

УДК 532.517+621.791

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ОБРАЗОВАНИЯ ВОЛН ПРИ КОСОМ СОУДАРЕНИИ ПЛАСТИН

С. П. Киселев

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
630090 Новосибирск
E-mail: kiselev@itam.nsc.ru

Представлены результаты численного моделирования методом молекулярной динамики образования волн при косом симметричном соударении металлических пластин. В этом случае при соударении пластин реализуются те же условия нагружения, что и при сварке взрывом. Показано, что развитие волн на границе свариваемых пластин обусловлено автоколебаниями в окрестности точки контакта. На основе численных расчетов предложен механизм раскачки и поддержания автоколебаний.

Ключевые слова: молекулярная динамика, косое соударение пластин, волны на границе, численное моделирование.

Введение. Во многих работах, обзор которых приведен в [1–5], изучались волны, возникающие на контактной границе при сварке взрывом металлических пластин. Предложено большое количество физических моделей появления волн, ряд которых описан в работах [1–10]. Не рассматривая подробно все эти модели, отметим работу [1], где приведены наиболее известные модели волнообразования. На основе проведенных численных расчетов предложен оригинальный механизм волнообразования, который ниже сравнивается с некоторыми из этих моделей.

В данной работе численное моделирование косоугольного соударения пластин проводится методом молекулярной динамики. Этот метод основан на численном решении уравнений Гамильтона для атомов, взаимодействие которых описывается многочастичным потенциалом, полученным методом погруженного атома (embedded atom method (EAM)) [11]. EAM-потенциалы достаточно точно описывают физико-механические и прочностные свойства различных металлов в широком диапазоне давлений и температур [12, 13].

1. Постановка задачи. В настоящее время при моделировании задач механики сплошной среды применяется метод молекулярной динамики, что обусловлено использованием высокопроизводительных кластеров, предназначенных для проведения параллельных вычислений, и реалистичных многочастичных потенциалов, позволяющих моделировать прочностные свойства реальных металлов. Следует отметить, что размеры тел, моделируемых методом молекулярной динамики, на 4–5 порядков меньше размеров пластин, которые используются в эксперименте при сварке взрывом. Однако с использова-

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 11-01-00357) и в рамках Федеральной целевой программы (государственный контракт № 14.740.11.0350).

нием пи-теоремы можно моделировать соударения макротел методом молекулярной динамики при условии совпадения соответствующих безразмерных параметров. В работе [14] показано, что несмотря на существенное различие пространственных масштабов, основные безразмерные параметры, используемые в расчете методом молекулярной динамики и в эксперименте, различаются незначительно.

С помощью метода молекулярной динамики движение атомов описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями Гамильтона [11]

$$\frac{dp_{i\alpha}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i^\alpha}, \quad \frac{dx_i^\alpha}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{i\alpha}}, \quad H = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{\alpha=1}^3 \frac{p_{i\alpha}^2}{2m} + V(x_i^\alpha) \right), \quad (1)$$

где x_i^α , $p_{i\alpha}$, m — координата, импульс и масса атома; H , $V(x_i^\alpha)$ — гамильтониан и потенциал взаимодействия атомов.

В данной работе в качестве потенциала межатомного взаимодействия использовались многочастичные ЕАМ-потенциалы [12, 13]. Система обыкновенных дифференциальных уравнений движения атомов (1) решалась численно по схеме Верлета с помощью пакета LAMMPS [15] на параллельном вычислительном кластере Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН. Шаг интегрирования по времени был равен $\tau = 0,001$ пс. Решением уравнений (1) на каждом временном слое являлись импульсы $p_{i\alpha}$ и координаты x_i^α атомов, по которым находились средние значения компонент тензора напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$, давления P и температуры T в наноячейке:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{1}{\Omega_c} \sum_{i=1}^{N_c} \left(m v'_{i\alpha} v'_{i\beta} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_c} F_{ij}^\alpha x_{ij}^\beta \right), \quad P = -\frac{1}{3} \sigma_{\alpha\alpha},$$

$$T = \frac{2}{3N_a k_B} \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{m v'_{i\alpha} v'_{i\alpha}}{2}, \quad v'_{i\alpha} = v_{i\alpha} - \langle v_{i\alpha} \rangle, \quad (2)$$

$$\langle v_{i\alpha} \rangle = \frac{1}{N_a} \sum_{i=1}^{N_c} v_{i\alpha}, \quad F_i^\alpha = \sum_{j \neq i}^{N_b} F_{ij}^\alpha, \quad x_{ij}^\alpha = x_i^\alpha - x_j^\alpha, \quad F_{ij}^\alpha = -\frac{\partial V}{\partial x_{ij}^\alpha}.$$

Здесь k_B — постоянная Больцмана; V — ЕАМ-потенциал взаимодействия атомов; Ω_c — объем наноячейки, по которой проводится осреднение; N_c — число атомов в наноячейке. При вычислении силы F_i^α , действующей на i -й атом, проводится суммирование по всем соседним атомам N_b , находящимся внутри сферы, радиус которой равен радиусу обрезания r_c . Формулы (2) можно использовать для вычисления давления P_a , приходящегося на один атом. Для этого в формулах (2) нужно положить $N_c = 1$, а объем наноячейки считать равным объему, приходящемуся на один атом: $\Omega_c = \Omega_a$.

В данной работе рассматривается задача о косом соударении алюминиевых пластин (рис. 1). Введем прямоугольную декартову систему координат, в которой ось z направлена вертикально, ось x — горизонтально в плоскости рис. 1, ось y — перпендикулярно этой плоскости. На рис. 1 показаны две пластины из алюминия в начальный момент времени. Толщина пластин равна δ , длина — l , ширина — l_y , угол между верхней и нижней пластинами равен γ . Каждая пластина представляет собой прямоугольный параллелепипед, заполненный атомами алюминия. При $y = \pm l_y/2$ выполняются периодические граничные условия, остальные границы пластин свободны. Атомы алюминия размещались в узлах ГЦК-решетки с периодом $a = 4,05$ Å. Ребро параллелепипеда l ориентировано в направлении [100] атомной ГЦК-решетки, ребро l_y — в направлении [010], ребро δ — в направлении [001].

