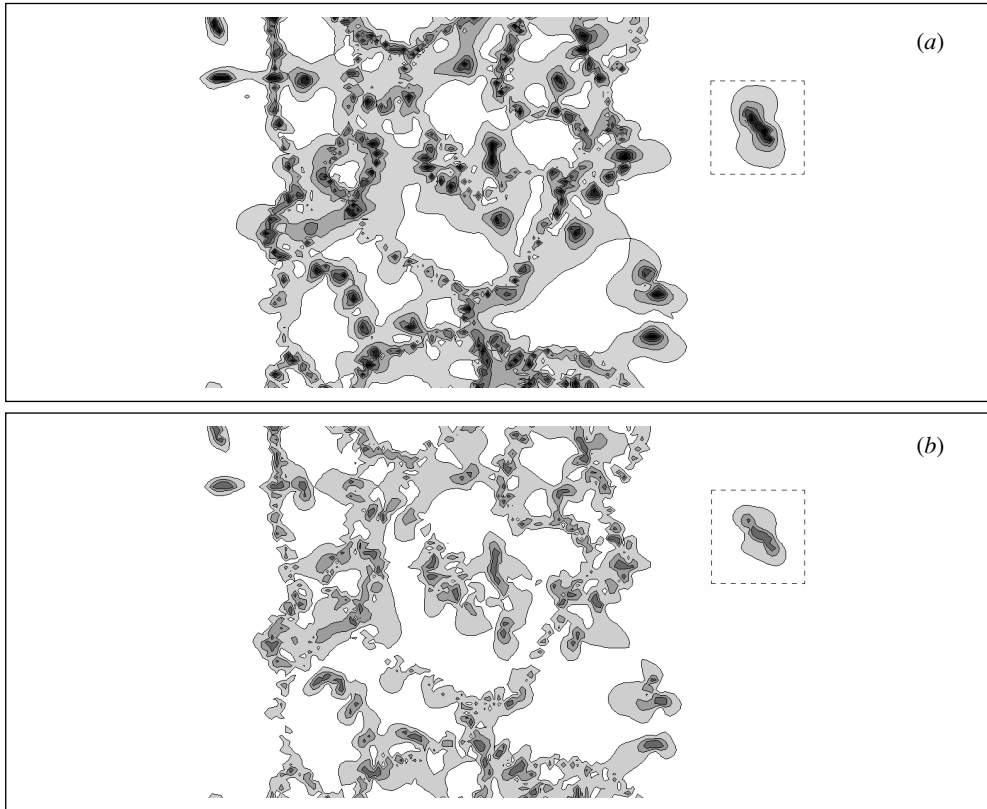


Фиг. 9

полностью теряется информация о неоднородности поля напряжений. Все это свидетельствует в пользу того, что именно девиация должна использоваться как макроскопическая характеристика поля остаточных напряжений при изменении микроструктуры материала. Рассмотрим подробнее распределение девиации напряжений. Нулевые значения девиации при значениях  $x$ , близких к 0 и  $L_x$ , соответствуют монокристаллическим областям, в которых не произошло изменения внутренней структуры и не накопилось остаточных напряжений. В центральной части образца имеется достаточно широкая область с высокими значениями девиации, отвечающая материалу с измененной внутренней структурой и высоким уровнем остаточных напряжений. Весьма интересен локальный минимум девиации в самом центре образца. Он хорошо соответствует известным экспериментальными данными, согласно которым максимум остаточных напряжений реализуется не по центру сварного шва, а в переходной зоне [1].

**8. Микронапряжения.** В предыдущем параграфе вычислялось распределение остаточных напряжений вдоль направления  $x$ , при этом производилось осреднение напряжений вдоль направления  $y$ . Таким образом получались интегральные характеристики остаточных напряжений. Ниже будет проведено более подробное исследование, при котором определяется распределение напряжений по всем направлениям внутри образца. Для этого вычисляются средние значения напряжений в каждой из расчетных ячеек, представляющих собой квадрат со стороной  $a_{\text{сн}}$ . В среднем в такую ячейку попадает около 5 частиц.

