

С. К. Годунов
С. П. Киселёв
И. М. Куликов
В. И. Мали

МОДЕЛИРОВАНИЕ
УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ
В УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ
НА РАЗЛИЧНЫХ
(АТОМНЫЙ, МЕЗО И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ)
СТРУКТУРНЫХ УРОВНЯХ



С. К. Годунов
С. П. Киселёв,
И. М. Куликов
В. И. Мали

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ
В УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛАХ НА РАЗЛИЧНЫХ
(АТОМНЫЙ, МЕЗО
И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ)
СТРУКТУРНЫХ УРОВНЯХ**



Москва ♦ Ижевск

2014

УДК 519.6
ББК 22.19
М 744



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту № 14-01-07018

Издание РФФИ не подлежит продаже

Годунов С. К., Киселёв С. П., Куликов И. М., Мали В. И.

Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. — М.–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2014. — 296 с.

В книге представлены результаты численного и экспериментального моделирования ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных уровнях. Численное моделирование производится на основе релаксационной модели Максвелла и методом молекулярной динамики. В экспериментах используется метод импульсной рентгенографии, а также проведены металлографические исследования сохраненных образцов. На задачах косоуго соударения металлических пластин показано, что численное моделирование правильно отражает картину возникновения и развития волны на контактной границе и образования струй впереди точки контакта. Попутно отмечены ограничения, которые накладывают запреты на использование предлагаемой упругопластической модели в зоне столкновения пластин с момента, при котором в этой зоне начинается расслоение материала пластин на тонкие слои. В этой зоне процесс не может быть описан упругопластической моделью. Именно это обстоятельство послужило поводом к переходу на модель молекулярной динамики.

Монография будет полезна научным сотрудникам, специалистам, аспирантам и студентам, интересующимся вопросами моделирования упругопластических деформаций на различных структурных уровнях (от подхода сплошной среды до атомарного уровня).

ISBN 978-5-4344-0217-0

ББК 22.19

© С. К. Годунов, С. П. Киселёв, И. М. Куликов, В. И. Мали, 2014

© Ижевский институт компьютерных исследований, 2014

Оглавление

Введение	8
Литература к введению	14
ГЛАВА 1. Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела	17
1.1. Кристаллическая структура твердых тел	17
1.1.1. Решетка Бравэ	17
1.1.1.1. Простые решетки Бравэ	17
1.1.1.2. Сложные решетки Бравэ	21
1.1.2. Обратная решетка	22
1.1.2.1. Построение обратной решетки	22
1.1.2.2. Индексы Миллера	23
1.1.2.3. Ячейки Вигнера–Зейтца и Бриллюэна	24
1.1.2.4. Радиальная функция распределения	25
1.1.3. Дефекты кристаллической решетки	28
1.1.3.1. Точечные дефекты	28
1.1.3.2. Дислокации в кристаллах	30
1.1.3.2.1. Образование дислокаций в кристаллах	30
1.1.3.2.2. Дислокационный механизм пластического деформирования кристаллов	33
1.1.3.3. Плоские дефекты в кристаллах	38
1.2. Уравнения движения атомов в методе молекулярной динамики ...	41
1.2.1. Уравнения Гамильтона	42
1.2.2. Основные свойства уравнений Гамильтона	43
1.3. Разностные схемы, термодинамические переменные и потенциалы взаимодействия в методе молекулярной динамики	47
1.3.1. Разностные схемы в молекулярной динамике	47
1.3.1.1. Операторный метод	48
1.3.1.2. Метод Рунге–Кутты–Нистрема (РКН)	50
1.3.1.3. Устойчивость симплектических разностных схем	52
1.3.2. Законы сохранения для симплектических разностных схем, проблема обратимости метода молекулярной динамики	53
1.3.2.1. Закон сохранения импульса	53
1.3.2.2. Закон сохранения момента импульса	53

1.3.2.3. Закон сохранения энергии	54
1.3.2.4. Проблема обратимости в методе МД	56
1.3.3. Температура, давление, уравнения механики сплошных сред	58
1.3.3.1. Формула для температуры	58
1.3.3.2. Формула для давления	59
1.3.3.3. Уравнения механики сплошных сред	62
1.3.4. Потенциалы взаимодействия атомов в твердом теле	64
1.3.4.1. Двухчастичный парный потенциал взаимодействия	65
1.3.4.2. Многочастичный ЕАМ-потенциал взаимодействия	66
1.3.4.3. Многочастичный МЕАМ-потенциал взаимодействия	69
Литература к главе 1	72
ГЛАВА 2. Математическое моделирование косоуго соударения металлических пластин методом молекулярной динамики	77
2.1. Численное и экспериментальное моделирование образования струи при высокоскоростном косоуго соударении металлических пластин	77
2.1.1. Физико-математическая постановка задачи	78
2.1.2. Обсуждение результатов расчетов и сравнение их с данными экспериментов	83
2.1.2.1. Дозвуковое симметричное соударение пластин	83
2.1.2.2. Волнообразование при соударении пластин	86
2.1.2.3. Дозвуковое несимметричное соударение пластин	87
2.1.2.4. Влияние температуры на соударение пластин	89
2.1.2.5. Сверхзвуковое соударение пластин	90
2.1.2.6. Оценка вязкости меди	91
2.2. Численное моделирование методом молекулярной динамики образования волн при косоуго симметричном соударении пластин	94
2.2.1. Постановка задачи	95
2.2.2. Обсуждение результатов численных расчетов	96
2.2.3. Механизм возникновения колебаний контактной поверхности пластин	101
2.2.4. Механизм поддержания автоколебаний	102
2.2.5. Оценка длины волны на контактной границе	103
2.2.6. Диссипация энергии при соударении пластин	107
2.3. Влияние возмущений на процесс образования волн при косоуго соударении пластин	108
2.3.1. Постановка задачи	108
2.3.2. Влияние естественных возмущений при симметричном соударении пластин	109