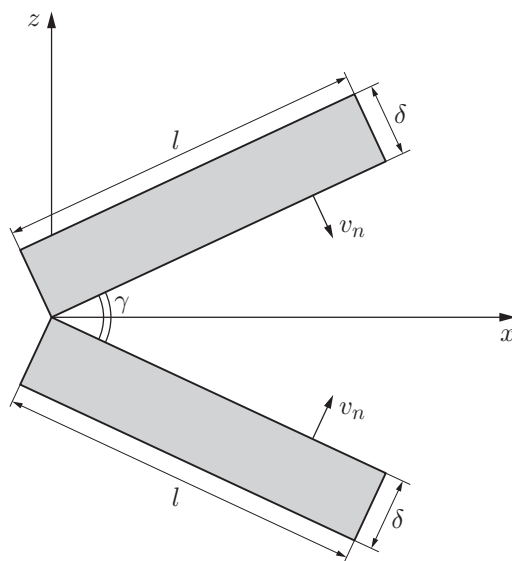


Рис. 1. Схема соударения алюминиевых пластин

В верхней и нижней пластинах было выделено по три реперных линии, которые состоят из одних и тех же атомов, окрашенных различным цветом. Перед соударением пластин реперные линии были ориентированы перпендикулярно их верхней и нижней поверхностям. Смещение реперных линий позволяет оценить деформацию материала пластин. Между второй и третьей реперными линиями задавалась прямоугольная лагранжева ячейка, в которой по формулам (2) вычислялись средние напряжение и температура. Для визуализации течения выделены реперные линии, расположенные вдоль поверхностей соударения пластин. Это позволило изучить характер деформации и пластического течения материала в окрестности точки контакта пластин.

Численные расчеты включали два этапа. На первом этапе проводилось нагревание пластин до температуры $T_0 = 300$ К. На втором этапе каждый атом нижней пластины приобретал скорость v_n , а атомы верхней пластины — скорость $-v_n$, направленную перпендикулярно пластинам (см. рис. 1). После этого осуществлялось соударение пластин.

2. Результаты численных расчетов. При проведении расчетов рассматривались алюминиевые пластины, имевшие следующие размеры: толщина $\delta = 240$ Å, длина $l = 4400$ Å, ширина $l_y = 20$ Å, угол соударения $\gamma = 36,8^\circ$. Во всех расчетах (за исключением расчетов, результаты которых приведены на рис. 2,з,д) скорость соударения по нормали равна $v_n = 1,5$ км/с, при этом скорость точки контакта пластин $U = v_n / \sin(\gamma/2) = 4,7$ км/с. На рис. 2,з,д представлены результаты расчета при больших скорости соударения ($v_n = 1,8$ км/с) и скорости точки контакта ($U = 5,64$ км/с). Во всех расчетах скорость точки контакта была меньше продольной скорости звука $c_l = 6,26$ км/с, поэтому в системе отсчета, связанной с точкой контакта, течение было дозвуковым. Средние напряжения и температура вычислялись в прямоугольной лагранжевой ячейке, которая размещалась в верхней пластине и имела размеры $h'_x = 30$ Å, $h'_z = 60$ Å. Лагранжева ячейка содержала одни и те же атомы, поэтому с течением времени перемещалась и деформировалась вместе с этими атомами. В начальный момент времени центр ячейки находился на расстоянии $x_0 = 3000$ Å от левого края пластины и на расстоянии $z_0 = 60$ Å от нижней поверхности верхней пластины. Реперные линии располагались на равных расстояниях друг от друга $\Delta x_r = 1100$ Å.

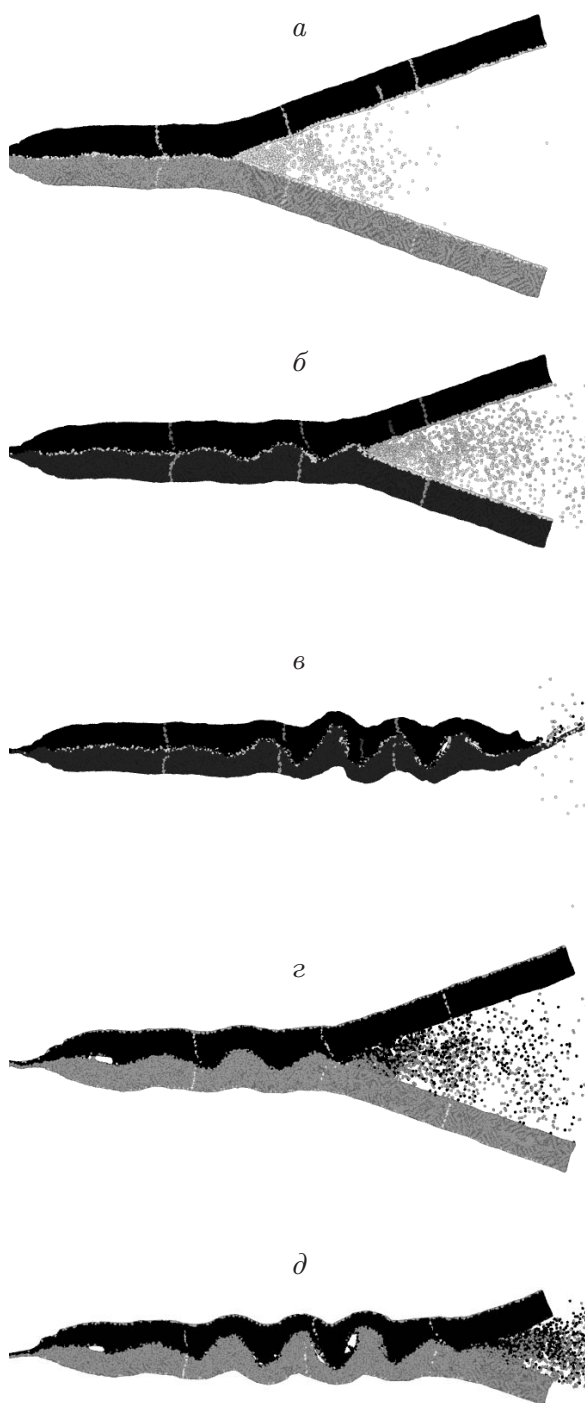


Рис. 2

Рис. 2. Конфигурации пластин в различные моменты времени:
 $a - t = 53$ пс, $v_n = 1,5$ км/с; $б - t = 75$ пс, $v_n = 1,5$ км/с; $в - t = 135$ пс, $v_n = 1,5$ км/с;
 $г - t \approx 40$ пс, $v_n = 1,8$ км/с; $д - t \approx 59,2$ пс, $v_n = 1,8$ км/с



