

Wojciech DĘBSKI 

INSTYTUT GEOFIZYKI PAN, ZAKŁAD GEOFIZYKI TEORETYCZNEJ

**SYMULACJE PĘKANIA MATERIAŁÓW O ZIARNISTEJ  
STRUKTURZE MIKROSKOPOWEJ – PIERWSZE UWAGI****NUMERICAL SIMULATION OF BREAKING MATERIALS  
WITH A GRANULAR MICRO-STRUCTURE – FIRST RESULTS****Wstęp**

W świecie fizyki doskonale znany jest pewien paradoks, tj. im jakiś proces występuje częściej, tym trudniejszy jest do opisanego z punktu widzenia praw fizyki. Świetnym tego przykładem jest zjawisko pęknięcia i fragmentacji ciał stałych. Z jednej strony jest to proces niezwykle pożądanym i praktycznie wykorzystywany; z drugiej strony, niekontrolowany, może prowadzić do przeróżnych katastrof. Tego typu zjawiskami w obszarze geofizyki są trzęsienia ziemi oraz, nabierające coraz większego znaczenia w dobie zmiany klimatu, procesy fragmentacji lodowców. Dotychczasowe próby jakościowego zrozumienia tych naturalnych procesów nie dały w pełni zadowalających wyników (Christensen 2013). Ciągłe nie rozumiemy wielu aspektów fizycznych i w konsekwencji nie możemy ich przewidywać z akceptowalną wiarygodnością (Gibowicz, Kijko 1994). Jednym z elementów niezwykle utrudniającym badanie procesów prowadzących do trzęsień ziemi i występujących w czasie ich trwania jest fakt, że lokalizacja wstrząsów jest nieznana przed wystąpieniem wstrząsu. Co więcej, obszary ognisk trzęsień ziemi są zwykle trudno dostępne – niezwykle rzadko możemy co najwyżej zaobserwować ich ślady na powierzchni ziemi w postaci przesuniętych fragmentów uskoku geologicznych (Aki, Richards 1985). Te same uwagi odnoszą się w dużym stopniu także do pęknięcia lodowców.

Próby badań laboratoryjnych procesów pęknięcia skał pozwalają obejść to ograniczenie, gdyż w warunkach laboratoryjnych można kontrolować warunki zachodzących procesów. Jednakże badania takie są ograniczone rozmiarami badanych obiektów. Przeskalowanie wyników obserwowanych w laboratorium dla próbek skalnych rozmiarów centymetrów do rzeczywistych rozmiarów trzęsień ziemi rzędu setek kilometrów i dramatycznie innych warunków fizycznych (wysokie ciśnienia, temperatury, itp.) jest problematyczne. Pewne nadzieje na postęp w zakresie badania mechanizmów trzęsień ziemi budzi sejsmiczność antropogeniczna (Gibowicz, Kijko 1994). Z jednej strony występuje

ona w dość dobrze kontrolowanych warunkach działalności przemysłowej, a więc umożliwia stosowanie metodyki badań laboratoryjnych. Z drugiej strony procesy antropogeniczne, np. indukowane pracami górniczymi, zachodzą w skali już charakterystycznej dla procesów naturalnych, a więc nie wymagają przeskalowywania. Jednak nawet w tym wypadku możliwość wykonania potrzebnych pomiarów jest istotnie ograniczona (Gibowicz, Kijko 1994).

Nowe możliwości w zakresie badania procesów pękania dają współczesne metody fizyki obliczeniowej (Buehler 2008). Pozwalają one w pełni kontrolować warunki symulacji numerycznych i dokonywać wszelkich potrzebnych „pomiarów” na każdym etapie symulacji, a równocześnie dzięki coraz łatwiejszemu dostępowi do superkomputerów przeprowadzać badania dla odpowiednio dużych obiektów. Należy jednak wspomnieć, że podejście to, pomimo niezwyklej atrakcyjności i elastyczności, ma ograniczenia. Najpoważniejszym jest problem doboru (znalezienia) odpowiedniego modelu numerycznego, jak najdokładniej odzwierciedlającego fizykę badanych procesów (Hidalgo i in. 2002). W tym zakresie metodyka ta jest całkowicie uzależniona od wyników dostarczanych przez badania fizyki teoretycznej (Hansen i in. 2015; Dębski i in. 2021).

W niniejszej pracy omówiono wstępne, wybrane wyniki otrzymane w ramach takiego właśnie podejścia. Punktem wyjścia była próba odpowiedzi na pytanie o warunki pęknięcia materiału z wyraźnie uziarnioną strukturą wewnętrzną, jako przybliżonego modelu materiałów skalnych takich jak np. granit. W tym celu zastosowano Metodę Elementów Dyskretnych (DEM) (Cundall 1971), stworzoną oryginalnie do symulacji zachowania materiałów sypkich, granulatów, itp. Metoda ta w sposób naturalny uwzględnia ziarnistość materiału reprezentując go jako zbiór powiązanych i oddziaływujących wzajemnie cząstek. DEM pozwala w efektywny sposób opisywać ewolucję czasową skomplikowanych i dynamicznych warunków brzegowych, takich jak np. tworzenie się i ewolucja czasowa swobodnej powierzchni. Inaczej mówiąc, umożliwia ona realistyczne symulacje pęknięcia ciał stałych. Pytanie szczegółowe, na którym koncentrujemy się w niniejszej pracy, dotyczy procesów transformacji pracy sił zewnętrznych przy rozciąganiu materiału w energię wewnętrzną materiału, ze szczególnym uwzględnieniem zmian energii kinetycznej cząstek tworzących badany materiał przed ostatecznym pęknięciem „próbki” poddanej rozciąganiu.

## Metoda Elementów Dyskretnych

DEM jest metodą symulacji numerycznych stworzoną oryginalnie do opisu zachowania materiałów sypkich: granulatów, pudrów, piasku, żwiru itp. (Cundall 1971). W metodzie rozważany ośrodek reprezentowany jest jako zbiór niezależnych, doskonale sprężystych cząstek (zwykle kulek) o skończonych wymiarach, oddziaływujących ze sobą na skutek wzajemnego kontaktu powierzchni i podlegających ewentualnie zewnętrznym siłom, jak np. sile ciężkości. Dynamika zachowania tak opisywanego ośrodka wynika bezpośrednio z całkowania równań Newtona, opisujących ruch każdej cząstki tworzącej

ośrodek. Ta oryginalna idea, leżąca u podstaw współczesnych implementacji DEM, została szybko rozszerzona przez wprowadzenie dodatkowych, bardziej skomplikowanych modeli oddziaływań cząstek, a w szczególności przez uwzględnienie sił spójności łączących cząstki w jedną makroskopową całość (Hidalgo i in. 2002; Potyondy, Cundall 2004; Ergenzinger i in. 2011). Te dodatkowe siły tworzą rodzaj wiązań międzycząsteczkowych (ang. bonds) będących analogiem wiązań chemicznych w rzeczywistych materiałach.

