

УДК 539.375

© 1999 г. А.И. ДМИТРИЕВ, С.Ю. КОРОСТЕЛЕВ, Г.П. ОСТЕРМАЙЕР,  
С.Г. ПСАХЬЕ, А.Ю. СМОЛИН, Е.В. ШИЛКО

## МЕТОД ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ, КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ НА МЕЗОУРОВНЕ

Разработан новый метод моделирования отклика материалов в условиях внешних воздействий – метод подвижных клеточных автоматов (МСА-метод, согласно английского Movable Cellular Automata). Данный метод основан на дискретном подходе к описанию моделируемых сред, что дает возможность моделировать процессы генерации повреждений и разрушения непосредственно. К настоящему времени МСА-метод успешно использовался для моделирования разрушения гетерогенных материалов и структур при динамическом нагружении. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными и показывают, что подход МСА может быть чрезвычайно полезным при решении как научных, так и технических проблем, начиная от материаловедческих задач и кончая проведением экспертных оценок жизнестойкости конструкций, структур и их элементов.

**1. Основные положения метода подвижных клеточных автоматов.** В соответствии с основными принципами физической мезомеханики поведение гетерогенных систем под нагрузкой представляет собой сложный нелинейный процесс. Этот процесс протекает на различных масштабных уровнях и включает в себя генерацию повреждений, эффекты проникания и, как последнюю стадию, разрушение [1].

Необходимость нового подхода к изучению процессов деформации и разрушения твердых тел вызвана невозможностью объяснить некоторые явления, происходящие в твердых телах, на основе подходов физики твердого тела (микроуровень) и механики сплошных сред (макроуровень). Например, метод молекулярной динамики позволяет изучать одно или максимум несколько зерен. Конституальный подход механики встречает некоторые трудности в описании процессов генерации повреждений и распространения трещин. Таким образом, для описания процессов на мезоуровне необходимо иметь новые методы. Одним из таких методов является метод подвижных клеточных автоматов [2, 3].

Подчеркнем, что метод МСА наследует все преимущества обычного подхода клеточных автоматов. В рамках метода подвижных клеточных автоматов моделируемый объект рассматривается как набор элементов – подвижных клеточных автоматов (фиг. 1). Эти элементы среды (автоматы) обладают способностью менять не только свои состояния (подобно классическим автоматам), но также и свои положения и ориентации. Таким образом для описания состояния моделируемой системы необходимо ввести в рассмотрение следующие новые параметры автомата:  $R^i$  – радиус-вектор,  $V^i$  – трансляционная скорость,  $\omega^i$  – угловая скорость,  $\theta^i$  – угол разворота,  $m^i$  – масса,  $\hat{J}^i$  – момент инерции.

Следующим, наиболее существенным положением метода МСА является введение в рассмотрение понятия "состояние пары автоматов" (отношения взаимодействующих пар автоматов) дополнительно к классическому состоянию отдельного автомата.

Заметим, что совместное рассмотрение этих состояний позволяет перейти от концепции сеток к концепции соседей. В результате автоматы имеют возможность менять своих соседей путем переключения состояний (отношений) пар. Начальная структура формируется путем задания определенных отношений каждой паре соответствующих элементов:

Наличие нового типа состояний приводит к необходимости рассмотрения нового параметра для определения критерия переключений межавтоматных отношений. В качестве такового рассматривается параметр межавтоматного перекрытия (фиг. 2)  $h^{ij} = r^{ij} - r_0^{ij}$ , где  $r^{ij}$  – расстояние между центрами соседних элементов, а  $r_0^{ij}$  определяется как  $r_0^{ij} = (d^i + d^j)/2$ ,  $d^i$  – размер автомата.

Существует два типа состояний пар (отношений): **связанные**  $h^{ij} < h_{\min}^{ij}$  и **несвязанные**  $h^{ij} > h_{\max}^{ij}$ .

В простейшем случае *связанные* – это пары автоматов, между которыми имеется химическая связь, а *несвязанные* – пары, между которыми нет химической связи. Изменение состояния отношения пары определяется относительным движением автоматов и, следовательно, среда образованная такими парами может рассматриваться как бистабильная.