Рис. 3

Рис. 3. Конфигурации пластин, сталкивающихся со скоростью $v_n = 1,5$ км/с, в области высокого давления в различные моменты времени:
 $a - t = 53$ пс; $б - t = 68$ пс; $в - t = 71,5$ пс; $г - t = 75$ пс

На рис. 2,*a*, 3,*a* представлены картины соударения пластин в момент начала образования волн на контактной границе (на рис. 3,*a* показана окрестность точки контакта пластин). Видно, что волны возникают не в точке удара пластин, а на некотором расстоянии от нее. Началу образования волн предшествует возмущение поверхности контакта пластин, которое приводит к повороту этой поверхности на некоторый малый угол. На рис. 2,*б* приведены конфигурации пластин в более поздний момент времени, а на рис. 2,*в* показаны те же пластины после их соударения. Из рис. 2,*б*,*в* следует, что по мере удаления от точки зарождения волн на контактной поверхности пластин их амплитуда постепенно возрастает и выходит на постоянное значение. После соударения волновая картина не меняется (см. рис. 2,*в*), а сварившиеся пластины смещаются вправо. При большей скорости соударения пластин волны возникают непосредственно в точке соударения пластин (см. рис. 2,*г*). При этом амплитуда волн увеличивается (см. рис. 2,*д*), а на контактной границе образуются поры.

На рис. 3,*б-г* приведены атомные конфигурации в области контакта пластин, рассчитанные для различных моментов времени. Видно, что в области контакта пластин развивается струйное течение с образованием кумулятивной струи. На рис. 3,*б*,*в* точка растекания верхней струи находится слева от точки растекания нижней струи, затем точки растекания струй меняются местами (см. рис. 3,*г*). Известно, что точка растекания струи совпадает с точкой приложения силы [16], поэтому смещение точек растекания струй относительно друг друга приводит к появлению дипольного момента пары сил. Знак этого дипольного момента периодически меняется, что вызывает образование волн в области контакта.

На рис. 4,*б-г* приведены распределения давления, вычисленные по первой формуле в системе уравнений (3). Область высокого давления, достигаемого вблизи точки контакта пластин, имеет размеры порядка толщины пластины. Распределение давления несимметрично относительно диагонали угла γ и изменяется со временем, величина касательных напряжений характеризуется вторым инвариантом тензора напряжений S :

$$P = -(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)/3,$$

$$S = \frac{1}{\sqrt{6}} \sqrt{(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_x - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_y)^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2)}, \quad (3)$$

$$S = Y_0 + \eta \dot{\epsilon}, \quad \dot{\epsilon} = \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{(\dot{\epsilon}_x - \dot{\epsilon}_y)^2 + (\dot{\epsilon}_x - \dot{\epsilon}_z)^2 + (\dot{\epsilon}_z - \dot{\epsilon}_y)^2 + \frac{3}{2}(\dot{\epsilon}_{xy}^2 + \dot{\epsilon}_{xz}^2 + \dot{\epsilon}_{yz}^2)}.$$

Здесь Y_0 — предел текучести; η — вязкость; $\dot{\epsilon}$ — второй инвариант тензора скорости деформации; $\dot{\epsilon}_{ij}$ — компоненты тензора скоростей деформации. На рис. 4,*г* показано распределение величины S в пластинах при их соударении. Видно, что касательные напряжения концентрируются вблизи контактной поверхности сталкивающихся пластин. Это обусловлено наличием больших деформаций в окрестности контактной поверхности, которые можно оценить по степени искривления реперных линий на рис. 2. Вследствие зависимости величины S от скорости деформации, определяемой третьей и четвертой формулами в (3), максимальное значение S_{\max} в 5–10 раз превышает предел текучести $Y_0 \approx 0,2$ ГПа.

На рис. 5,*a* приведена зависимость давления P и второго инварианта S в лагранжевой ячейке от времени. Появление пика давления и касательных напряжений в момент времени $t = 80$ пс обусловлено прохождением точки контакта пластин вблизи лагранжевой ячейки (напомним, что точка контакта пластин движется вдоль оси x со скоростью U). Атомы в лагранжевой ячейке, находящейся между второй и третьей реперными линиями, показаны на рис. 2,*a-в* светлым цветом. Видно, что эти атомы не попадают в область больших пластических деформаций сдвига, поэтому максимальное значение второго инварианта S_{\max} на порядок меньше максимального давления P_{\max} (см. также рис. 4,*в*,*г*).