Najważniejszy element techniki DEM, czyli dyskretna reprezentacja badanego ośrodka za pomocą skończonej liczby oddziałujących cząstek, ma wiele zalet. W pierwszej kolejności należy zauważyć, że odtwarza ona numerycznie podstawową cechę budowy materii, a mianowicie dyskretną strukturę atomową materii (Buehler 2008), choć w rzeczywistych aplikacjach DEM nie jest używana w skalach typowo atomowych. Następnie taka reprezentacja ośrodka powoduje, że w metodzie tej omijamy wszystkie dodatkowe więzy pojawiające się w metodach klasycznej mechaniki ośrodków ciągłych, takich jak specyficzne równania zachowania, ciągłości itp. W technice DEM pojawiają się one (np. zachowanie pędu, momentu pędu, itp.) jako naturalna konsekwencja dynamiki newtonowskiej na poziomie cząsteczkowym (molekularnym). W rzeczywistości każda technika DEM *implicite* zakłada jedynie zachowanie masy, przyjmując że w trakcie symulacji liczba cząstek pozostaje niezmienna (Cundall 1971). Ostatecznie, dopuszczając możliwość pęknięcia (rzadziej tworzenia nowych) wiązań międzycząsteczkowych technika DEM jest predysponowana do analizy zagadnień ze skomplikowanymi i zmiennymi w czasie warunkami brzegowymi (Dębski i in. 2021). Takim właśnie procesem jest pęknięcie ciał stałych, które z matematycznego punktu widzenia jest właśnie zagadnieniem tworzenia i ewolucji w czasie nowych swobodnych powierzchni.

Wymienione powyżej cechy pokazują, że DEM to bardzo uniwersalna technika numeryczna pozwalająca analizować różnorodne zagadnienia geofizyczne – zarówno statyczne (np. w geotechnice stabilność skarp), jak i dynamiczne (pęknięcie skał). Co ważne, metoda dostarcza opisu badanych procesów na każdym etapie ich trwania. W analizowanym w niniejszej pracy zagadnieniu pozwoliła ona na symulację procesów fizycznych zachodzących przy rozciąganiu próbki na etapie wstępnym jeszcze przed pojawieniem się mikropęknięć – głównie generację i rozchodzenie się fal akustycznych w ośrodku, podobnie jak techniki obliczeniowe mechaniki ośrodków ciągłych. W następnym etapie udało się opisać nukleację i rozwój układów mikropęknięć, ich łączenie się i ostatecznie dynamiczne pęknięcie, podobnie do technik mechaniki pęknięcia. Ostatecznie DEM umożliwiła także opis końcowej ewolucji układu (ang. post-failure stage) po całkowitym rozpadzie próbki na dwa niezależne fragmenty.

Istnieje wiele różnych implementacji techniki DEM w postaci gotowych do użytku pakietów oprogramowania. Prezentowana w tej pracy analiza wykonana została przy użyciu pakietu Esys-Particle stworzonego na Uniwersytecie Queensland w Australii (Abe i in. 2014). Wybór ten podyktowany był wieloma względami omówionymi w pracy Dębski i in. (2021). Dokładny opis użytego oprogramowania można znaleźć w pracy Abe i in. (2014), tutaj przedstawiono jego podstawowe cechy ważne z punktu widzenia niniejszego opracowania.

Pakiet Esys-Particle umożliwia użycie wielu różnych modeli oddziaływań cząstek tworzących badany model, jak również różnych metod symulacji zewnętrznych obciążeń. W pracy użyto podstawowego modelu ze sprężysto-kruchymi oddziaływaniami (ang. elastic-brittle-interaction). Jego podstawową cechą jest założenie, że siły oddziaływań międzycząsteczkowych są centralne (a więc nie ma międzycząsteczkowego ścinania, tarcia, momentu obrotowego itd.) i mają charakter idealnie sprężystych więzów między sąsiednimi cząstkami. Zmiana odległości pomiędzy oddziaływującymi cząstkami o  $d$  wywołuje powstanie odpychającej/przyciągającej siły opisywanej prawem Hooke'a (Landau, Lifszyc 1993):

$$F = -k d \quad (1)$$

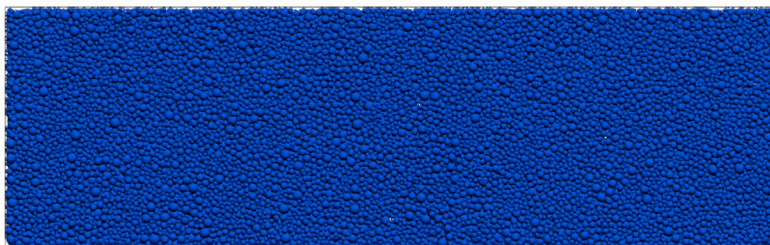
gdzie  $k$  jest stałą sprężystości będącą parametrem modelu.

Jednakże, jeżeli cząstki rozsuną się na odległość większą niż zadana krytyczna odległość  $b_{cr}$ , wiązanie pęka i znika. Jeśli wszystkie wiązania przypisane do danej cząstki pękną, cząstka staje się swobodna i jej dalsze oddziaływanie z innymi cząstkami ośrodka wynika jedynie z możliwości bezpośredniego zetknięcia się cząstek i wzajemnego „odbijania” zgodne z zasadami mechaniki klasycznej (Cundall 1971).

Technika DEM symuluje ewolucję czasową układu, wykonując *explicite* całkowanie równań ruchu dla wszystkich cząstek, uwzględniając wszystkie zadane zewnętrzne i międzycząsteczkowe siły. W każdej chwili czasu wyznaczane są położenia i prędkości cząstek oraz działające siły. Na tej podstawie wyznacza się nowe położenia, do których przesuwane są odpowiednio cząstki. Następnie czas zwiększany jest o zadaną wartość i obliczenia są powtarzane. W pakiecie Esys-Particle powyższy proces całkowania czasowego wykonywany jest w oparciu na algorytmie Verleta (Abe i in. 2014), który zapewnia automatyczne zachowanie całkowitej energii układu.

