

## Распределение напряжений и деформаций на интерфейсе «поверхностный слой – подложка»: моделирование на основе стохастического подхода

Д.Д. Моисеенко, П.В. Максимов

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634021, Россия

Проведена серия численных экспериментов, нацеленных на выявление закономерностей формирования возмущений на внутренних границах раздела и поверхностях твердого тела при внешней приложенной механической нагрузке. Применен разработанный авторами стохастический алгоритм, использующий как базовые понятия классической теории упругости на макромасштабном уровне, так и результаты, полученные в рамках вероятностных подходов для более низких масштабных уровней. Обнаружено, что деформационный профиль поверхностного слоя нагруженного твердого тела имеет многоуровневую самоподобную структуру, где форма поверхности фронта возмущений на более высоком масштабном уровне подобна форме фронтов возмущений от концентраторов напряжений на более низких масштабных уровнях. Распределение напряжений и деформаций на интерфейсе «поверхностный слой – подложка» имеет «шахматный» характер.

## Stress and strain distribution on the surface layer – substrate interface: simulation on the basis of a stochastic approach

D.D. Moiseenko and P.V. Maksimov

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, 634021, Russia

A series of numerical experiments have been carried out in order to reveal the mechanisms of disturbance generation on internal interfaces and surfaces of a solid under external applied mechanical loading. Use is made of a stochastic algorithm developed by the authors, which employs both basic notions of the classical theory of elasticity at the macroscale level and results obtained in the framework of probabilistic approaches for lower scale levels. It is found that the strain-induced profile of the surface layer of a loaded solid has a multilevel self-similar structure where the shape of the disturbance front surface at a higher level is similar to the front shape of disturbances induced by stress concentrators at lower scale levels. Stress and strain distribution on the surface layer – substrate interface has a chessboard-like pattern.

### 1. Введение

В Институте физики прочности и материаловедения (ИФПМ) СО РАН на стыке физики и механики деформируемого твердого тела активно развивается новое научное направление — физическая мезомеханика материалов [1, 2], которая позволяет органично связать подходы дислокационных теорий на микромасштабном уровне с концепциями механики сплошных сред на макромасштабном уровне. На этой основе открываются широкие перспективы для компьютерного конструирования новых материалов.

Выявление новых механизмов деформации в наноструктурированных поверхностных слоях деформируемого твердого тела [3] открыло новые горизонты для

исследования и, что более существенно, прогнозирования динамики формирования концентраторов напряжений, картина распределения которых на мезомасштабном уровне дает представление о характере пластического течения не только на поверхности, но и в глубине материала. Проведенный в [4] анализ обнаруженного в [3] «эффекта шахматной доски» выявил условия формирования спиральных волн локализованного пластического течения и позволил сформулировать некоторые «отправные точки» в предлагаемой нами модификации метода возбудимых клеточных автоматов.

В рамках данного подхода взаимодействие осуществляется посредством обмена энергиями соседних элементов среды, при котором различные структурные

элементы данной среды обмениваются между собой как механической, так и тепловой энергией. Более того, в результате этого взаимодействия происходит переход части механической энергии в тепловую, обусловленный тем, что любое физическое тело, не подверженное внешнему воздействию, стремится к увеличению собственной энтропии, а значит, более упорядоченное механическое движение переходит в более хаотичное тепловое. В результате этого, в любой момент времени будет известно, какова величина внутренней энергии данного элемента среды, что позволит вычислить значения компонент тензора напряжений, используя формулы Мурнагана [5]. Для учета анизотропии реального образца, а также влияния внешних условий на его физические свойства, в правила взаимодействия клеточных автоматов закладывается определенный уровень стохастичности, отражающий степень отклонения некоторых параметров модели от реальных физических характеристик образца. Введение стохастики обусловлено тем, что в рамках предлагаемого подхода рассматриваются элементы среды мезомасштабного уровня, физические параметры которых (такие как температура, давление, упругие модули) не могут быть измерены «абсолютно точно», как для объектов макромира. Хорошо известно, что на микроуровне действуют свои законы, там нельзя однозначно определить параметры физических объектов, о них можно говорить лишь как о наборе взаимосвязанных случайных величин. Мезомасштабный уровень является не только связующим, но и непосредственным определяющим звеном в иерархической цепи факторов, влияющих на поведение поверхностей и границ раздела деформируемого твердого тела [6].

В более ранней работе авторов [7], при рассмотрении процессов на макромасштабном уровне, в качестве базовых кривых, описывающих локальные возмущения на низком масштабном уровне, выбирались эллипсы. Этот выбор мотивировался тем, что любой тензор второго ранга в трехмерном пространстве можно геометрически представить в виде эллипсоида. При этом одна полуось каждого такого эллипса располагалась перпендикулярно границе раздела, а другая — параллельно. В качестве ожидаемых значений полуосей выбирались величины, зависящие от интенсивности процесса деформации, т.е. от скорости нагружения, а также от разницы модулей сред на границе раздела.