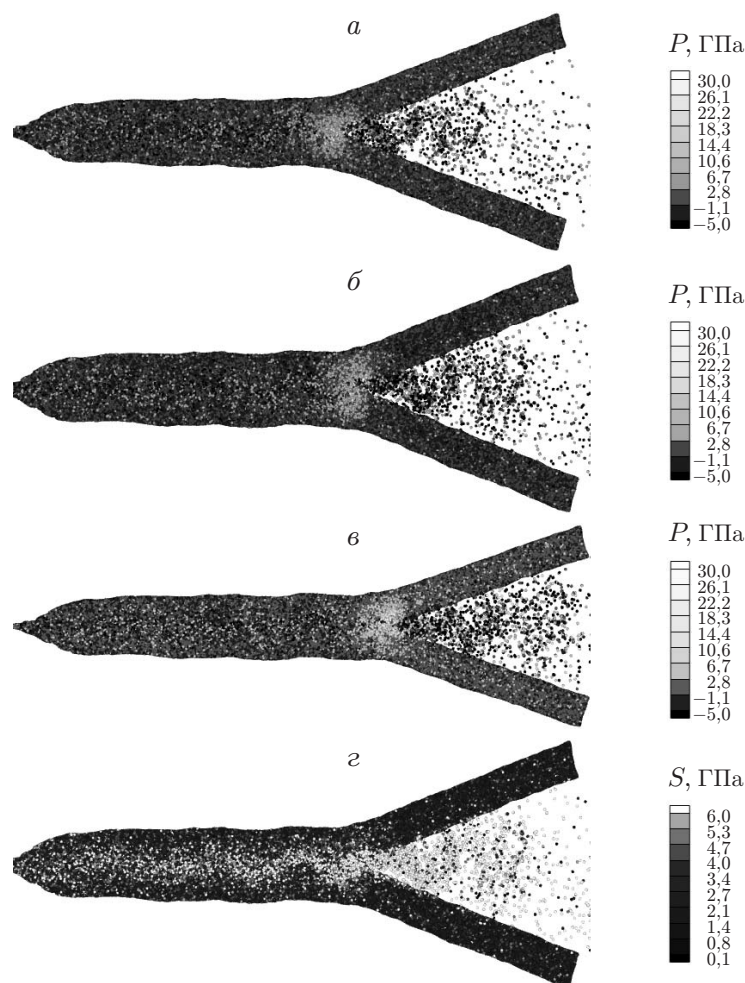


Рис. 4. Распределения давления $P(x, z)$ (*a–в*) и второго инварианта тензора напряжений $S(x, z)$ (*г*) в пластинах в различные моменты времени:
a — $t = 68$ пс; *б*, *г* — $t = 71,5$ пс; *в* — $t = 75$ пс

На рис. 5, *a* видны колебания давления в лагранжевой ячейке, возникающие в начальный момент времени и затухающие с течением времени. Эти колебания возникают в наноразмерных пластинах вследствие влияния свободной поверхности пластин. При задании начальных условий атомы в пластинах размещались в узлах решетки, параметры которой обеспечивали равновесие бесконечного кристалла. Наличие свободных поверхностей в данных пластинах приводит к расширению пластин и возникновению в них растягивающих напряжений. Под действием этих напряжений в пластинах возникают колебания, приводящие к новому равновесному состоянию. В этом состоянии атомы, находящиеся вблизи поверхности пластины, располагаются на больших расстояниях друг от друга по сравнению с атомами в центре пластины. Для изучения данного эффекта проводились численные расчеты, в которых колебания демпфировались искусственной вязкостью, а после их затухания осуществлялось соударение пластин. Однако существенных различий результатов этих расчетов и картин течений, приведенных на рис. 2, 3, не обнаружено. Заметим, что при проведении экспериментов по сварке взрывом пластины ускоряются за счет наличия волны детонации ВВ, распространяющейся по поверхности пластин [1–5]. При этом в пластинах возникают акустические колебания вследствие отражения ударных волн и волн разрежения от границ пластин. Поэтому при численном моделировании использовалась

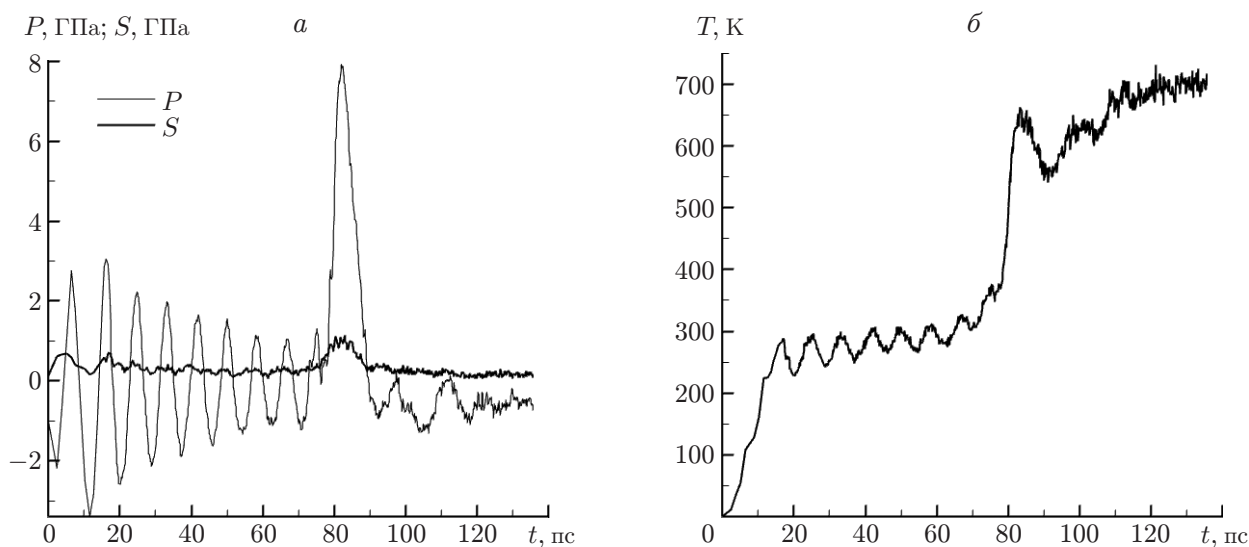


Рис. 5. Зависимости давления P , второго инварианта тензора напряжений S (а) и температуры T (б) в лагранжевой ячейке от времени

схема соударения пластин, согласно которой до момента их столкновения имели место отмеченные выше акустические колебания, моделирующие колебания пластин в экспериментах.

На рис. 5,б показана зависимость температуры от времени $T(t)$ в лагранжевой ячейке. Видно, что в момент прохождения точки контакта пластин вблизи лагранжевой ячейки ($t = 80$ пс) происходит скачок температуры на величину $\Delta T = 400$ К. Этот скачок обусловлен нагревом за счет пластической деформации в ячейке. Дополнительное приращение температуры в более поздние моменты времени происходит за счет притока тепла из более горячей области, расположенной вблизи контактной поверхности. Из рис. 5,б следует, что в основной части пластин максимальная температура не превышает температуры плавления материала. Исключение составляет выделенная область вблизи поверхности соударения пластин (см. рис. 2), где при соударении пластин происходят большие пластические деформации и достигается температура плавления.

3. Механизм возникновения колебаний контактной поверхности пластин.