## Eksperyment numeryczny

W celu przeanalizowania postawionego zadania przeprowadzono eksperyment numeryczny polegający na symulacji przebiegu rozciągania cienkiej próbki materiału o ziarnistej mikrostrukturze. Przygotowana próbka pokazana jest na rysunku 1. Zbudowana została ona z kulek o promieniach wygenerowanych losowo z przedziału 0.2-0.6 mm i ma kształt prostopadłościanu o wymiarach 80 mm – długość (pozioma), 25 mm – wysokość i 5 mm – głębokość. W efekcie takiego wyboru badana próbka zawierała prawie 25 tys. cząstek. Sąsiadujące ze sobą cząstki połączone zostały więzami sił spójności, przy czym parametr  $k$  opisujący siły wiązania (1) przyjęty był taki sam (tj.  $k = 10$  N/mm) dla wszystkich wiązań. Liczba wszystkich wiązań wyniosła nieco ponad 125 tys., a więc średnio każda cząstka związana była początkowo z pięcioma sąsiadującymi kulkami. Gdy w czasie ewolucji oddziałujące cząstki odsuwały się od siebie na odległość większą niż  $d_{max} = 0,05$  mm, łączące je wiązanie znikało i cząstki przestawały oddziaływać. W ten



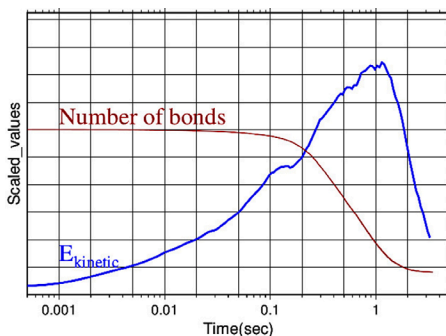
Rys. 1. Numeryczna „próbka” materiału używana w opisywanym eksperymencie numerycznym zbudowana jest z prawie 25 tys. sferycznych cząstek o promieniach losowo wybranych z zakresu 0.3-0.6 mm i połączonych w 125 tys. wiązań. Wymiary próbki wynoszą: 80 mm – długość, 25 mm – wysokość i 5 mm – grubość.

Fig. 1. Numerical sample used in the performed numerical simulation is built of almost 25,000 spherical particles with radii randomly distributed in a range 0.3-0.6 mm. And joint by almost 125,000 bonds. The sample size is 80 mm (length), 25 mm (height) and 5 mm (width).

sposób symulowano powstawanie mikropęknięć w badanej próbce. Należy zaznaczyć, że użyty algorytm generacji próbki był na tyle efektywny, że z punktu widzenia makroskopowego badana próbka mogła zostać uznana za strukturę makroskopowo jednorodną (rys. 1). Przyjęcie praktycznie płaskiej próbki (niewielka grubość w stosunku do pozostałych wymiarów próbki) podyktowane było koniecznością ograniczenia się do około 100 tys. cząstek z technicznych względów obliczeniowych, przy jednoczesnym zachowaniu pełnej trójwymiarowości dynamiki badanych procesów. Równocześnie starano się zachować stosunkowy duży stosunek długości próbki do wysokości, by móc odnieść wyniki do przewidywań teoretycznych dla próbek nieskończenie długich (Landau, Lifszyc 1993). Dolna część próbki pozostawała w spoczynku przez cały okres symulacji, górna (w przybliżeniu dwie warstwy cząstek) „przyklejona” została do ścianki poruszającej się ze stałą prędkością  $v = 0,3$  mm/s do góry. Aby uniknąć problemów numerycznych, prędkość ta osiągnięta była w ciągu pierwszych 100 kroków czasowych, kiedy prędkość górnej ciągnącej ścianki zmieniała się liniowo od zera do 0,3 mm/s. Krok czasowy  $dt = 10^{-8}$  s zapewniał stabilność numeryczną obliczeń. Symulacja prowadzona była aż do całkowitego pęknięcia próbki, co nastąpiło po około 3,5 s. Jak łatwo oszacować, wykonanych zostało nieco ponad 350 milionów kroków czasowych, co przy wykorzystaniu pięciu rdzeni obliczeniowych komputera zajęło niecałe dwa miesiące.

W trakcie symulacji rejestrowane były w ustalonych odstępach czasu (co 200 tys. kroków czasowych) położenia i prędkości cząstek, siły ich oddziaływań oraz liczba istniejących wiązań. Z punktu widzenia niniejszej pracy najważniejsze były bezwzględne wartości prędkości cząstek pozwalające ocenić całkowitą energię kinetyczną oraz jej rozkład przestrzenny.

Przebieg symulacji ilustruje rysunek 2, na którym przedstawiono ewolucję czasową liczby wiązań oraz całkowitej energii kinetycznej wszystkich cząstek tworzących próbkę. Warto w tym miejscu nadmienić, że czasowe zmiany liczby wiązań są bezpośrednim wskaźnikiem dynamiki pęknięcia materiału. Niestety w warunkach naturalnych (trzęsienia



Rys. 2. Przebieg zmian energii kinetycznej zgromadzonej w próbce (niebieska linia) oraz liczba wiązań pomiędzy cząstkami (linia brązowa) wraz z czasem trwania symulacji.

Fig. 2. Temporal evolution of total kinetic energy of all particles (blue line) and number of inter-particle bonds during simulation.

ziemi) lub laboratoryjnych parametr ten jest niemierzalny; jego przybliżeniem może być, szeroko wykorzystywana w seismologii i fizyce pęknięć, rejestracja aktywności akustycznej (Kun i in. 2013) lub wstrząsów następczych/poprzedzających (Aki, Richards 1985).

Widoczna na rysunku 2 ewolucja energii kinetycznej i liczby wiązań wykazuje istnienie doskonale znanych trzech faz przebiegu procesu pęknięcia. W początkowym okresie rozciągania (dla  $t < 0,02$  s) materiał zachowuje się w sposób całkowicie sprężysty. Liczba wiązań pozostaje niezmienna, a energia kinetyczna wzrasta jednostajnie. W tej fazie wzrost energii kinetycznej jest związany głównie z powstaniem fal akustycznych w próbce. Etap ten kończy się w momencie pierwszych pęknięć wiązań, czyli następuje około  $t = 0,02$  s i rozpoczyna się okres deformacji nieodwracalnej – plastycznej. Zgodnie z klasycznym modelem pęknięcia materiałów (Anderson 1991) faza ta kończy się w momencie całkowitego pęknięcia materiału, co w naszym wypadku następuje w przybliżeniu w chwili  $t = 3,5$  s. Wtedy też rozpoczyna się faza trzecia (ang. post failure phase), w której mamy do czynienia z ewolucją osobnych fragmentów próbki. W niniejszej analizie tej fazy nie badano. Przedstawiony na rysunku 2 przebieg zmian energii kinetycznej wykazuje jednoznacznie, że druga, plastyczna faza procesu rozciągania jest znacznie bardziej skomplikowana niż przewidują proste klasyczne modele. W szczególności wyraźnie można wyróżnić etap pierwszy (I), kiedy energia kinetyczna próbki prawie monotonicznie rośnie oraz etap drugi (II) – jej gwałtownego spadku. Warto zauważyć, że początek II etapu, zaznaczony przez maksimum  $E_{kr}$ , pojawia się w momencie, gdy znacząca liczba wiązań już pękła, a więc próbka uległa zasadniczemu zniszczeniu.

W odróżnieniu od fazy rozciągania elastycznego, etap plastyczny wykazuje znaczące zmiany w monotoniczności wzrostu energii kinetycznej. Widoczne jest nawet lokalne jej zmniejszanie (dla  $0,1$  s  $< t < 0,2$  s). Jednakże w tym etapie obserwujemy znaczące zwiększanie się fluktuacji zmian energii wraz ze zbliżaniem się do maksimum ( $t > 0,3$  s), co przywodzi na myśl znane z fizyki statystycznej zachowanie się ośrodka podlegającego przejściu fazowemu w pobliżu punktu krytycznego. Rysunek 2 pokazuje, że dynamika procesu pęknięcia na drugim etapie II fazy plastycznej jest w analizowanym przypadku



dużo prostsza. Energia kinetyczna maleje gwałtownie, ale monotonicznie, aż do momentu całkowitego pęknięcia próbki.