Дальнейший анализ численных экспериментов, проведенный в работах [6, 8], позволил сделать вывод о том, что на низком масштабном уровне совокупность мелких неоднородностей структуры порождает коллективные зигзагообразные возмущения в поверхностном слое деформируемого материала. Было показано, что в силу коллективного эффекта стохастические зигзагообразные «всплески» внутри мезообъема форми-

руют совокупный деформационный рельеф, осью которого является часть спирали.

Таким образом, предлагаемая в [3] концепция «шахматной доски», с одной стороны, и предлагаемый в данной работе стохастический подход, с другой, открывают перспективы для концептуального обоснования роли границ раздела и поверхностных слоев твердого тела как самостоятельных подсистем в твердых телах в полях внешних воздействий.

## 2. Концепция стохастического подхода

Основной идеей предлагаемого стохастического подхода является то, что деформирование образца рассматривается как процесс обмена энергиями соседних элементов описываемой сплошной среды. При этом учитывается стохастический характер описываемых явлений, обусловленный микро- и мезомасштабностью моделируемых объектов, а также неконтролируемостью внешних условий, влияющих на свойства материала. Стохастический подход учитывает особенности протекания физических процессов на мезо- и микромасштабном уровнях. Таким образом, в рамках предлагаемой модели базовым параметром состояния элемента среды является энергия, которая в зависимости от ее трансформации в тот или иной вид может выражаться в терминах различных измеряемых на практике величин (тепловая энергия → температура, работа → деформация, потенциальная энергия → напряжения и т.д.).

Сделаем одно весьма существенное замечание. Поскольку в любом способе описания той или иной физической реальности существует необходимость определения законов поведения «мельчайшего», или «простейшего», элемента, мы должны полностью отдавать себе отчет в том, что наличия какой бы то ни было внутренней структуры этого «первоначального» элемента мы не предполагаем. Таким образом, мы имеем полное право полагать, что каждый элементарный объем (клеточный автомат) является однородным и изотропным. Энергия, будучи скалярной величиной, по нашему мнению, способна наиболее корректно описывать особенности взаимодействия совокупности «черных ящиков», коими являются клеточные автоматы, имитирующие элементарные объемы материала.

Отталкиваясь от простейшей модели идеального газа, Мурнаган пришел к выводу, что в изотропной упругой среде затраты энергии элемента среды на его деформацию должны зависеть лишь от коэффициентов растяжения  $k_1, k_2, k_3$  в системе координат, где тензор деформации диагонален [5, 9]. Таким образом, при деформации среды с заданной величиной энтропии  $S$  плотность внутренней энергии  $E$  (на единицу массы) определяется только через  $k_1, k_2, k_3, S$ :

$$E = E(k_1, k_2, k_3, S). \quad (1)$$

Из равноправия координатных осей следует, что  $E$  является симметрической функцией  $k_1, k_2, k_3$  (т.е. не меняется при перестановке этих аргументов). Оказывается, что знание производных  $E_{k_1}, E_{k_2}, E_{k_3}$  позволяет определить напряжения в деформированной среде подобно тому, как в идеальном газе через производную  $E_\rho(\rho, S)$  можно вычислить давление  $p = \rho^2 E_\rho(\rho, S)$ . Исходя из данных предположений Мурнаган предложил соотношения, позволяющие получить компоненты тензора напряжения в деформируемой упругой среде с начальной плотностью  $\rho_0$  через производные от плотности ее внутренней энергии  $E = E(k_1, k_2, k_3, S)$  следующим образом:

$$\sigma_{11} = \frac{\rho_0}{k_2 k_3} E_{k_1}, \quad \sigma_{22} = \frac{\rho_0}{k_3 k_1} E_{k_2}, \quad \sigma_{33} = \frac{\rho_0}{k_1 k_2} E_{k_3}. \quad (2)$$

Также было показано, что в изотропной упругой среде все остальные компоненты тензора напряжений при описанной выше деформации равны нулю:

$$\sigma_{12} = \sigma_{21} = \sigma_{13} = \sigma_{31} = \sigma_{23} = \sigma_{32} = 0, \quad (3)$$