Следуя модели Винера – Розенблюта, распределенная бистабильная активная среда может быть описана уравнением

$$\frac{\Delta h^{ij}}{\Delta t} = f(h^{ij}) + \sum_{k \neq j} C(ij, ik) I(h^{ik}) + \sum_{l \neq i} C(ij, jl) I(h^{jl})$$

где  $C(ij, ik(jl))$  – коэффициенты, связанные с переносом параметра перекрытия  $h$  от одной пары автоматов к другой;  $I(h^{ik(jl)})$  – явная функция  $h^{ik(jl)}$ , которая определяет перераспределение  $h^{ik(jl)}$  между парами  $ij$ ,  $ik$  и  $jl$ . Функция состояния пары  $f(h^{ij})$  имеет смысл относительной скорости автомата  $j(V_n^{ij})$ .

В линейном приближении функция  $I(h^{ik(jl)})$  может быть записана как

$$I(h^{ik(jl)}) = \psi(\alpha_{ij, ik(jl)}) V_n^{i(k)(j(l))}$$

где  $\psi(\alpha_{ij, ik(jl)})$  определяется взаимным расположением (ориентацией) пар автоматов  $ij$ ,  $ik$  и  $jl$ ;  $\alpha_{ij, ik(jl)}$  – некоторый параметр взаимной ориентации.

Эволюция среды подвижных клеточных автоматов в фазовом пространстве будет описываться следующими уравнениями движения:

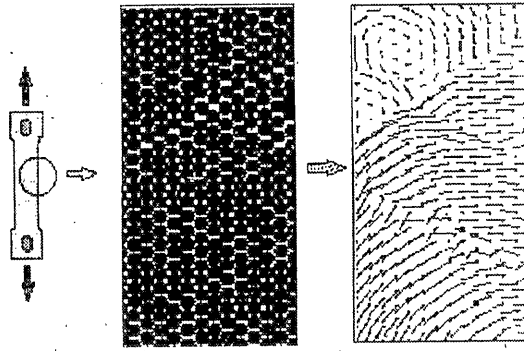
$$\frac{d^2 h^{ij}}{dt^2} = \left( \frac{1}{m^i} + \frac{1}{m^j} \right) p^{ij} + \sum_{k \neq j} C(ij, ik) \psi(\alpha_{ij, ik}) \frac{1}{m^i} p^{ik} + \sum_{l \neq i} C(ij, jl) \psi(\alpha_{ij, jl}) \frac{1}{m^j} p^{jl} \quad (1.1)$$

$$\frac{d^2 \theta^{ij}}{dt^2} = \left( \frac{q^{ij}}{J^i} + \frac{q^{ji}}{J^j} \right) \tau^{ij} + \sum_{k \neq j} S(ij, ik) \frac{q^{ik}}{J^i} \tau^{ik} + \sum_{l \neq i} S(ij, jl) \frac{q^{jl}}{J^j} \tau^{jl} \quad (1.2)$$

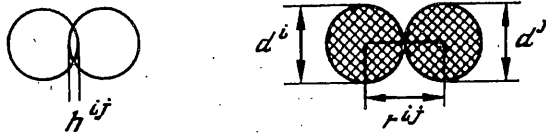
Здесь  $\theta^{ij}$  – угол относительного разворота (он также является параметром переключения, как и  $h^{ij}$  для трансляционной составляющей);  $q^{ij(jl)}$  – расстояние от центра автомата  $i(j)$  до точки контакта с автоматом  $j(i)$  (плечо момента);  $\tau^{ij}$  – тангенциальная сила парного взаимодействия;  $S(ij, ik(jl))$  – некоторые коэффициенты, связанные с переносом параметра  $\theta$  от одной пары к другой (они аналогичны коэффициентам  $C(ij, ik(jl))$  в уравнениях для трансляционной составляющей движения).

Следует заметить, что уравнения (1.1) и (1.2) полностью аналогичны уравнениям движения для многочастичного подхода.