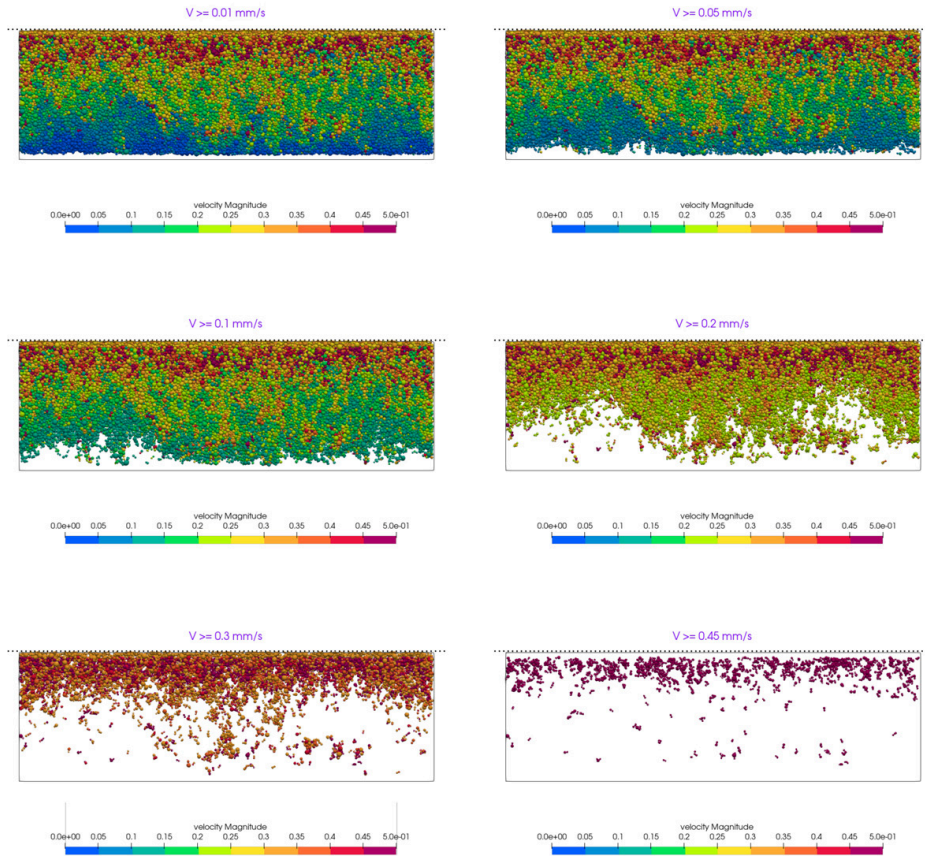
W dalszej części analizy badano rozkład przestrzenny energii kinetycznej na różnych etapach ewolucji próbki. W tym celu, w analogii do doskonale znanego pojęcia frontu falowego, wprowadzono pojęcie frontu prędkości. Pod pojęciem tym rozumiana jest granica dzieląca próbkę na obszar „wolnych” cząstek, których prędkość nie przekracza zadanej wartości  $V_d$  oraz część „szybkich” cząstek o większych niż  $V_d$  prędkościach. Oczywiście wybór  $V_d$  jest arbitralny, dlatego nie mając żadnych wskazówek, jak wyboru tego dokonać, rozważano kilka wariantów przyjmując  $V_d = 0,01, 0,05, 0,1, 0,2, 0,3$  i  $0,45$  mm/s. Na uwagę zasługuje w szczególności wybór  $V_d = 0,3$  mm/s, który wskazuje, ile i które cząstki poruszają się szybciej niż górna, przesuająca się ścianka próbki. Otrzymane wyniki przedstawiono na rysunkach 3-7, a na rysunku 8 dodatkowo zilustrowano czasową ewolucję frontu prędkości dla  $V_d = 0,3$  mm/s.

### Przestrzenny rozkład energii kinetycznej

Przeprowadzona analiza pęknięcia cienkiej próbki materiału, o wewnętrznej statystycznie jednorodnej, lecz ziarnistej strukturze poddanej rozciąganiu, pokazała istnienie kilku interesujących efektów.

Pierwszym z nich jest fakt, że dyskretność próbki na mikroskopowym poziomie (budowa próbki z kulek o losowych wartościach promieni) prowadzi do efektów makroskopowych, tzn. efektów o wymiarach charakterystycznych dla całej próbki. W przeprowadzonej analizie najlepiej uwidoczniono się to w zmienności charakteru i przebiegu frontu prędkości. W przypadku materiału jednorodnego granica ta jest linią prostą prostopadłą do kierunku rozciągania, a jedynie jej położenie (wysokość od podstawy próbki) ulega zmianie wraz z postępującym rozciąganiem (Landau, Lifszyc 1993). W obserwowanych symulacjach taki charakter frontu prędkości był widoczny tylko dla bardzo małych wartości prędkości podziału  $V_d$ , jak wskazują to rysunki 2-5. Ciekawe jest to, że charakterystyczna wartość  $V_d$ , przy której zaczyna się pojawiać odstępstwo od przewidywań dla modelu jednorodnego, jest większa na wczesnych etapach ewolucji i zmniejsza się wraz z upływem czasu symulacji. Zgodność ta odtwarza się ponownie w końcowej fazie pęknięcia, gdy następuje odszczepienie górnej warstwy próbki („przyklejonej” do górnej, poruszającej się w górę ścianki) od pozostałej części próbki. Rysunek 6 pokazuje, że odtworzenie to jest lepsze dla większych wartości  $V_d$ . Jest to oczywiście związane z utworzeniem nowej, poziomej górnej powierzchni próbki oraz wyhamowaniem ruchu cząstek – ich energia kinetyczna została zużyta na rozerwanie więzów pomiędzy cząstkami.