а температура среды определяется следующим образом:

$$T = E_S(k_1, k_2, k_3, S). \quad (4)$$

Ввиду неравенства нулю только диагональных компонент тензора напряжений, введем следующие обозначения:  $\sigma_{ii} = s_i$ . Если плотность энергии среды  $E$  (на единицу массы) зависит только от энтропии  $S$  и плотности  $\rho = \rho_0/k_1 k_2 k_3$ , то выражения для  $s_1, s_2, s_3$  будут выглядеть так:

$$\begin{aligned} s_1 &= \rho k_1 E_{k_1} = \rho k_1 \rho_{k_1} E_\rho = -\rho k_1 \frac{\rho_0}{k_1^2 k_2 k_3} E_\rho = -\rho^2 E_\rho, \\ s_2 &= \rho k_2 E_{k_2} = \rho k_2 \rho_{k_2} E_\rho = -\rho k_2 \frac{\rho_0}{k_1 k_2^2 k_3} E_\rho = -\rho^2 E_\rho, \\ s_3 &= \rho k_3 E_{k_3} = \rho k_3 \rho_{k_3} E_\rho = -\rho k_3 \frac{\rho_0}{k_1 k_2 k_3^2} E_\rho = -\rho^2 E_\rho. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, для изотропной среды  $s_1 = s_2 = s_3 = -\rho^2 E_\rho$ , т.е. нормальные напряжения, действующие на все площадки в данной среде, одинаковы. Величину такого напряжения, взятую с обратным знаком, назовем давлением и обозначим через  $p$ :

$$p = \rho^2 E_\rho(\rho, S). \quad (6)$$

Разложение малого изменения плотности внутренней энергии среды  $dE$  с использованием приведенных сейчас формул приводит к термодинамическому тождеству:

$$\begin{aligned} dE(k_1, k_2, k_3, S) &= E_{k_1} dk_1 + E_{k_2} dk_2 + E_{k_3} dk_3 + E_S dS = \\ &= \frac{s_1}{\rho} \frac{dk_1}{k_1} + \frac{s_2}{\rho} \frac{dk_2}{k_2} + \frac{s_3}{\rho} \frac{dk_3}{k_3} + TdS, \end{aligned} \quad (7)$$

которое аналогично тождеству  $dE = \frac{1}{\rho^2} p d\rho + TdS$  для идеального газа, находящегося под давлением  $p$ .

Рассматривая элемент объема твердого тела как систему осцилляторов, колебания которых являются стохастическими, можно получить соответствующие распределения и для макропараметров данного материала, таких как температура, энтропия, удельная теплоемкость и др. Так как скорость молекулы определяется случайным образом, а температура тела — исходя именно из скоростей молекул, то и температура тела будет являться случайной величиной. Направление движения молекулы также является случайным, а значит, ввиду того, что количество молекул в ансамбле ограничено, мера беспорядка (энтропия) будет также случайным параметром. Исходя из этого логично определять тепловую энергию тела, зависящую от его температуры и энтропии, также случайным образом. Работа, совершаемая элементом газа, жидкости или твердого тела, напрямую связана с тепловой энергией. Какой бы физический процесс ни рассматривался, он всегда может быть описан как переход этих двух видов энергии друг в друга. Следовательно, зная полную энергию системы и энергию, которую она получила или потеряла вследствие совершения определенной работы, можно узнать, какова ее тепловая энергия.

Здесь следует принять во внимание тот факт, что кинетическая часть полной энергии элемента среды ответственна за производимую им работу и изменение его температуры, тогда как потенциальная энергия элемента напрямую взаимосвязана с его способностью к производству энтропии. Потенциальная энергия по своему изначальному смыслу является мерой способности системы к реализации того или иного процесса, а кинетическая — мерой интенсивности протекания этого процесса. Структурная перестройка материала, связанная с изменением энтропии, прежде всего, влечет за собой изменение его формы, а следовательно, и производство работы.

Величину потенциальной энергии объекта можно оценить лишь по тому, какое количество кинетической энергии может получить данный объект в результате преобразования энергии. Значит, нельзя сказать, каков уровень потенциальной энергии того или иного физического объекта, не зная, в каком процессе он участвует и в какой вид кинетической энергии перейдет его потенциальная энергия. При этом можно говорить лишь об изменении потенциальной энергии.

Точно так же нельзя вычислить энтропию физического объекта, можно сказать лишь, насколько она увеличилась или уменьшилась в результате того или иного физического процесса. В самом деле, если энтропию понимать как «меру беспорядка» системы, то что в таком случае может являться эталонной «мерой порядка»? Очевидно лишь то, что энтропия как физическая величина проявляет себя лишь в процессе своего изменения. Из этого можно заключить, что изменение энтропии проявляется через изменение формы так же,

как преобразование потенциальной энергии проявляется в изменении кинетической энергии.