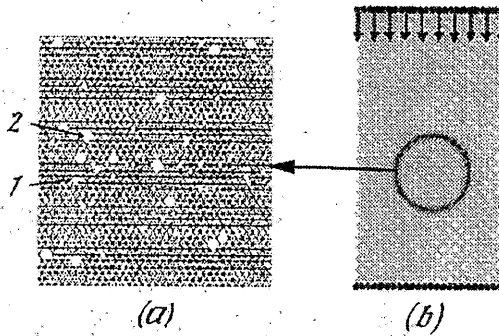
В общем случае поведение каждого автомата при внешнем воздействии определяется межавтоматными взаимодействиями. В свою очередь взаимодействия между



Фиг. 1



Фиг. 2



Фиг. 3

автоматами определяются определенными функциями отклика автоматов. Вследствие мобильности каждого автомата метод МСА позволяет непосредственно учитывать такие процессы, как:

- эффекты проникания и перемешивание масс;
- накопление повреждений, генерацию и развитие трещин;
- фрагментацию и разрушение материалов.

Используя граничные условия различного типа (жесткие, упругие, вязкоупругие и т.д.) возможно имитировать различные свойства окружающей среды, содержащей моделируемую систему. Возможно моделировать различные типы механического нагружения (растяжение, сжатие, сдвиговую деформацию и т.д.) задавая дополнительные условия на границах.

Уравнения движения (1.1), (1.2) описывают поведение систем, в которых полная механическая энергия сохраняется. В то же время для корректного описания процессов связанных с диссипацией энергии, например, тепловыделения при механических воздействиях, необходимо получить интеграл движения системы взаимодействующих элементов с явным учетом диссипативных процессов.

С этой целью рассмотрим функцию Лагранжа системы автоматов, которая зависит от обобщенных координат  $q$  и обобщенных скоростей  $\dot{q}$ , в виде

$$L = K - U$$

где  $K = K(\dot{q})$  – кинетическая,  $U = U(q)$  – потенциальная энергия.

Уравнения движения определяются через функцию Лагранжа следующим образом:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} + \frac{\partial D}{\partial \dot{q}} = 0 \quad (1.3)$$

где точка означает дифференцирование по времени, а  $D = D(\dot{q})$  – дополнительное слагаемое, зависящее только от обобщенных скоростей и учитывающее диссипацию энергии.

Введем новую переменную  $T$  – температуру следующим образом:

$$C_v m \dot{T} = \frac{\partial D}{\partial \dot{q}} \dot{q} \quad (1.4)$$

где  $C_v$  – удельная теплоемкость, а  $m$  – масса.

Учитывая, что Лагранжиан – сложная функция и с учетом (1.3):

$$\dot{L} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \ddot{q} + \left[ \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \frac{\partial D}{\partial \dot{q}} \right] \dot{q}$$

то можно показать, что уравнения движения имеют интеграл в виде

$$\left[ L - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - C_v m T \right] = 0$$

или

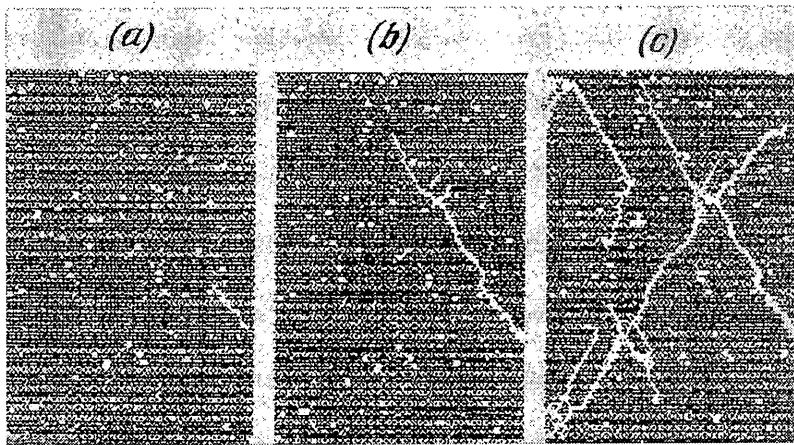
$$[K + U + C_v m T] = 0 \quad (1.5)$$

Таким образом, из уравнения (1.5) следует, что выражение в скобках, имеющее смысл полной энергии с учетом ее диссипации в виде тепла, будет сохраняться.