2.3.3. Влияние искусственных возмущений при симметричном соударении пластин	110
2.3.4. Влияние искусственных возмущений при несимметричном соударении пластин	113
Литература к главе 2	115
ГЛАВА 3. Численное моделирование компактирования и разрушения металлических нанокompозитов методом молекулярной динамики	118
3.1. Моделирование компактирования смеси нанопорошков «медь–молибден» при всестороннем сжатии и разрушения образовавшегося нанокompозита в волне разрежения.....	118
3.1.1. Постановка задачи.....	119
3.1.2. Образование компакта «медь–молибден»	124
3.1.3. Разрушение компакта «медь–молибден»	128
3.2. Моделирование динамического разрушения сферической композитной наночастицы «медная матрица–включение молибдена»..	133
3.2.1. Постановка задачи.....	133
3.2.2. Обсуждение результатов численных расчетов	135
3.2.2.1. Нагрев нанокompозита Cu–Mo	135
3.2.2.2. Сжатие нанокompозита Cu–Mo в ударной волне	137
3.2.2.3. Разрушение нанокompозита Cu–Mo в волне разрежения	139
3.2.2.4. Критическое напряжение разрушения нанокompозита Cu–Mo	142
3.2.2.5. Масштабный эффект при разрушении наночастиц ...	145
3.3. Численное моделирование деформирования и разрушения пластины нанокompозита из медной матрицы и цилиндрического включения молибдена при одноосном растяжении.....	147
3.3.1. Постановка задачи	147
3.3.2. Деформация и разрушение нанокompозита Cu–Mo	151
3.3.3. Деформация и разрушение наночастиц Cu и Mo	154
3.3.4. Влияние условий нагружения на разрушение нанокompозита Cu–Mo	156
3.4. Численное моделирование образования и разрушения интерметаллида «титан–алюминий» при одноосном растяжении.....	159
3.4.1. Постановка задачи	160
3.4.2. Синтез интерметаллида при нагреве пластин Ti и Al	162
3.4.3. Кристаллизация интерметаллида Ti–Al при охлаждении ...	164
3.4.4. Разрушение интерметаллида Ti–Al при одноосном растяжении	167
Литература к главе 3	172

ГЛАВА 4. Численное моделирование компактирования металлических микророшков в ударных волнах	176
4.1. Численное моделирование эффекта волнообразования при ударно-волновом компактировании порошков	176
4.1.1. Постановка задачи	177
4.1.2. Уравнения пористого упругопластического материала	179
4.1.3. Результаты численных расчетов компактирования порошка в цилиндрическом контейнере с поперечной перегородкой	182
4.1.4. Оценка длины волны и скорости роста возмущений	185
4.2. Влияние дефектов в перегородке на волнообразование при компактировании порошка за ударной волной	189
4.2.1. Результаты экспериментального исследования эффекта волнообразования перегородок из трансформаторной стали ...	189
4.2.2. Математическое моделирование компактирования микророшка с поперечной перегородкой	193
4.2.2.1. Расчет начальных возмущений в пластине	193
4.2.2.2. Расчет нагружения пластины и микророшка в ударной волне	195
Литература к главе 4	199
ГЛАВА 5. Расчет разрывных решений уравнений гидродинамики с гарантированным необыванием энтропии	201
5.1. Преобразование Лежандра.....	202
5.2. Одномерные уравнения газовой динамики в лагранжевых координатах	205
5.3. Одномерная дискретная модель движения газа в координатах Лагранжа	209
5.4. Результаты вычислительных экспериментов	221
Литература к главе 5	224
ГЛАВА 6. Моделирование упругопластических деформаций с помощью уравнений теории упругости и максвелловских релаксаций	226
6.1. Алгоритм расчета больших упругопластических деформаций в лагранжевых координатах на основе схемы Годунова	227
6.1.1. Корректировка матрицы B , энтропии S с учетом неравенств, которым подчинены константы в уравнении состояния.....	237
6.1.2. Процедура вычисления матрицы вторых производных $E_{c_j c_k}$	240
6.1.3. Преобразование Лежандра. Построение линеаризованной системы в ячейках сетки и одномерных систем, которые используются при решении одномерных задач Римана	243

6.1.4. Решение линеаризованной задачи Римана	247
6.1.5. Расчет законов сохранения.....	252
6.1.6. Уточнение описания деформаций счетных ячеек, лежащих на внешних границах ячеек.....	255
6.2. Исследование уравнения состояния при больших упругопластиче- ских деформациях	259
6.2.1. Расчет производных от энергии E , записанной в главных осях тензора DD^T	259
6.2.2. Уравнение состояния в каноническом виде	265
6.2.3. Еще один вариант уравнения состояния при описании пла- стических деформаций	283
6.3. Модельные расчеты процесса волнообразования	285
Литература к главе 6	294