Предлагаемая модель учитывает пороговый характер активации и временное суммирование входящих энергий. Трехмерный образец материала разбивается на сеть кубических элементов среды, моделируемых с помощью клеточных автоматов. Каждый элемент данной трехмерной сети, нумеруемый индексами  $i, j, k$ , характеризуется двумя величинами: фазой  $\phi_{ijk}^n$  и уровнем тепловой энергии  $Q_{ijk}^n$ , верхний индекс в обозначении которых отвечает за дискретный момент времени. При этом каждая фаза характеризует одно из состояний клеточного автомата:  $\phi_{ijk}^n = 0$  — упругая деформация,  $\phi_{ijk}^n = 1$  — пластическая деформация,  $\phi_{ijk}^n = 2$  — деформационное упрочнение,  $\phi_{ijk}^n = 3$  — предразрушение,  $\phi_{ijk}^n = 4$  — разрушение. Для того чтобы фаза элемента  $\phi_{ijk}^n$  изменилась, произведение уровня его тепловой энергии  $Q_{ijk}^n$  и коэффициента  $\alpha$ , характеризующего асимметрию при изменении объема элемента среды, должно превысить значение определенной случайной величины  $\theta_m$ , математическое ожидание которой  $M\theta_m = Q_m$  зависит от свойств среды в данный момент времени. Величина коэффициента  $\alpha$  в рамках предлагаемого алгоритма вычисляется как отношение среднего арифметического коэффициентов растяжения и их среднего геометрического, а значит, значение  $\alpha$  не меньше единицы:

$$\alpha = \frac{k_1 + k_2 + k_3}{3\sqrt[3]{k_1 k_2 k_3}} \geq 1. \quad (8)$$

Следует заметить, что каждый такой клеточный автомат, в отличие от простого возбудимого автомата, пройдя всю цепочку превращений, остается в состоянии разрушения. Все указанные условия задают следующие правила перехода для одного клеточного автомата:

$$\phi_{ijk}^{n+1} = \begin{cases} 0, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 0, \alpha Q_{ijk}^{n+1} < \theta_1, \\ 1, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 0, \alpha Q_{ijk}^{n+1} \geq \theta_1, M\theta_1 = Q_1, \\ 1, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 1, \alpha Q_{ijk}^{n+1} < \theta_2, \\ 2, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 1, \alpha Q_{ijk}^{n+1} \geq \theta_2, M\theta_2 = Q_2, \\ 2, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 2, \alpha Q_{ijk}^{n+1} < \theta_3, \\ 3, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 2, \alpha Q_{ijk}^{n+1} \geq \theta_3, M\theta_3 = Q_3, \\ 3, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 3, \alpha Q_{ijk}^{n+1} < \theta_4, \\ 4, & \text{если } \phi_{ijk}^n = 3, \alpha Q_{ijk}^{n+1} \geq \theta_4, M\theta_4 = Q_4. \end{cases} \quad (9)$$

Стохастичность при задании пороговых значений тепловой энергии обуславливается тем, что для одного и того же материала эти значения могут меняться, в зависимости от наличия разного рода дефектов, локальных изменений энтропии, а также от внешних условий (температура, давление, влажность и др.).

Условимся, что соседними клеточными автоматами для рассматриваемого автомата будут называться те автоматы, у которых только один из индексов отличается от соответствующего индекса данного автомата на единицу. Для дальнейшего построения модели нам необходимо учитывать тот факт, что изменение величины полной энергии элемента среды  $E_{ijk}^n$  связано с количественными изменениями двух видов энергии: механической энергии  $A_{ijk}^{n+1}$ , отвечающей за изменение объема и формы элемента и являющейся, по сути, работой, совершаемой либо над элементом среды, либо им самим, и тепловой энергии  $Q_{ijk}^{n+1}$ , отвечающей за изменение температуры и энтропии данного элемента среды, т.е. «теплого состояния» тела.

В термодинамике тепловое состояние тела характеризуется количественно с помощью числа микроскопических способов, которыми это состояние может быть осуществлено. Данное число называется статистическим весом состояния и обозначается буквой  $\Gamma$ . Если тело предоставлено самому себе, то оно стремится перейти в наиболее вероятное состояние, т.е. состояние с максимальным статистическим весом. Обычно пользуются не самим числом  $\Gamma$ , а его логарифмом, умноженным на постоянную Больцмана  $k$ . Определенная таким образом величина называется энтропией тела:  $S = k \ln \Gamma$ . Отметим, что данное определение энтропии базируется на понятии «квазиравновесности» системы и в случае механики деформируемого твердого тела имеет смысл лишь в квазистатическом приближении.

Каждый моделируемый элемент среды на каждом  $n$ -м временном шаге этого алгоритма взаимодействует с соседними элементами, причем величина энергии, полученной одним из них в результате этого взаимодействия, определяется случайным образом и зависит от соответствующих разниц уровня его суммарной энергии с уровнями суммарной энергии каждого соседа. Стохастичность в данном случае обуславливается мезомасштабным уровнем моделируемых объектов, т.е. достаточной их близостью микромиру, где многие физические величины, такие как координата, скорость объекта, определяются случайным образом. Следует учитывать также и то, что элементы среды, находящиеся в разных состояниях, неодинаково разделяют полученную энергию на части, идущие на увеличение энтропии и изменение объема. Как было сказано выше, различным состояниям элемента соответствуют разные уровни накопленной тепловой энергии. Соответственно, чем большим уровнем тепловой энергии характеризуется данное состояние элемента среды, тем больше будет доля полученной энергии, идущая на повышение тепловой энергии, и тем меньше энергии будет расходоваться на энергообмен с соседями.