Как и в п. 7 выберем для вычисления напряжений образец, содержащий наиболее крупные зерна (фиг. 6, а), который более детально изображен на фиг. 9. На фигуре



Фиг. 10

в увеличенном масштабе показаны: (а) – вакансия, (б) – пара дислокаций, (с) – зерно. Распределения остаточных напряжений в нем показаны на фиг. 10–12. На фиг. 10, а, б приведены распределения интенсивностей  $\sigma_I$  и  $\sigma_{II}$  тензора напряжений, определяемых формулами

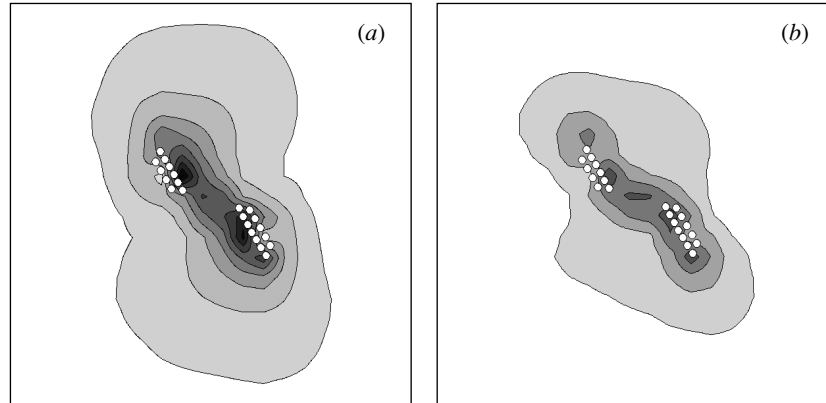
$$\sigma_I \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + 2\tau_{xy}^2}, \quad \sigma_{II} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{1}{2}(\sigma_x - \sigma_y)^2 + 2\tau_{xy}^2} \quad (8.1)$$

где  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  – нормальные напряжения в направлениях  $x$  и  $y$ ;  $\tau_{xy}$  – касательное напряжение. На фиг. 10 расстояние между изолиниями равно  $0.3\sigma_0$ , белый цвет соответствует значениям в интервале  $[0, 0.3\sigma_0]$ , дальнейшее увеличение напряжений отражается оттенками серого цвета. Согласно соотношениям (8.1), величина  $\sigma_I$  представляет собой норму тензора напряжений,  $\sigma_{II}$  – норму девиатора тензора напряжений:

$$\sigma_I = \sqrt{\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}}, \quad \sigma_{II} = \sqrt{s \cdot s}, \quad s \stackrel{\text{def}}{=} \text{dev} \boldsymbol{\tau} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{2}(\text{tr} \boldsymbol{\tau})\mathbf{E} \quad (8.2)$$

где  $\text{dev} \boldsymbol{\tau}$  и  $\text{tr} \boldsymbol{\tau}$  – девиатор и след тензора напряжений,  $\mathbf{E}$  – единичный тензор в двумерном пространстве. С использованием  $\sigma_{II}$  условия прочности по теории Треска (наибольших касательных напряжений) и Мизеса (максимальной энергии формоизменения) могут быть записаны, соответственно, в виде

$$\sigma_{II} < \sqrt{2}\tau_{\max}, \quad \sigma_{II} < \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_T \quad (8.3)$$