Целью представленных ниже примеров является показать возможности метода МСА на примере: изучения разрушения керамических пористых материалов при сжатии; изучения жизнестойкости простейших бетонных структур; моделирования генерации тепла при трении двух керамических образцов.

**2. Моделирование разрушения пористых керамических материалов.** При моделировании разрушения керамики на основе  $ZrO_2$  в условиях одноосного сжатия рассматривался образец размером  $0,4 \times 0,6$  см, размер автоматов при этом был выбран равным 70 мкм. Нагрузка прикладывалась путем задания постоянной скорости всем элементам верхнего слоя – поршня (фиг. 3). Скорость поршня варьировалась в пределах 50–500 см/с. Элементы нижнего слоя были неподвижными. Уравнения движения решались с временным шагом  $10^{-9}$  с. Начальная пористость моделируемого материала задавалась двумя способами. Микропоры 1 эффективно учитывались путем задания разорванных связей между некоторыми автоматами. Макропоры 2 моделировались путем удаления отдельных автоматов или групп автоматов из исходной структуры образца (фиг. 3). Таким образом, начальная пористость образца варьировалась в пределах от 0 до 50%.

Вследствие преимуществ метода было возможным обнаружить, что даже в хрупком  $ZrO_2$  могут образовываться кратковременные области локализованной упругой деформации. Размер таких областей порядка 0,08 см. Скорости автоматов в этих областях примерно в 10 раз превосходят скорости соседних зон. Время жизни таких явлений порядка  $10^{-7}$  с. После этого времени области размазываются. Анализ



Фиг. 4

связей между автоматами показал, что области локализованной деформации соответствуют образованию микрповреждений.

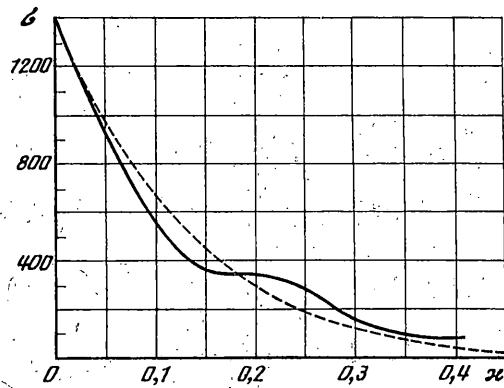
Анализ полей скоростей для образцов с различным распределением пор показал, что образование областей локализованной упругой деформации связано с концентрацией пористости и пространственным распределением дефектов в материале. Расчеты показали, что в большинстве случаев магистральная трещина распространяется вдоль пути, "трассированного" областями локализованной деформации (фиг. 4).

Как отмечалось, начальная пористость моделируемых керамических образцов варьировалась в широких пределах. На фиг. 5 приведены зависимости прочности  $\sigma$  [Мпа] моделируемых образцов от начальной пористости  $\kappa$  (кривая 1) и проведено сравнение с экспериментальными данными (кривая 2) [4, 5]. Видно, что расхождение не превышает 30%.

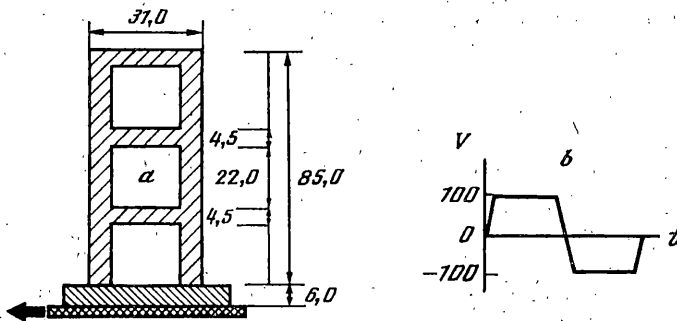
**3. Моделирование сейсмического воздействия на конструкции.** Одна из основных проблем, где свойства материалов являются критичными для конструкций – анализ условий потери их жизнестойкости, т.е. условий потери функциональных свойств материала. Метод МСА может быть использован для решения данного класса задач, поскольку он позволяет явным образом моделировать генерацию и развитие повреждений.