Будем полагать, что переход энергии из одного клеточного автомата в другой происходит поэтапно. На

первом этапе часть энергии  $dE$  переходит из одного автомата в другой, на втором происходит разделение энергии, полученной в результате одним из автоматов:

1) в результате взаимодействия с соседями на первом временном шаге элемент может увеличить свою внутреннюю энергию  $dE_{ijk}$  на  $dE'$  в результате производства над ним работы  $dA'$ , а также в результате теплообмена (перенос «температурной части»  $dQ'$ ); полученная энергия  $dE'$  идет на увеличение тепловой энергии  $dQ_{ijk}$  данного элемента среды и на изменение его размеров;

2) на втором шаге по времени в результате изменения объема совершается работа  $dA''$  над соседними элементами, а также происходит процесс теплообмена, в котором участвует часть тепловой энергии  $dQ_{ijk}$ .

Описанное разделение энергии будет носить стохастический характер, что обусловлено наличием разного рода дефектов и локальных изменений энтропии в реальных образцах, а также неконтролируемыми изменениями внешних условий, таких как температура, давление, влажность. Как уже говорилось, одна часть энергии данного элемента среды  $dA$  уходит на изменение его формы и объема, а другая — на изменение его тепловой энергии  $dQ$ . Следует учитывать также дальнейшее перераспределение энергий. Так, одна часть работы  $dA$  уходит на изменение объема тела ( $dA_v$ ), а другая ( $dA_f$ ) — на изменение формы. Приток тепловой энергии, в свою очередь, связан с изменением температуры  $T$  и энтропии  $S$  данного элемента среды. При этом, чем более пластичным будет материал, т.е. чем больше будет его энтропия, тем большая доля энергии будет расходоваться на формоизменение данного элемента среды, а значит, существует прямая зависимость между механической энергией  $dA_f$ , идущей на формоизменение материала, и частью тепловой энергии, отвечающей за изменение энтропии  $dS$ . В свою очередь, изменение температуры  $dT$  связано с работой ( $dA_v$ ), затрачиваемой на изменение объема материала. Это подтверждается тем, что при охлаждении объем тела уменьшается, а при нагревании — увеличивается за счет теплового расширения.

Итак, получив на  $n$ -м временном шаге энергию  $dE_{ijk}^n$ , клеточный автомат с индексами  $i, j, k$  совершает следующую последовательность действий:

1. Случайным образом разделяет полученную энергию на тепловую энергию  $dQ_{ijk}^n$  и на работу  $dA_{ijk}^n$ , совершенную над данным элементом среды. При этом ожидаемые значения данных долей энергии зависят от вида материала, а стохастичность при их вычислении обуславливается наличием неоднородностей в реальном образце, а также изменчивостью внешних условий.

2. Осуществляет обмен энергией с соседними клеточными автоматами: для каждого соседнего автомата вычисляется приток механической энергии через соот-

ветствующую грань ячейки таким образом, чтобы уровень механической энергии  $dA_{i'j'k'}^{n+1}$  каждого соседа был равен механической энергии  $dA_{ijk}^{n+1}$  данного автомата.

В результате, на каждом временном шаге мы будем иметь информацию о том, какую работу выполняет каждый клеточный автомат, а также об уровнях тепловой энергии, которой он обладает. Зная работу элемента среды, можно вычислить компоненты его тензора напряжений с помощью формул Мурнагана (2), (3), (5), (6).

В ходе описываемого процесса элемент среды будет тратить часть поступающей энергии на увеличение энтропии, становясь более пластичным. Очевидно, подобное изменение свойств клеточного автомата повлечет за собой постепенное уменьшение значения модуля упругости  $(E_{cl})_{ijk}^n$ . Следовательно, постепенно все большая часть элементов будет испытывать пластическую деформацию, после чего последуют стадии предразрушения и разрушения материала. При этом общая картина деформации будет зависеть от вида материала моделируемого образца.

### 3. Численный эксперимент

За последнее десятилетие в сфере технологий получения новых материалов и покрытий на их основе существенный прогресс достигнут благодаря введению так называемого «наноструктурного уровня» воздействия на материал. Многие экспериментальные исследования показали, что наноструктурированные композиты обладают экстраординарными механическими и термическими характеристиками, выходящими далеко за пределы значений, ожидаемых в рамках классической теории твердого тела [8, 10]. К настоящему моменту в ИФПМ СО РАН разработан новый стохастический подход, позволивший получить многообещающие результаты, касающиеся как прогнозирования поведения интерфейсов, так и компьютерного конструирования наноструктурированного материала [11].