Przy większych wartościach  $V_d$ , zwłaszcza na pośrednich etapach ewolucji przed rozwojem szczeliny odszczepiającej górnej warstwy próbki, przebieg frontu prędkości jest zdecydowanie bardziej skomplikowany. Wyraźnie widoczna jest zmienność jego położenia wzdłuż długości próbki (np. rysunek 3, panel  $V_d = 0,2$  mm/s) oraz coraz bardziej skomplikowany kształt i wzrastające odchylenia jego przebiegu od wartości średniej. Co więcej,



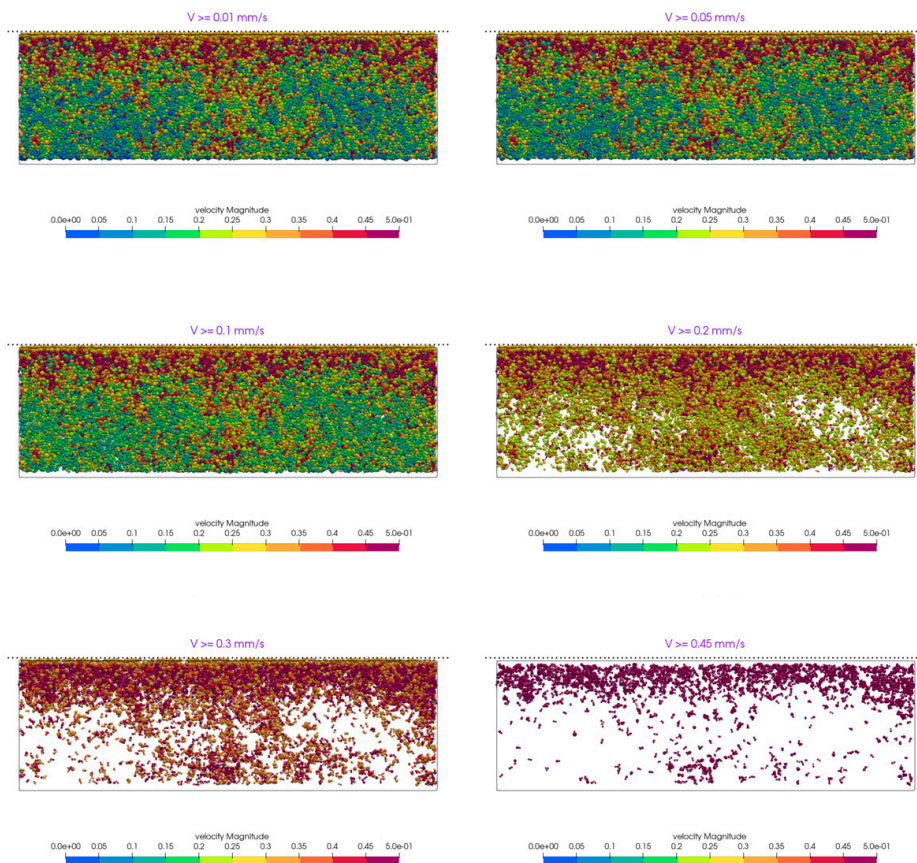
Rys. 3. Rozkład prędkości cząstek tworzących próbkę w chwili  $t = 0,1$  s od momentu rozpoczęcia rozciągania próbki. Kolorem zaznaczona jest wartość prędkości cząstek.

Kolejne rysunki pokazują tylko cząstki, których prędkość jest większa od zadanej wartości progowej  $V_d$  wskazanej w każdym panelu.

Fig. 3. Spatial distribution of particles velocity at the time  $t = 0.1$  s after beginning simulation. Color codes the magnitude of velocity. In subsequent panels only particles which velocity are larger than increased boundary value  $V_d$  are shown.

wyraźnie zmienia się charakter tego frontu i przestaje być on ciągłą granicą między dwiema (górną i dolną) częściami próbki, a zaczyna mieć charakter rozproszonej chmury punktów, jak to pokazują rysunki 3-5 dla paneli  $V_d = 0,3$  mm/s. Należy sądzić, że wpływ na wielkość rozmycia tych chmur punktów frontu prędkości ma skończona liczba cząstek, z których zbudowana jest próbka. Występowanie takiego rozmycia (dyspersji) jest naturalną konsekwencją dyskretnej struktury wewnętrznej próbki i wynikającej z tego stochastyczności analizowanego procesu. Jednakże jej ewolucja w czasie, którą pokazuje rysunek 8, wydaje się być już efektem fizycznym. Ewolucja ta, w pierwszej części (wzrost rozproszenia





Rys. 4. Rozkład prędkości cząstek tworzących próbkę w chwili  $t = 0,2$  s od momentu rozpoczęcia rozciągania próbki. Kolorem zaznaczona jest wartość prędkości cząstek.

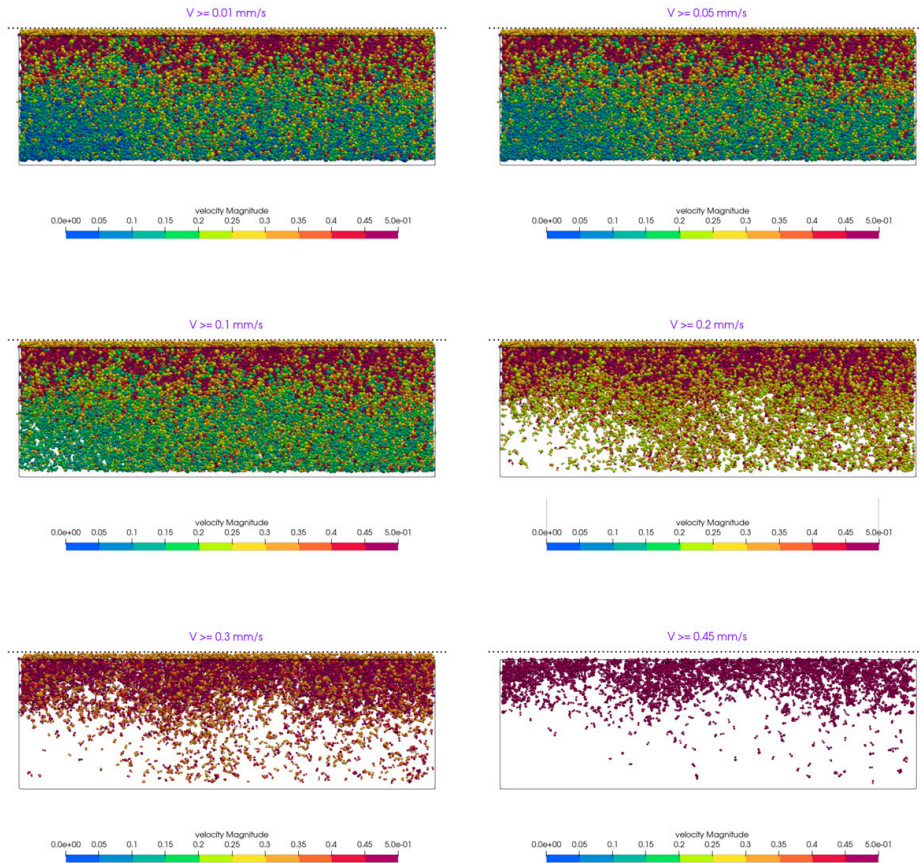
Kolejne rysunki pokazują tylko cząstki których prędkość jest większa od zadanej wartości progowej  $V_i$  wskazanej w każdym panelu.

Fig. 4. Spatial distribution of particles velocity at the time  $t = 0.2$  s after beginning simulation.