В [4, 16] приведено решение задачи о взаимодействии плоской струи идеальной несжимаемой жидкости толщиной δ со стенкой, наклоненной под углом α к оси струи. Из законов сохранения массы импульса и момента импульса вычисляются смещение b точки приложения силы относительно оси струи и толщины обратной h и прямой H струй, растекающихся влево и вправо от этой точки:

$$b = \frac{1}{2} \delta \operatorname{ctg} \alpha, \quad h = \frac{1}{2} (1 - \cos \alpha) \delta, \quad H = \frac{1}{2} (1 + \cos \alpha) \delta. \quad (4)$$

Из первого уравнения системы уравнений (4) следует, что изменение угла соударения струи с контактной поверхностью на малый угол $\Delta\alpha$ приводит к смещению точки приложения силы на величину $\Delta b = -\Delta\alpha \delta / \sin^2(\gamma/2)$. В рассматриваемом случае (см. рис. 2,а, 3,а) для верхней струи справедливы неравенства $\Delta\alpha > 0$, $\Delta b < 0$, поэтому точка приложения силы смещается влево на величину Δb . Для нижней струи выполняются обратные неравенства $\Delta\alpha < 0$, $\Delta b > 0$, поэтому точка приложения силы смещается вправо на величину Δb . На рис. 6,а показана картина взаимодействия струй. Штриховыми линиями, которые заканчиваются в точках L и M , показаны линии тока, разделяющие прямую и

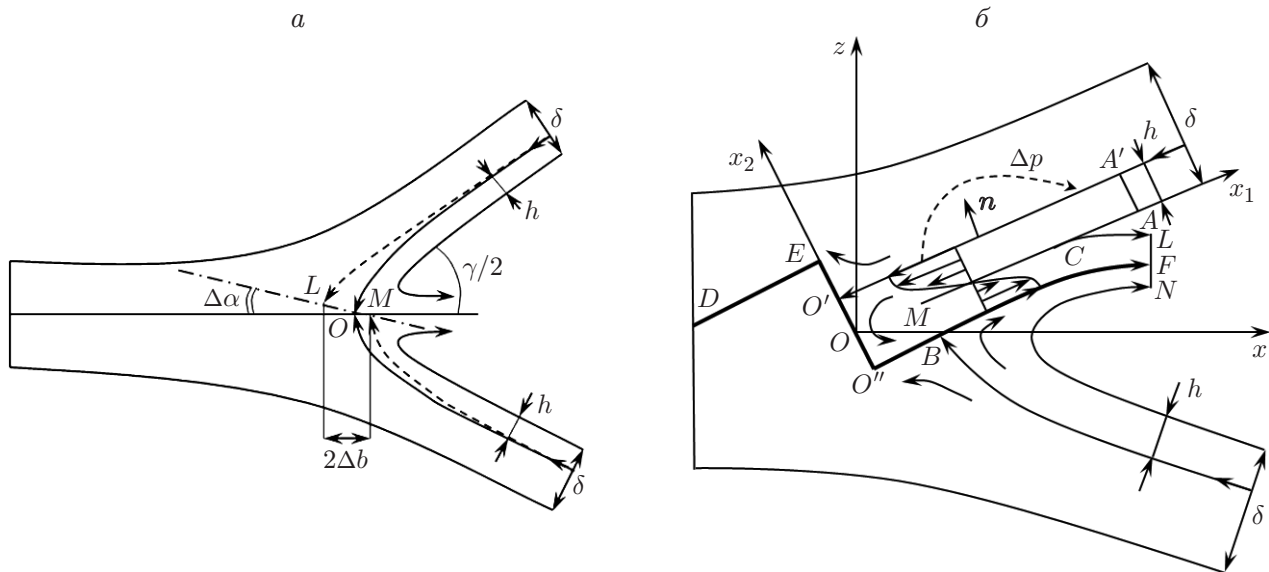


Рис. 6. Схема взаимодействия струй при соударении пластин:

a — в момент возбуждения автоколебаний; *б* — в режиме развитых автоколебаний

обратные струи при повороте контактной поверхности на угол $\Delta\alpha > 0$ (штрихпунктирная линия). Сплошными линиями, сходящимися в точке O , показаны соответствующие линии тока при отсутствии поворота контактной поверхности ($\Delta\alpha = 0$, сплошная прямая линия вдоль биссектрисы угла γ). При повороте контактной поверхности на угол $\Delta\alpha$ точка приложения силы L для верхней струи смещается влево относительно точки O , а точка приложения силы M для нижней струи смещается вправо. В результате возникает пара сил, создающая дипольный момент $D = 2\Delta P \Delta b$, что приводит к деформации контактной поверхности, показанной на рис. 3,б. Воздействие верхней струи приводит к углублению впадины на контактной поверхности, а воздействие нижней — к ее выпучиванию. Из рис. 2,б,в, на которых приведены результаты численного расчета в следующие два момента времени, следует, что амплитуда волны в пластинах постепенно увеличивается, а затем выходит на постоянное значение. При увеличении скорости соударения пластин (см. рис. 2,г,д) волны возникают вблизи точки соударения пластин. Такая картина характерна для автоколебаний, жестко возбуждаемых в области высокого давления в окрестности точки контакта пластин.

В результате деформации пластин возникают упругие напряжения, вызывающие их колебания. На рис. 4,а-в показаны распределения давления в те же моменты времени, для которых на рис. 3,б-г приведены атомные конфигурации. Видно, что распределение давления несимметрично относительно линии соударения пластин и зависит от времени. В течение полупериода колебаний (от $t = 68$ пс (см. рис. 3,б) до $t = 75$ пс (см. рис. 3,г)) максимум давления смещается из нижней пластины (см. рис. 4,а) в верхнюю пластину (рис. 4,в). При этом изменяется знак дипольного момента, создаваемого парой сил. Отсюда следует, что в области высокого давления находится осциллятор, создающий колебания с частотой $\omega = 2\pi U/\lambda$ (λ — длина волны). Давление в окрестности точки контакта (см. рис. 4,а-в) можно аппроксимировать формулой $P \approx P_0(r) + D \cos(\omega t)z/r^2$, которая имеет простую интерпретацию, если представить давление в виде суммы $P = P_0(r) + P'(r, t)$, где $P_0(r)$ — решение задачи о стационарном соударении струй; $P'(r, t)$ — нестационарное возмущение давления. В работе [10] показано, что в линейном приближении возмущения описываются волновым уравнением, решение которого выражается через функции Бессе-

ля, поэтому с точностью до членов первого порядка для возмущений давления получаем формулу $P'(r, t) \approx (a_0 J_0(r) + a_1 J_1(r) \sin \theta) \cos(\omega t)$, где $\sin \theta = z/r$; $r = \sqrt{x^2 + z^2}$. Таким образом, дипольный член в формуле для давления определяется первым членом в разложении решения волнового уравнения по функциям Бесселя.