На базе «энергетически модифицированного» подхода возбудимых клеточных автоматов были проведены численные эксперименты, нацеленные на реализацию многоуровневой модели взаимодействия по всей площади границы раздела «поверхностный слой – подложка». Однако впервые подробный разбор физических факторов, влияющих на специфический характер гофрировки поверхностного слоя, был проведен на базе многочисленных и уникальных экспериментальных данных А.В. Паниным в [3].

В предлагаемом исследовании экспериментально выявленные факторы протекающих процессов «переводились» на язык энергетического межэлементного взаимодействия, теоретически обобщающего понятия «сила», «напряжение», «деформация» и т.п. Экспериментально обнаруженная «шахматная структура», таким

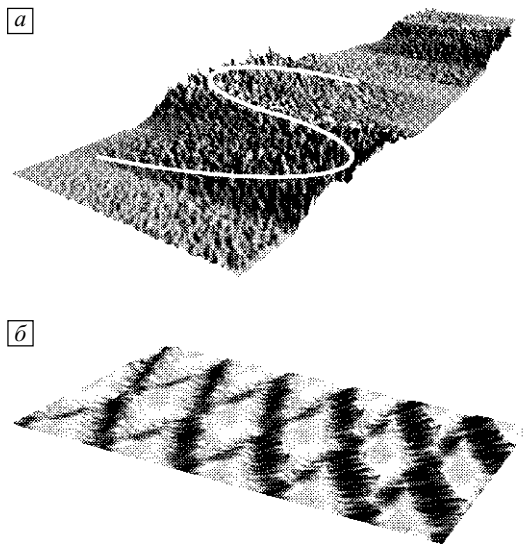


Рис. 1. Картина остаточного деформационного профиля в виде двойной спирали на поверхности деформируемого образца:  $E_{\text{surface}} = 2E_{\text{bulk}}$  (а),  $\frac{1}{2}E_{\text{bulk}}$  (б)

образом, органично вписывается в реализацию ансамбля самоорганизующихся «энергетических центров» поглощения и выделения энергии в модели модифицированных возбудимых клеточных автоматов. При этом спиральные волны, распространяющиеся вдоль границы раздела разномодульных сред, являются естественным следствием колебательных процессов, совершенных каждым возбужденным автоматом.

Так, в серии численных экспериментов по моделированию остаточного деформационного профиля, возникающего на поверхности нагруженного твердого тела в результате генерации цепочки последовательных «энергетических колебаний» (регулярных локальных флуктуаций энергии), было выявлено, что так называемые «спиральные волны» зависят не только от толщины приповерхностного слоя, но и от соотношения эффективных модулей поверхности и подложки (рис. 1). Ана-

лиз этих результатов показывает, что колебания уровня энергии каждого элемента среды зависят не только от характера его взаимодействия с «соседями», расположенными в исследуемой плоскости, но и от характера взаимосвязи с элементами, расположенными непосредственно в подложке. Генерация разрывных солитоноподобных S-образных возмущений свидетельствует о своего рода «деформационном запаздывании» поверхностного слоя по отношению к более мягкой подложке. Энергия, накопленная в поверхностном слое, достаточно долго может перетекать в нижний слой с малым упругим модулем, прежде чем вновь будет трансформироваться в образование очередного S-образного витка (рис. 1, а). В то же время, в случае «ослабленного» поверхностного слоя (рис. 1, б), механическая энергия не имеет возможности быстро распределиться в глубине более жесткой подложки и практически напрямую переходит в работу по формированию двойной спирали на поверхности. Таким образом, существенным здесь является фактор «запаздывания» или «сдвига по фазе» в обменных процессах между активными элементами вдоль границы раздела и по обе стороны от нее.

Проблема несоответствия фаз колебаний энергии элементов среды встает наиболее остро в связи с процессами пластического течения наноструктурированных поверхностных слоев. В отдельной серии численных экспериментов по моделированию поведения тонкого поверхностного слоя исходный образец представляет собой параллелепипед с исследуемой поверхностью в виде правильного квадрата. Поверхность разбивается на сеть элементов с изначально стохастичным разбросом внутренней энергии (т.е. фактически образец хаотично равномерно «шероховат»). Далее в процессе внешнего одноосного нагружения каждый локальный объем начинает осуществлять разноосные притоки и оттоки энергии, интерпретируемые в классическом смысле как растягивающие и сжимающие напряжения. Несмотря на изначально хаотичность в распределении пространственно локальных уровней