Color codes the magnitude of velocity. In subsequent panels only particles which velocity are larger than increased boundary value  $V_i$  are shown.

punktów frontu, zwłaszcza w dolnej części próbki) przypomina wzrost dyspersji wielkości fizycznych w zjawiskach przejść fazowych, gdy układ zbliża się do punktu krytycznego. To co różni zaobserwowaną ewolucję od klasycznych przejść fazowych, to ewidentne stopniowe zanikanie dyspersji frontu prędkości od momentu powstania szczeliny w górnej części próbki. W tej części symulacji następuje wyraźne odprężenie próbki i zmniejszanie się całkowitej energii kinetycznej zakumulowanej wewnątrz próbki, jak wskazuje to rysunek 7.

Innym efektem doskonale widocznym w przeprowadzonej symulacji jest koncentracja dużej energii kinetycznej w górnej części próbki, a więc w obszarze, w którym dochodzi

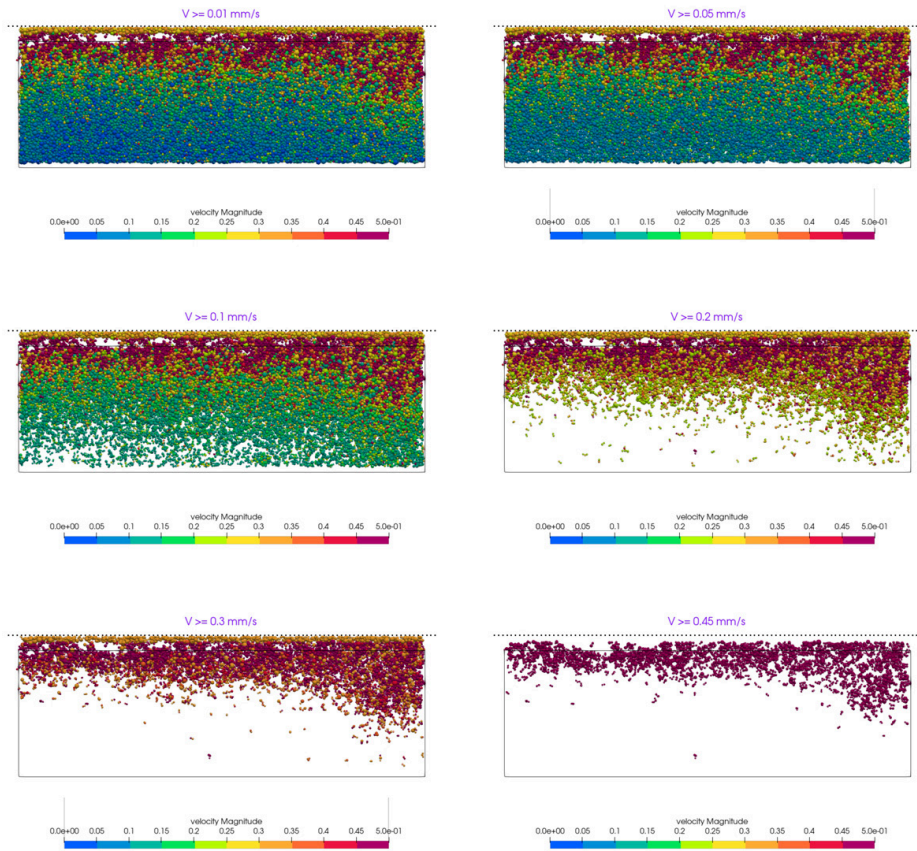


Rys. 5. Rozkład prędkości cząstek tworzących próbkę w chwili  $t = 0,5$  s od momentu rozpoczęcia rozciągania próbki. Kolorem zaznaczona jest wartość prędkości cząstek.

Kolejne rysunki pokazują tylko cząstki których prędkość jest większa od zadanej wartości progowej  $V_d$  wskazanej w każdym panelu.

Fig. 5. Spatial distribution of particles velocity at the time  $t = 0.5$  s after beginning simulation. Color codes the magnitude of velocity. In subsequent panels only particles which velocity are larger than increased boundary value  $V_d$  are shown.

do ostatecznego pęknięcia próbki. Proces ten jest niewątpliwie efektem dynamicznym wywołanym procesami tworzenia mikropeknięć w górnej części próbki i wykazuje istnienie dwóch odrębnych faz, jak wskazuje rysunek 7. W początkowej fazie symulacji ( $t \leq 0,05$  s) wyraźnie widoczne jest powiększanie się obszaru, w którym cząstki budujące próbkę osiągnęły duże wartości prędkości. Strefa ta w sposób oczywisty rozwija się począwszy od górnej ścianki próbki, która poruszając się ze stałą prędkością przekazuje energię kolejnym niżej położonym warstwom. W tej fazie rozciągania następuje znaczący wzrost całkowitej energii kinetycznej zgromadzonej w próbce, choć maksymalne war-



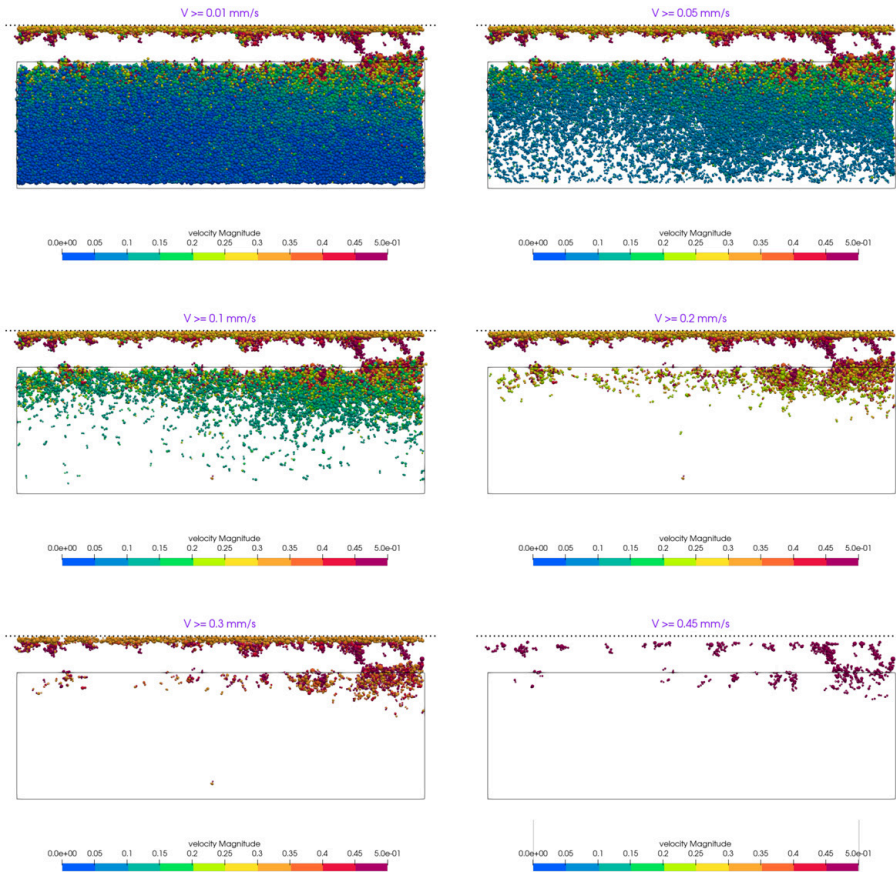
Rys. 6. Rozkład prędkości cząstek tworzących próbkę w chwili  $t = 1$  s od momentu rozpoczęcia rozciągania próbki. Kolorem zaznaczona jest wartość prędkości cząstek.