В качестве иллюстрации приведем результаты моделирования сейсмического воздействия на бетонные конструкции рамочного типа. Общая схема моделируемой структуры приведена на фиг. 6, а. Как видно из схемы нагружения (фиг. 6, в), моделирование сейсмического воздействия осуществлялось путем движения блока, имитирующего грунт, с периодически меняющейся скоростью  $V$  [см/с].

Динамика разрушения показана на фиг. 7, а–с. Можно видеть, что в процессе динамического нагружения данного типа происходит генерация повреждений и образование трещин в областях формирования концентраторов напряжений, обусловленных, в том числе и геометрией структуры. Повреждения развивались главным образом в местах стыков горизонтальных перекрытий с вертикальными опорами, а также происходило "срезание" опоры у поверхности "грунта". Таким образом, видно, что динамическая передача возмущений и перераспределение упругой энергии по структуре повлекла за собой образование специфичной (для данной структуры и данного режима нагружения) картины разрушения. Характерное поле векторов скоростей представлено на фиг. 7, d.



Фиг. 5

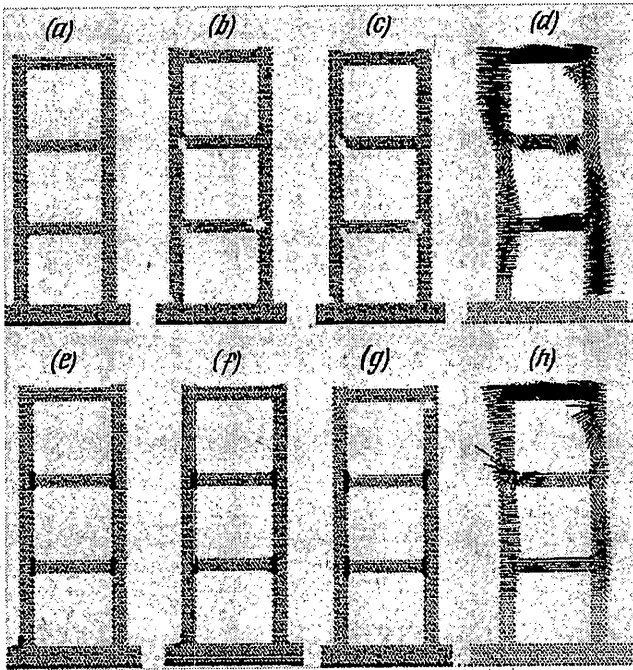


Фиг. 6

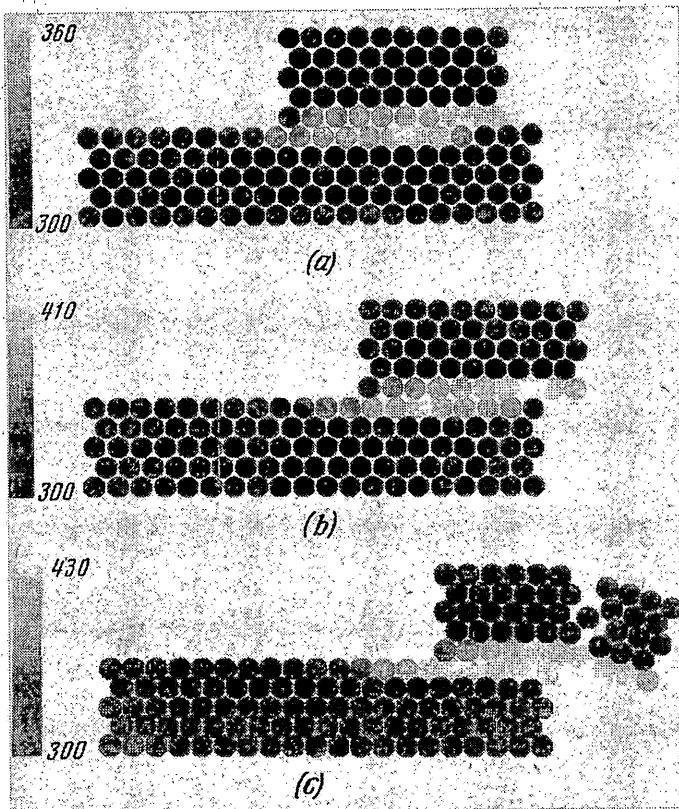
На основе анализа наблюдаемой динамики разрушения, на базе данной структуры был проведен следующий численный эксперимент: в области соединения горизонтальных перемычек с вертикальными опорами были введены прокладки из материала с более низкими упругими модулями и гораздо большей предельной деформацией. Из структуры связей в последовательные моменты времени можно видеть, что структура оказалась более "жизнестойкой" по отношению к такому типу нагружения. Если в предыдущем случае моделируемая структура разрушилась в такой степени, что фактически потеряла несущую способность, то ее модификация (фиг. 7, e-g) сохраняла целостность вплоть до последних стадий тестирования. На фиг. 7, b видно, что в самом конце тестирования все же начало происходить растрескивание опоры у верхней горизонтальной перемычки, однако целостность (способность в целом нести нагрузку) и жизнестойкость структуры при этом не нарушились.