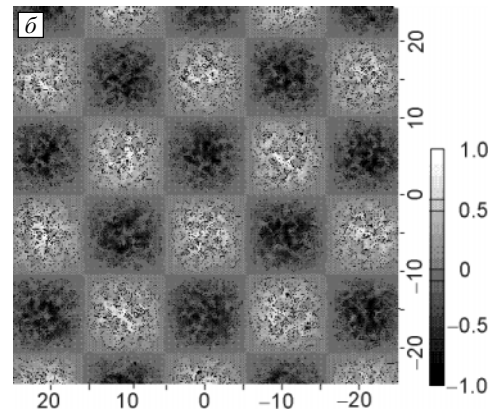
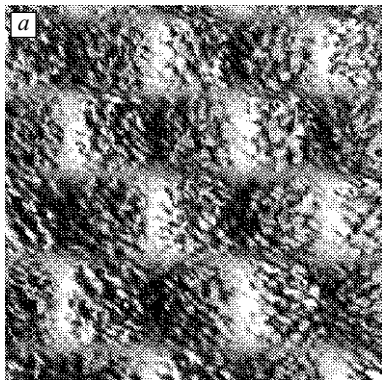


Рис. 2. Остаточный деформационный профиль в виде «шахматной доски» на поверхности деформируемого материала: рельеф поверхности (а), «топографическая карта» поверхности (б)

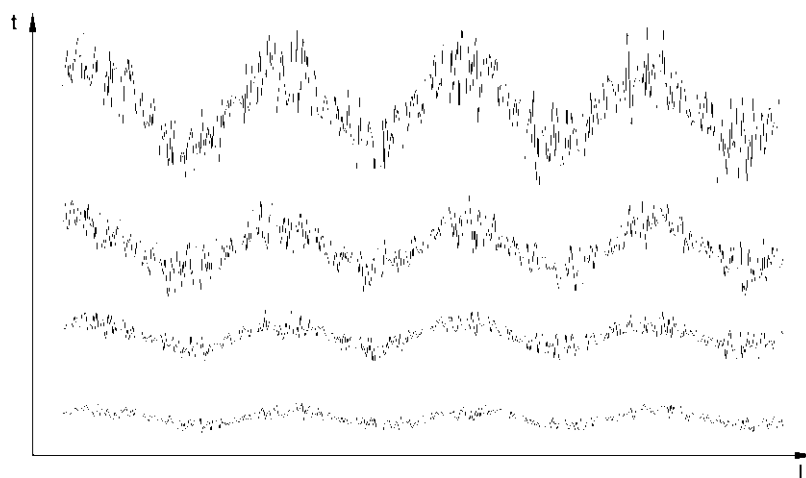


Рис. 3. Деформационные профили образца в последовательные моменты времени

энергии, процессы самоорганизации приводят к формированию все более и более правильных по форме «клеток» деформационного рельефа, в которых растягивающие и сжимающие напряжения действуют с равным геометрическим периодом (рис. 2).

На рис. 3 показаны профили «срезов» образца в последовательные моменты времени. Видно, что несмотря на то, что локальные деформационные пики низкого масштабного уровня хаотично меняют свое местоположение, макрофрагменты «шахматной доски» проявляются все более и более явным образом. Это подтверждает тезис о том, что процесс самоорганизации протекает не на «видимом» уровне напряжений/деформаций (сил/смещений), а на более глубинном — на уровне перераспределения различных видов энергии.

Наибольший интерес, по нашему мнению, представляет результат численного эксперимента по моделированию протекания пластической деформации в глубине образца по выделенному срезу. Воспользовавшись приближением «виртуальной границы раздела», расположенной на малом (по сравнению с общей глубиной образца) расстоянии от поверхности, мы получили картину формирования сопряженных мезополос сдвига, распространяющихся в глубине образца от вогнутостей и выпуклостей «шахматной доски», наблюдаемой на поверхности (рис. 4). Можно видеть, что период чередования мезополос ровно в два раза меньше периода самого гофра. В динамике протекания процесса самоорганизации конгломератов ячеек низкого масштабного уровня это означает, что концентраторы напряжений (источники или абсорбенты энергии) закрепляются на виртуальной границе раздела под поверхностью материала с тем, чтобы в дальнейшем осуществить свой вклад в увеличение амплитуды коллективной осцилляции уровней энергии. Наблюдаемые вторичные полосы от «горбов» гофра есть результат «сброса» энергии, накопленной в результате некомпенсированных оста-

точных трансляционно-ротационных мод, возникающих при распространении «первичных» полос от «впадин» гофра. Именно благодаря тому, что процессы перераспределения энергии носят циклический (хотя и затухающий) характер, в каждый фиксированный момент времени полное термодинамическое равновесие системы не достигается. Таким образом, каждый концентратор, релаксируя свою избыточную энергию на полосах пластической деформации, не только сбрасывает избыточную энергию, но и становится энергетическим абсорбентом, то есть вынуждает возбуждаться «сопряженные» ему концентраторы с тем, чтобы получить очередную порцию энергии, которая тоже впоследствии окажется избыточной. Этот процесс продолжается до тех пор, пока вся энергия не трансформируется в производство энтропии, то есть в пластическую деформацию всего образца в чистом виде. В свою очередь, этот идеализированный вариант недостижим ввиду выхода процессов разрушения на макроуровень, где происходит стремительный рост формирования макротрещин.