Kolejne rysunki pokazują tylko cząstki których prędkość jest większa od zadanej wartości progowej  $V_i$  wskazanej w każdym panelu.

Fig. 6. Spatial distribution of particles velocity at the time  $t = 1$  s after beginning simulation.

Color codes the magnitude of velocity. In subsequent panels only particles which velocity are larger than increased boundary value  $V_i$  are shown.

tości prędkości nie zmieniają się znacząco. Jednakże rozpoczęcie procesu pęknięcia wiązań pomiędzy cząstkami, prowadzącego do powstania mikroszczelin i ostatecznie do pęknięcia próbki, zasadniczo zmienia ten obraz. Dla czasów symulacji  $0,05 \text{ s} < t < 0,1 \text{ s}$  następuje przejście do drugiej fazy, w której obszar dużych prędkości cząstek systematycznie zmniejsza się i lokalizuje w obszarze pęknięcia wiązań. W tej fazie procesu następuje też lokalny wzrost maksymalnych wartości prędkości cząstek, choć całkowita energia kinetyczna zgromadzona w próbce zmniejsza się szybko, jak to pokazuje rysunek 2.



Rys. 7. Rozkład prędkości cząstek tworzących próbkę w chwili  $t = 3,5$  s od momentu rozpoczęcia rozciągania próbki. Kolorem zaznaczona jest wartość prędkości cząstek.

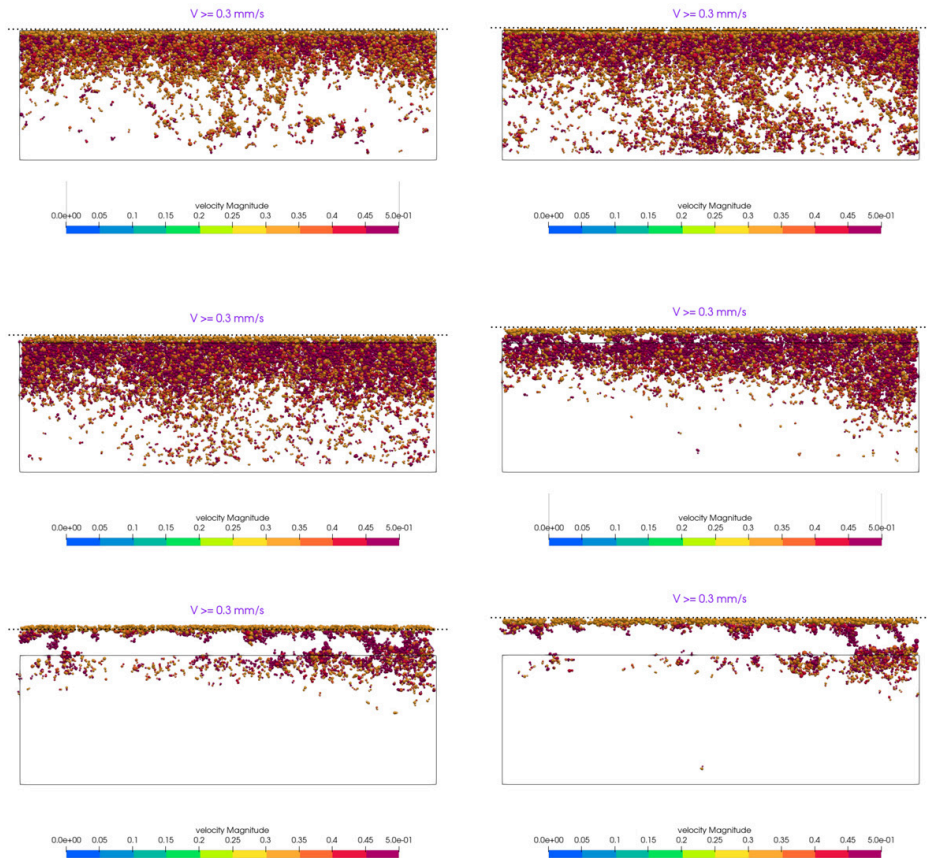
Kolejne rysunki pokazują tylko cząstki których prędkość jest większa od zadanej wartości progowej  $V_d$  wskazanej w każdym panelu.

Fig. 7. Spatial distribution of particles velocity at the final time  $t = 3,5$  s of the simulation when the sample has splitted into two separate parts. Color codes the magnitude of velocity. In subsequent panels only particles which velocity are larger than increased boundary value  $V_d$  are shown.

## Podsumowanie i wnioski

W niniejszej pracy analizowano proces pęknięcia materiału makroskopowo jednorodnego, bez żadnych makroskopowych defektów, ale o dyskretnej, ziarnistej strukturze mikroskopowej, poddanego rozciąganiu. Rozciąganie następowało poprzez przesuwanie górnej ścianki próbki ze stałą prędkością do góry, przy równoczesnym utrzymywaniu ścianki dolnej w stałej pozycji. W takim modzie tensyjnym (mode I pęknięcia, w ogólnie





Rys. 8. Rozkład prędkości cząstek (frontu prędkości) dla prędkości progowej  $V_d = 0,3 \text{ mm/s}$  w kolejnych momentach symulacji (od lewej do prawej):  $t = 0,1 \text{ s}$  i  $t = 0,2 \text{ s}$  (górny rząd),  $t = 0,5 \text{ s}$  i  $t = 1 \text{ s}$  (środkowy rząd) oraz  $t = 2 \text{ s}$  i  $t = 3,5 \text{ s}$  (dolny rząd).

Fig. 8. Temporal evolution of spatial distribution of particles which velocity are larger than the boundary value  $V_d = 0.3 \text{ mm/s}$ . Subsequent panels show the distribution at  $t = 0.1 \text{ s}$  and  $0.2 \text{ s}$  (upper raw),  $t = 0.5 \text{ s}$  and  $1 \text{ s}$  (middle raw) and, finally  $t = 2 \text{ s}$  and  $3.5 \text{ s}$  (lower raw).

przyjętej klasyfikacji) próbka uległa ostatecznie pęknięciu na skutek odszczepienia jej górnych warstw. Symulację zakończono w momencie ostatecznego podziału próbki na dwa oddzielne fragmenty. Użyta metoda DEM pozwoliła szczegółowo przeanalizować procesy poprzedzające całkowite pęknięcie próbki, w tym wpływ dynamicznego tworzenia się mikroszczelin na stan próbki oraz ewolucję energii kinetycznej zgromadzonej w próbce.