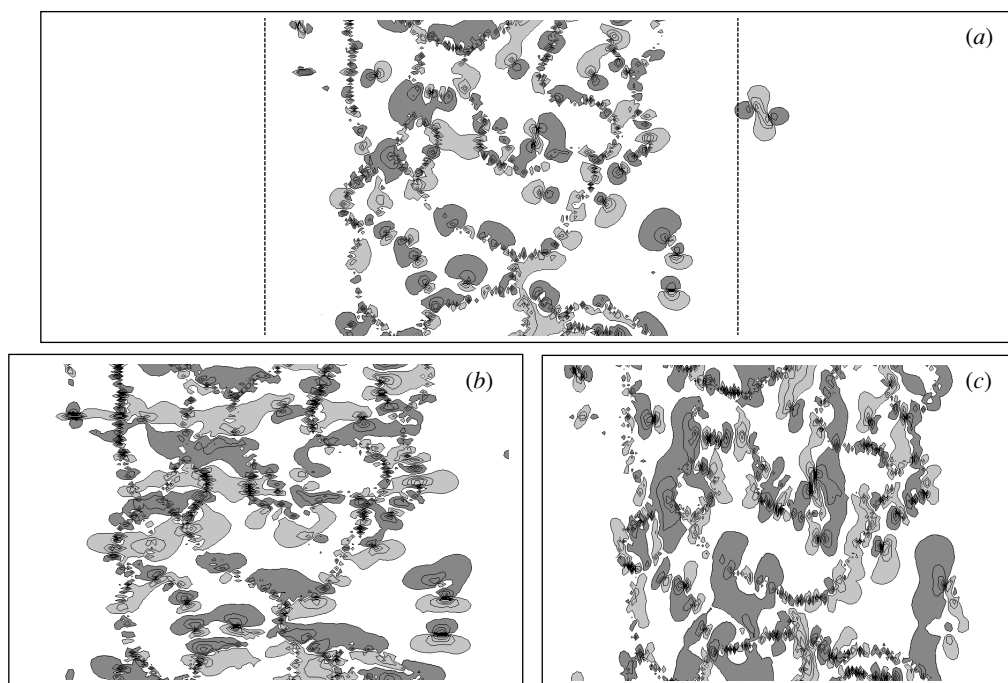


Фиг. 11

где  $\tau_{\max}$  – максимальное допустимое касательное напряжение,  $\sigma_T$  – предел текучести при одноосном растяжении. При  $\sigma_T = 2\tau_{\max}$  оба критерия совпадают, что является следствием двумерности рассматриваемой задачи. Величина  $\sigma_I$  обычно не используется в критериях пластичности, однако из сравнения фиг. 10, *a* и фиг. 10, *b* видно, что она лучше повторяет детали внутренней структуры образца, чем  $\sigma_{II}$ . Отметим недостаточность критериев пластичности (8.3) для рассматриваемого компьютерного материала. Действительно, согласно им, прочность определяется величиной  $\sigma_{II}$ , а следовательно пластичность и разрушение не могут быть достигнуты при чисто объемном напряженном состоянии. Однако для рассматриваемого материала объемное растяжение может привести к разрушению из-за разрыва межатомных связей. Более того, даже при объемном сжатии может возникнуть пластичность из-за движения дефектов и уплотнения материала. Таким образом, более адекватным был бы критерий прочности, использующий некоторую комбинацию величин  $\sigma_I$  и  $\sigma_{II}$ .

Из сравнения фиг. 10, *a* с картиной распределения дефектов в образце (фиг. 9) можно заключить, что далеко не все дефекты внутренней структуры вызывают сильные концентрации напряжений. В частности, не возникает существенных напряжений вблизи вакансий (фиг. 9, *a*). Дефекты дислокационного типа, напротив, вызывают значительные напряжения в образце. Особенно сильные напряжения возникают вблизи группы дислокаций, выделенной на фиг. 9, *b* – см. области, заключенные в рамку на фиг. 10. Детально распределение напряжений вблизи данной группы дислокаций показано на фиг. 11, где хорошо видна сильная концентрация напряжений, реализующаяся между дислокациями. На фиг. 11, *a* и фиг. 11, *b* показаны, соответственно, интенсивности напряжений  $\sigma_I$  и  $\sigma_{II}$ . Также представляет интерес сравнение полей напряжений вблизи границ зерен. В местах, где границы полностью сформировались (например, правая граница зерна фиг. 9, *c*), напряжения относительно невелики (фиг. 10, *a*), в то время как вблизи не до конца сформированных границ, представляющих собой не связанные группы дефектов (например, левая граница зерна фиг. 9, *c*), напряжения очень значительны (фиг. 10, *a*).

На фиг. 12, *a* приведено распределение полусуммы нормальных напряжений в образце  $\sigma^{\text{def}} = (\sigma_x + \sigma_y)/2$ . Отметим, что если рассмотренные выше величины  $\sigma_I$  и  $\sigma_{II}$ , по определению, неотрицательны, то среднее нормальное напряжение  $\sigma$  может принимать как положительный, так и отрицательный знак. Получена на фиг. 12 выбраны так, чтобы показать отклонение величин от их среднего значения, реализующегося по



Фиг. 12

краям образца, где внутренняя структура материала не изменилась в ходе теплового воздействия. Так, белый цвет соответствуют значениям, отклоняющимся от среднего не более чем на  $0.15\sigma_0$ , светло-серые области соответствуют большим отклонениям в отрицательную сторону (сжатие), темно-серые – в положительную (растяжение). Изолинии проведены через  $0.3\sigma_0$ .