4. Механизм поддержания автоколебаний. Для объяснения механизма подкачки энергии колебаний перейдем в систему отсчета, движущуюся со скоростью U , и исследуем поведение материала в окрестности точки контакта пластин. Рассмотрим более подробно полученные в расчетах картины течения в окрестности точки контакта пластин в различные моменты времени (см. рис. 3,б-г). Как отмечено выше, для визуализации струй в соударяющихся пластинах выделены приповерхностные слои толщиной 12 \AA (см. рис. 2, 3). Слои показаны более светлыми цветами по сравнению с остальной частью пластины. Видно, что точка растекания верхней струи, проникающей в нижнюю пластину, находится слева от точки растекания нижней струи. Часть струи разворачивается и распространяется в обратную сторону (навстречу натекающей струе), поэтому ниже она называется обратной струей. Под действием нижней обратной струи верхняя обратная струя прижимается к натекающей верхней струе, в результате чего происходит их вязкое взаимодействие (см. рис. 6,б). Взаимодействие струй приводит к торможению натекающей верхней струи и ограничению ее проникания в нижнюю пластину. В результате торможения натекающей струи происходит увеличение давления и касательного напряжения в области ее взаимодействия с обратной струей. Акустические возмущения переносят высокое давление вправо (см. рис. 4, 6,б) и изменяют параметры натекающей струи. Вследствие этого происходит бифуркация, при которой изменяется топология течения. После бифуркации верхняя струя натекает на передний склон бугра, возникшего в результате проникающего действия нижней струи (см. рис. 3,г). Оторвавшиеся части верхней струи сворачиваются в вихрь, наблюдаемый в виде уплотнения на рис. 3,г. Отметим, что вихри на контактной поверхности наблюдались ранее в экспериментах по сварке пластин взрывом [2, 4]. После бифуркации описанный выше процесс взаимодействия струй повторяется с точностью до замены верхней струи на нижнюю. Таким образом, в окрестности точки контакта вследствие неустойчивости при взаимодействии встречных струй развиваются автоколебания [17]. Кинетическая энергия, поступающая в область высокого давления, частично преобразуется в энергию колебаний. Упругие силы определяют амплитуду колебаний, а вязкие силы — период колебаний. Обратная связь колебаний осуществляется за счет акустических волн, показанных на рис. 6,б штриховой линией. Из анализа результатов экспериментов и расчетов следует, что волнообразование на контактной границе пластин наблюдается при дозвуковом режиме соударения ($U < c$). В этом случае акустические волны переносят возмущения из области вязкого взаимодействия струй вверх по потоку, что приводит к существенному изменению картины течения.

Отметим, что при данном механизме не происходит перетекание обратной струи через бугор деформации, как считалось ранее (см. [6, 7]), а наблюдается скачкообразное изменение топологии течения. В работе [10] предполагалось, что в точке контакта пластин происходят автоколебания, приводящие к возникновению волн, однако отсутствие численных расчетов не позволило выяснить механизм возникновения и поддержания автоколебаний.

5. Оценка длины волны на контактной границе. Перейдем в систему отсчета, движущуюся со скоростью точки контакта, в которой компоненты скорости среды определяются по формулам $u'_x = v_x - U$, $u'_y = v_y$. Рассмотрим течение в окрестности точки контакта в момент времени, предшествующий бифуркации (см. рис. 3,б). Картина течения представлена на рис. 6,б (линия $DEO'OO''BF$ — контактная граница между верхней и нижней пластинами). Поместим начало координат (x, z) в точку O на контактной границе и введем вспомогательную систему координат (x_1, x_2) , повернутую против часовой

стрелки на угол $\gamma/2$. В этой системе координат компоненты скорости u_1, u_2 можно получить, умножая справа матрицу поворота на вектор (u'_x, u'_y) . При таком выборе системы координат (x_1, x_2) (на достаточно большом расстоянии от области взаимодействия пластин) ось x_1 лежит в плоскости верхней пластины, а скорость равна $u_1 = -U \cos(\gamma/2)$ (см. рис. 6, б). Как отмечено выше, в области взаимодействия пластин касательные напряжения на порядок превышают предел текучести (см. рис. 4), поэтому в данной области реализуется струйное течение (см. рис. 6, б). В результате взаимодействия верхней струи с нижней пластиной в точке O' верхняя струя распадается на прямую и обратную струи (стрелки на рис. 6, б). Нижняя струя распадается на прямую и обратную струи в точке B . Верхняя и нижняя обратные струи образуют кумулятивную струю, правая граница которой показана на рис. 6, б (линия LFN). Нижняя обратная струя взаимодействует с верхней обратной струей вдоль линии BF и прижимает ее к натекающей верхней струе. Между этими струями (верхней натекающей и верхней обратной) происходит вязкое взаимодействие вдоль линии MC . На рис. 6, б показаны профили скорости в верхней натекающей и верхней обратной струях. Вязкое взаимодействие струй ограничивает проникание верхней натекающей струи в нижнюю пластину. В отсутствие такого взаимодействия верхняя натекающая струя проникала бы в нижнюю пластину до тех пор, пока не была бы израсходована вся ее масса [4]. Рассмотренная картина течения деформируется со временем, однако до момента бифуркации качественно не меняется. После бифуркации точка растекания верхней струи O' оказывается справа от точки растекания нижней струи B и весь процесс повторяется, при этом верхняя струя заменяется на нижнюю. Отсюда следует, что длина возникающей волны $\lambda = 2\Delta l \cos(\gamma/2) \approx 2\Delta l$ определяется длиной торможения натекающей верхней струи на преграду $\Delta l = x_1(A) - x_1(O)$ (см. рис. 6, б). Появление коэффициента 2 в формуле $\lambda \approx 2\Delta l$ обусловлено тем, что в течение одного периода колебаний верхняя и нижняя струи вносят одинаковый вклад в формирование волны. В данном случае длина волны определяется расстоянием Δl , на котором будет израсходован импульс верхней натекающей струи, текущей влево.