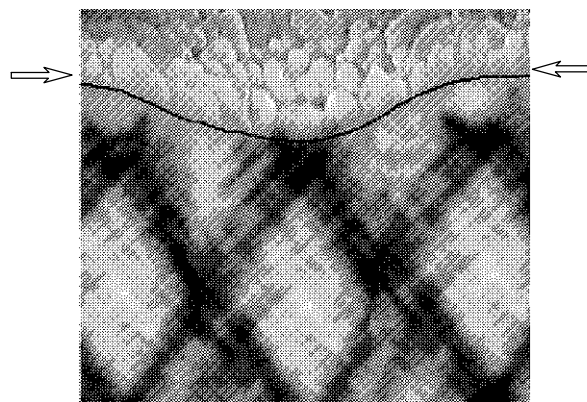


Рис. 4. Формирование мезополос на срезе фрагмента образца с «шахматной доской». Стрелками и черной линией помечена виртуальная граница раздела

#### 4. Заключение

В заключение необходимо отметить, что полученные результаты численных расчетов реализуются благодаря введению принципа двухуровневости и трехности стохастического перераспределения энергии между локальными мезообъемами среды. С помощью предложенного алгоритма могут быть вычислены как упругие, так и неупругие механические характеристики поверхностей и границ раздела, которые не могут быть измерены экспериментально, например упругие модули, коэффициент Пуассона, коэффициент прочности на разрыв и др. Результаты данной работы могут быть полезны как при конструировании новых материалов и оптимизации их свойств, так и для предсказания поведения нагруженного твердого тела на основе анализа картины деформаций поверхности и внутренних границ раздела. Преимущество предложенного метода состоит в том, что он применим не только к случаю моделирования деформации, но и, вообще, в том случае, когда необходимо описать приток внешней энергии и дальнейшее ее распространение по образцу, независимо от того, какого рода воздействию подвергается исследуемый материал: механическому, термическому, радиационному и т.д. Исходя из этого мы полагаем, что рассмотренный подход обладает определенными перспективами для применения к решению задач из таких областей, как термостойкость материалов, деформация при высоких температурах и др., и может быть взят за основу при моделировании соответствующих процессов.

Авторы выражают глубокую благодарность академику В.Е. Панину и к.ф.-м.н. А.В. Панину за неоценимые советы по концептуальным вопросам в ходе разработки алгоритма и плодотворное обсуждение по-

лученных результатов. Авторы также благодарят аспиранта А.Л. Жевлакова за существенный вклад в написание программного кода, реализующего расчетный алгоритм модели.

#### Литература

1. Physical mesomechanics of heterogeneous media and computer-aided design of materials / Ed. by V.E. Panin. – Cambridge: Cambridge Inter-science Publishing, 1998. – 339 p.
2. Панин В.Е., Гриняев Ю.В. Физическая мезомеханика — новая парадигма на стыке физики и механики деформируемого твердого тела // Физ. мезомех. – 2003. – Т. 6. – № 4. – С. 9–36.
3. Панин А.В. Нелинейные волны локализованного пластического течения в наноструктурированных поверхностных слоях твердых тел и тонких пленках // Физ. мезомех. – 2005. – Т. 8. – № 3. – С. 5–17.
4. Панин В.Е., Панин А.В. Эффект поверхностного слоя в деформируемом твердом теле // Физ. мезомех. – 2005. – Т. 8. – № 5. – С. 7–15.
5. Murnaghan F. D. Finite deformation of an elastic solid. – New York: Wiley, 1951. – 140 p.
6. Панин В.Е., Панин Л.Е. Масштабные уровни гомеостаза в деформируемом твердом теле // Физ. мезомех. – 2004. – Т. 7. – № 4. – С. 5–24.
7. Моисеенко Д.Д., Максимов П.В., Соловьев И.А. Стохастический подход к многоуровневому моделированию возмущений на границах раздела в нагруженном твердом теле // Физ. мезомех. – 2004. – Т. 7. – № 4. – С. 19–24.
8. Панин В.Е. Поверхностные слои твердых тел как синергетический активатор пластического течения нагруженного твердого тела // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2005. – № 7. – С. 62–68.
9. Годунов С.К. Элементы механики сплошной среды. – М.: Наука, 1978. – 303 с.
10. Thostenson E.T., Li Ch., Chou T. Nanoscale Devices and Nanocomposites Based on Carbon Nanotubes: Processing, Characterization and Modeling // Proc. Int. Conf. on Composites / Nanoengineering, Hilton-Head, South Carolina, August 8–14, 2004.
11. Hui D., Kireitseeu M., Moiseenko D.D. et al. Mechanical Characterization of Carbon Nanotube Reinforced Composites // Proc. Int. Conf. on Composites / Nanoengineering, Hilton-Head, South Carolina, August 8–14, 2004.