На фиг. 12, *b*, *c* приведено распределение нормальных напряжений  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$ . Показана только центральная часть образца, отмеченная штрихами на фиг. 12, *a*. Величины  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$ , в отличие от рассмотренных выше, не являются инвариантными характеристиками тензора напряжений, то есть существенно зависят от выбора координатных осей. Это видно из фиг. 12, *b* и фиг. 12, *c*, где явно прослеживается горизонтальная и вертикальная направленность соответствующих полей напряжений. Фиг. 12, *b* и фиг. 12, *c* наглядно иллюстрируют результат предыдущего параграфа, согласно которому девиации напряжений  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  примерно одинаковы (фиг. 8), в то время как осредненные вдоль оси  $y$  значения напряжений дают практически постоянное значение  $\sigma_x$  (фиг. 7, *a*) и сильно осциллирующее значение  $\sigma_y$  (фиг. 7, *b*).

**9. Заключение.** В работе при помощи метода динамики частиц рассмотрено решение задачи об изменении внутренней структуры материала и возникновении внутренних напряжений при сильном тепловом воздействии. Показано, что характеристики внутренней структуры существенно зависят от скорости охлаждения материала, в частности более медленное охлаждение позволяет получить больший размер зерен. После охлаждения материала до некоторой ненулевой температуры под действием остаточных напряжений и теплового движения происходит медленная релаксация, состоящая в движении дефектов, проводящем к уменьшению их общего числа и снижению уровня остаточных напряжений. Показано, что для анализа напряженного состояния в об-

разце со внутренней структурой недостаточно использовать понятие средних напряжений, а необходимо рассматривать девиацию напряжений – среднее квадратическое отклонение напряжений от среднего значения. Анализ влияния различных дефектов на остаточные напряжения показал, что это влияние сильно зависит от вида дефектов, наибольшие напряжения создают дефекты дислокационного типа, наименьшие – вакансии. Остаточные напряжения у границ монокристаллических зерен особенно сильны, если не произошло окончательное разделение зерен, полностью сформировавшиеся границы не создают столь значительных напряжений.

Отметим, что остаточные напряжения опасны не только их непосредственным влиянием на прочностные свойства конструкций, но и тем, что, в местах концентрации остаточных напряжений материал оказывается особенно подверженным химической коррозии, что серьезно ухудшает его эксплуатационные свойства. Результаты данной работы показывают, что применение метода динамики частиц к задачам термической обработки материалов позволяет анализировать влияние процесса обработки на внутреннюю структуру материала и распределение в нем остаточных напряжений, что в перспективе может быть использовано для оптимизации технологических процессов, связанных с высокотемпературной обработкой материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, (гранты 02-01-00514, 02-01-01134). Расчеты проводились с использованием ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Винокуров В.А., Куркин С.А., Николаев Г.А.* Сварные конструкции. Механика разрушения и критерии работоспособности. М.: Машиностроение, 1996. 576 с.
2. *Мясников В.П., Гузев М.А.* Геометрическая модель дефектной структуры упругопластической сплошной среды // ПМТФ. 1999. Т. 40. № 2. С. 163–173.
3. *Мясников В.П., Гузев М.А.* Геометрическая модель внутренних самоуравновешенных напряжений в твердых телах // Докл. РАН. 2001. Т. 380. № 5. С. 427–429.
4. *Hockney R.W., Eastwood J.W.* Computer Simulation Using Particles. N. J.: A. Hilger, 1988. 540 p.
5. *Кривцов А.М., Кривцова Н.В.* Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневост. мат. ж. 2002. Т. 3. № 2. С. 254–276.
6. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 385 p.
7. Метод молекулярной динамики в физической химии / Отв. ред. Ю.К. Товбин М.: Наука, 1996. 334 с.
8. *Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М.* Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. 392 с.
9. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* О механических характеристиках наноразмерных объектов // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158–2163.
10. *Кривцов А.М.* К теории сред с микроструктурой // Тр. СПбГТУ. 1992. № 443. С. 9–17.
11. *Krivtsov A.M.* Constitutive Equations of the Nonlinear Crystal Lattice // ZAMM. 1999. V. 79. Suppl. 2. P. S419–S420.

Санкт Петербург, Москва

Поступила в редакцию  
13.10.2003