Выберем объем V , содержащий часть верхней натекающей струи и ограниченный сечениями AA', OO' , линией тока $A'O'$ и линией AO . Заметим, что вблизи преграды $O'OO''$ происходит разворот натекающей струи, поэтому на рис. 6, б отрезок границы, соединяющий точки M и O , не показан. Пренебрегая нестационарными эффектами, запишем закон сохранения импульса для части верхней натекающей струи, находящейся в объеме V :

$$\int (\rho u_1 u_n - \sigma_{1j} n_j) dS = 0 \quad (5)$$

($\rho, u_i, \sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + S_{ij}$ — плотность, скорость и тензор напряжений; $u_n = u_i n_i$; n_j — компонента вектора нормали \mathbf{n} к границе). В формуле (5) интегрирование выполняется по поверхности, ограничивающей объем V .

Оценим скорость и напряжение на границе объема V , состоящей из отрезков $AA', A'O', OO', MO, MC, AC$. Сечение AA' выберем на границе области взаимодействия струй. Тогда скорость струи в этом сечении порядка $u_n(AA') \approx -U \cos(\gamma/2)$, а давление близко к нулю: $P(AA') \approx 0$. Представляя контактную границу пластин в виде прямоугольного уступа, будем считать, что сечение OO' находится на этой границе. Перед бифуркацией проникание верхней струи в нижнюю пластину прекращается, поэтому на границе OO' скорость струи и давление близки к нулю: $u_n(OO') \approx 0, P(OO') \approx 0$ (см. рис. 4, б). Граница $A'O'$ является линией тока, поэтому на ней выполняется условие $u_n(A'O') = 0$. Как отмечено выше, величина касательного напряжения σ_{12} определяется вторым инвариантом тензора напряжений $\sigma_{12} \approx S$. На рис. 3, б, 4, г видно, что касательное напряжение σ_{12} на отрезке границы MC значительно больше, чем на отрезке $A'O'$ ($\sigma_{12}(MC)/\sigma_{12}(A'O') \approx \delta/h \gg 1$).

Следовательно, вкладом касательного напряжения на отрезке границы $A'O'$ в закон сохранения импульса (5) можно пренебречь: $\sigma_{12}(A'O') \approx 0$. На отрезке границы MO касательное напряжение существенно меньше напряжения на отрезке MC , поэтому можно положить $\sigma_{12}(MO) \approx 0$. Поскольку отрезок границы MO находится в окрестности точки растекания O , для скорости справедлива оценка $u_1(MO) \approx 0$. Отрезок границы MC разделяет прямую и обратную струи, поэтому на нем действует касательное напряжение $\sigma_{12}(MC)$, а нормальная к границе скорость $u_n(MC) = 0$. На отрезке границы AC выполняются условия $\sigma_{12}(AC) = 0$, $u_n(AC) = 0$.

Подставляя полученные оценки в интеграл (5), имеем

$$2\rho U^2 h \cos^2(\gamma/2) - \langle \sigma_{12} \rangle \lambda = 0, \quad h = k\delta \sin^2(\gamma/2), \quad k > 1, \quad (6)$$

где $\lambda = 2\Delta l$; $\langle \sigma_{12} \rangle = \frac{1}{\Delta l} \int \sigma_{12} dx_1$ — среднее касательное напряжение (интегрирование

проводится на отрезке MC); h — толщина верхней натекающей струи AA' . Используя уравнение (6), оценим длину волны в рассматриваемом случае. С использованием третьего соотношения в (4) и распределения $S(x, z)$ (см. рис. 4, *г*) найдем величину среднего касательного напряжения $\langle \sigma_{12} \rangle \approx \langle S \rangle \approx 5$ ГПа. Для принятых в численном расчете скорости $v_n = 1,5$ км/с и угла соударения $\gamma = 36,8^\circ$ получаем скорость точки контакта $U = 4,7$ км/с. Для алюминия ($\rho = 2,7$ кг/м³) находим $\rho U^2 = 60$ ГПа. В численных расчетах получена толщина обратной струи $h = 2\delta \sin^2(\gamma/2) = 12$ Å. Это значение в два раза больше значения, вычисленного с использованием теории идеальной жидкости (второе уравнение в (3)), поэтому коэффициент k во второй формуле (6) нужно положить равным двум. Подставляя эти параметры в первую формулу (6), найдем оценку длины волны $\lambda \approx 24\delta \sin^2(\gamma/2)$. Данное выражение согласуется с эмпирической формулой Кудинова, полученной при обработке экспериментальных результатов [2, 18]:

$$\lambda_K/\delta \approx A \sin^2(\gamma/2), \quad 16 < A < 26. \quad (7)$$

Используя третье уравнение системы (3), оценим среднее касательное напряжение σ_{12} на линии MC . Полагая, что течение в струях является ламинарным, получаем формулу $\langle \sigma_{12} \rangle = Y_0 + \eta \partial u_1 / \partial x_2 \approx Y_0 + \eta U / h$, с учетом которой из (6) следует приближенное выражение для длины волны

$$\frac{\lambda}{\delta} \approx \frac{2 \text{Eu} \text{Re}}{\text{Eu} + \text{Re}} k \sin^2 \frac{\gamma}{2}, \quad \text{Eu} = \frac{\rho U^2}{Y_0}, \quad \text{Re} = \frac{\rho U h}{\eta}, \quad (8)$$

где Eu — число Эйлера; Re — число Рейнольдса. Как показано в [19], струи возникают при $\text{Re} > 2$. Из формулы (8) следует, что при малых числах Рейнольдса длина волны прямо пропорциональна скорости соударения. Этот вывод согласуется с результатами численных расчетов, приведенными на рис. 2. При соударении пластин со скоростью $v_n = 1,5$ км/с длина волны $\lambda = 586$ Å (см. рис. 2, *в*), а при $v'_n = 1,8$ км/с $\lambda' = 704$ Å (см. рис. 2, *д*). Отсюда следует отмеченная выше закономерность $\lambda'/\lambda = v'_n/v_n = 1,2$. Значение длины волны, вычисленное по формуле Кудинова (7), находится в диапазоне $384 \text{ Å} < \lambda_K < 624 \text{ Å}$. В численных расчетах получено отношение амплитуды волны к ее длине, равное 0,3. Это значение близко к полученному в эксперименте [2, 9] значению $A/\lambda \approx 0,25$.