**4. Моделирование генерации тепла в зоне контакта двух тел.** Рассматривалась задача о контакте двух керамических образцов. Размер автоматов брался равным, 0,1 мм. Уравнения движения решались с временным шагом  $10^{-9}$  с. Нижний образец размером 0,2x0,045 см был неподвижным, а ко второму, размер которого 0,2x0,045 см, прикладывалась постоянная сила с тангенциальной составляющей 300 МПа и нормальной составляющей 800 МПа. В результате приложения такой нагрузки верхний образец вдавливался в нижний и скользил по нему. За счет трения приповерхностные автоматы нагревались, при этом распространение тепла вглубь образцов не учитывалось.

Расчеты показали, что к моменту окончания взаимодействия верхний образец разгоняется до скорости 300 м/с и перейдя через край нижнего образца ломается



Фиг. 7



Фиг. 8

пополам. Максимальный нагрев приповерхностных автоматов составляет 140 градусов. На фиг. 8 показана эволюция моделируемой системы с распределением температур по автоматам.

Таким образом, на рассмотренных примерах показано, что развитый метод подвижных клеточных автоматов позволяет успешно решать задачи по моделированию разрушения хрупких материалов, исследовать влияние различных модификаций структур на изменение характера их разрушения, а также изучать процессы генераций тепла в результате диссипации энергии в различных деталях при их механическом нагружении.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Панин В.Е. Методология физической мезомеханики как основа построения моделей в компьютерном конструировании материалов // Изв. вузов. Физика. 1995. Т. 38. № 11. С. 6–25.
2. Псахье С.Г., Хори Я., Коростелев С.Ю., Смолин А.Ю., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Алексеев С.В. Метод подвижных клеточных автоматов как инструмент для моделирования в рамках физической мезомеханики // Изв. вузов. Физика. 1995. Т. 38. № 11. С. 58–69.
3. Псахье С.Г., Коростелев С.Ю., Смолин А.Ю., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Моисеенко Д.Д., Татаринцев Е.М., Алексеев С.В. Метод подвижных клеточных автоматов как инструмент физической мезомеханики материалов // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1. № 1. С. 95–108.
4. Савченко Н.Л., Саблина Т.Ю., Полетика Т.М., Артиши А.С., Кульков С.Н. Высоко-температурное спекание в вакууме плазмохимических порошков на основе  $ZrO_2$  // Порошковая металлургия. 1994. № 1/2. С. 26–30.
5. Савченко Н.Л., Саблина Т.Ю., Кульков С.Н. Комбинированный механизм упрочнения керамики  $ZrO_2-Y_2O_3$  // Изв. вузов. Физика. 1994. № 8. С. 89–95.

Томск, Берлин

Поступила в редакцию  
12.02.1999