Влияние числа Рейнольдса на характеристики колебаний изучалось в работе [20], в которой механизм волнообразования был аналогичен механизму образования дорожки Кармана при обтекании препятствия вязкой жидкостью. Однако, как отмечено в работе [10], полученное в рамках этой модели критическое число Струхала на порядок отличается от экспериментального значения.

6. Диссипация энергии при соударении пластин. Рассмотрим механизм диссипации кинетической энергии пластин в окрестности точки контакта. Из рис. 3, б-г, 6, б следует, что до момента бифуркации диссипация энергии в верхней и нижней обратных струях происходит различным образом. Практически вся кинетическая энергия верхней струи переходит в тепловую энергию за счет действия вязких напряжений на отрезке границы MC (см. рис. 6, б). Нижняя струя разворачивается в точке B , после чего ее кинетическая энергия переходит в кинетическую энергию кумулятивной струи. После бифуркации верхняя и нижняя струи меняются местами и диссипация происходит в нижней обратной струе.

Величину выделяемой тепловой энергии можно оценить с использованием закона сохранения энергии. Через сечение AA' (см. рис. 6, б) в единицу времени поступает кинетическая энергия $\rho U^3 h/2$, которая в объеме V переходит в тепло Q . Полный поток кинетической энергии, поступающей в область повышенного давления, равен $\rho U^3 \delta$. Следовательно, в слое толщиной h в виде тепла выделяется конечная доля энергии $h/(2\delta) \approx 0,05$ общего потока энергии, поступающей в область высокого давления. Данная оценка согласуется с оценками, полученными в эксперименте [21]. Этой энергии достаточно для расплавления материала в слое толщиной h . После прихода волн разгрузки в слое толщиной h возникают поры (см. рис. 2, в, г).

Заключение. В работе приведены результаты численного моделирования методом молекулярной динамики симметричного косоугольного соударения пластин из алюминия. На основе численных расчетов показано, что образование волн на контактной поверхности обусловлено автоколебаниями в области высокого давления в окрестности точки контакта пластин. Дано объяснение механизма появления автоколебаний и подкачки энергии для их поддержания. Результаты расчетов качественно описывают основные закономерности волнообразования, наблюдаемые в экспериментах.

Автор выражает благодарность С. К. Годунову и В. И. Мали за полезные обсуждения проблемы волнообразования, а также В. П. Киселеву за помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Волнообразование** при косых соударениях / Сост., пер. и ред. И. В. Яковлев, Г. Е. Кузьмин, В. В. Пай. Новосибирск: Ин-т дискретной математики и информатики, 2000.
2. **Дерибас А. А.** Физика упрочнения и сварки взрывом. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1980.
3. **Explosive welding of metals and its application** / Ed. by V. Crossland. Oxford: Clarendon Press, 1982.
4. **Лаврентьев М. А.** Проблемы гидродинамики и их математические модели / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. М.: Наука, 1973.
5. **Баум Ф. А.** Физика взрыва / Ф. А. Баум, Л. П. Орленко, К. П. Станюкович, В. П. Челышев, Б. И. Шехтер. М.: Наука, 1975.
6. **Абрахамсон Г. Р.** Остаточные периодические деформации поверхности под действием перемещающейся струи // Тр. Амер. о-ва инж.-мех. Сер. Е. Прикл. механика. 1961. Т. 28, № 4. С. 45–55.
7. **Bahrani A. S., Black T. I., Crossland B.** The mechanics of wave formation in explosive welding // Proc. Roy. Soc. London. 1967. V. A296, N 1445. P. 123–136.
8. **Robinson J. A.** A fluid model of impact welding // Philos. Mag. 1975. V. 31, N 1. P. 587.
9. **Пай В. В., Лукьянов Я. Л., Кузьмин Г. Е., Яковлев И. В.** Волнообразование при высокоскоростном симметричном соударении металлических пластин // Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42, № 5. С. 132–137.

10. **Годунов С. К., Дерибас А. А., Козин Н. С.** Волнообразование при сварке взрывом // ПМТФ. 1971. № 3. С. 63–72.
11. **Allen M. P.** Computer simulation of liquids / M. P. Allen, D. J. Tildesley. Oxford: Univ. Press, 1987.
12. **Adams J. B., Foiles S. M., Wolfer W. G.** Self-diffusion and impurity diffusion of FCC metals using the 5-frequency model and the embedded atom method // J. Mater. Res. 1989. V. 4. P. 102–112.
13. **Voter A. F., Chen S. P.** Accurate interatomic potentials for Ni, Al, and Ni₃Al // Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1987. V. 82. P. 175.
14. **Киселев С. П., Мали В. И.** Численное и экспериментальное моделирование образования струи при высокоскоростном косом соударении металлических пластин // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48, № 2. С. 100–112.
15. **Plimpton S. J.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1–9. [Electron. resource]. <http://lammmps.sandia.gov>.
16. **Седов Л. И.** Механика сплошных сред. М.: Наука, 1970. Т. 2.
17. **Карлов Н. В.** Колебания, волны, структуры / Н. В. Карлов, Н. А. Кириченко. М.: Физматлит, 2001.
18. **Дерибас А. А., Кудинов В. М., Матвеев Ф. И., Симонов В. А.** О моделировании процесса волнообразования при сварке взрывом // Физика горения и взрыва. 1968. Т. 4, № 1. С. 100–107.
19. **Годунов С. К., Дерибас А. А., Мали В. И.** О влиянии вязкости материала на процесс образования струй при соударениях металлических пластин // Физика горения и взрыва. 1975. Т. 11, № 1. С. 3–18.
20. **Cowan G. R., Bergmann O. R., Holtzman A. H.** Mechanism of bond zone wave formation in explosion — clad metals // Metall. Trans. 1971. V. 2, N 11. P. 3145–3155.
21. **Захаренко И. Д., Соболенко Т. М.** Тепловые эффекты в зоне соединения при сварке взрывом // Физика горения и взрыва. 1971. Т. 7, № 3. С. 433–436.

Поступила в редакцию 30/1 2012 г.