Zaobserwowano w szczególności proces lokalizacji obszarów o dużej koncentracji energii kinetycznej w rejonach, w których następował rozwój pęknięcia. Pozostaje do wyjaśnienia kwestia, jak obecność takich obszarów można interpretować z makroskopowego



punktu widzenia, a więc jak ich obecność może manifestować się w rzeczywistych pomiarach laboratoryjnych. Jedną z możliwości jest przyjęcie, że ze względu na chaotyczność ruchu cząstek, obszar o podwyższonej koncentracji energii kinetycznej manifestować się będzie jako obszar o podwyższonej temperaturze. Przy takiej interpretacji koncentracja energii kinetycznej w obszarze pękania może być sygnałem, że w tym miejscu może następować upłynnienie materiału (Aki, Richards 1985; Chakrabarti, Benguigui 1997; Kun i in. 2013). Jednakże należy pamiętać, że przeprowadzone symulacje nie uwzględniały procesów termodynamicznych związanych z akumulacją i wymianą ciepła, a zarysowana hipoteza oparta jest tylko i wyłącznie na interpretacji ciepła jako energii kinetycznej chaotycznego ruchu cząstek, zgodnie z postulatem fizyki statystycznej. Drugą możliwością jest powiązanie obszarów o zwiększonej gęstości energii kinetycznej z obszarami o wzmożonej aktywności emisji akustycznej obserwowanych laboratoryjnie (Dębski, Young 2002) lub z istnieniem wstrząsów poprzedzających (ang. foreshocks) w seismologii (Gibowicz, Kijko 1994).

Kolejnym zaobserwowanym efektem był wpływ mikroskopowej ziarnistości materiału na przebieg procesu akumulacji energii i procesu pękania. W konfiguracji użytej w opisywanym eksperymencie numerycznym, w przypadku materiału jednorodnego, należało się spodziewać, że wszystkie parametry fizyczne, a więc np. granice obszarów o różnych gęstościach energii kinetycznej (zwanymi tutaj frontami prędkości), będą miały charakter poziomych linii ze względu na translacyjną (poziomą) symetrię układu. Jedynie w pobliżu bocznych pionowych ścianek próbek można było spodziewać się odstępstwa od takiego zachowania na skutek zmiany warunków brzegowych. W przeprowadzonych symulacjach zaobserwowano znaczące odstępstwa od takiego modelu. Dotyczyły one dwóch elementów. Po pierwsze fronty prędkości wykazywały znaczące odstępstwa od poziomych linii przewidywanych dla modelu mikroskopowo jednorodnego. Wielkość odchylenia zależy istotnie od przyjętej definicji frontu prędkości, a więc arbitralnie wybranej prędkości  $V_d$  dzielącej próbkę na część „wolną” i „szybką”. Przyjęcie mniejszych wartości  $V_d$  prowadziło do lepszej zgodności z przewidywaniami dla modelu jednorodnego zwłaszcza w początkowych fazach rozciągania. Z kolei dla większych wartości  $V_d$  istotne różnice w stosunku do modelu teoretycznego pojawiły się nawet na wczesnych etapach rozciągania. Co istotne, zaobserwowano także, że odstępstwa te zmieniają się wraz z przebiegiem procesu rozciągania. W początkowej fazie rozciągania wpływ mikrostruktury próbki wydaje się być mniejszy. Jednakże obecność mikrostruktury próbki zaczyna się znacząco manifestować od momentu rozpoczęcia tworzenia się mikroszczelin. Co ciekawe, w tym momencie zmienia się także charakter frontów prędkości. Przestają one być ciągłymi granicami pomiędzy dwoma dobrze zdefiniowanymi obszarami „wolnych” i „szybkich” cząstek, natomiast nabierają charakteru silnie rozproszonych punktów, tj. cząstki o dużych i małych prędkościach zaczynają być przestrzennie wymieszane w znaczących obszarach makroskopowych. Efekt ten można porównać do znanego w fizyce statystycznej zjawiska wzrostu wielkości fluktuacji w procesach przejść fazowych w miarę zbliżania się do punktu krytycznego (Kun i in. 2013).

Podsumowując opisane, bardzo wstępne, wyniki przeprowadzonych symulacji, wskazano na pewien zasadniczy element zastosowanego podejścia. Mianowicie symulacje numeryczne umożliwiają bardzo dokładny wgląd w przebieg analizowanego procesu, niemożliwy do uzyskania nawet w pomiarach laboratoryjnych. Jednakże powiązanie zebranych w czasie symulacji informacji z efektami makroskopowymi obserwowanymi dla rzeczywistych procesów wymagać może znaczącego wkładu fizyki teoretycznej i często będzie miało charakter zagadnienia odwrotnego (Dębski 2010).

## Podziękowania

Szczególnie podziękowania składam Profesorowi Zbigniewowi Czechowskiemu za inspirację i pomoc w przygotowaniu niniejszej pracy oraz za wiele cennych dyskusji dotyczących fizyki pęknięcia materiałów.

## L i t e r a t u r a

- Abe S., Boros V., Hancock W., Weatherley D., 2014, Esys-particle tutorial and user's guide. Version 2.3.1., dostępne online <https://launchpad.net/esys-particle>.
- Aki K., Richards P.G., 1985, *Quantitative Seismology*, Freeman and Co, San Francisco.
- Anderson T.L., 1991, *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications*, CRC Press, Boca Raton.
- Buehler M.J., 2008, *Atomistic Modeling Of Materials Failure*, Springer Verlag, New York.
- Chakrabarti B., Benguigui L.G., 1997, *Statistical Physics of Fracture and Breakdown in Disordered Systems*, Oxford University Press, Oxford.
- Christensen R.M., 2013, *The Theory of Material Failure*, Oxford University Press, Oxford.
- Cundall P.A., 1971, A computer model for simulating progressive, large-scale movement in blocky rock systems, [w:] *Proceedings of Symposium of International Society of Rock Mechanic*.
- Dębski W., 2010, Probabilistic Inverse Theory, *Advances Geophysics*, 52, 102 s., DOI: 10.1016/S0065-2687(10)52001-6.
- Dębski W., Klejment P., 2021, Earthquake physics beyond the linear fracture mechanics: a discrete approach, *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 379 (2196), DOI: 10.1098/rsta.2020.0132.
- Dębski W., Pradhan S., Hansen A., 2021, Criterion for imminent failure during loading - Discrete Element Method analysis, *Frontiers in Physics*, 9, DOI: 10.3389/fphy.2021.675309.
- Dębski W., Young R.P., 2002, Tomographic imaging of thermally induced fractures in granite using Bayesian inversion, [w:] *The Mechanism of Induced Seismicity*, C.I. Trifu C.I. (red.), *Pageoph Topical Volumes*, Birkhäuser, Basel, 277-307, DOI: 10.1007/978-3-0348-8179-1\_13.
- Ergenzinger C., Seifried R., Eberhard P., 2011, A discrete element model to describe failure of strong rock in uniaxial compression, *Granular Matter*, 13, 341-364, DOI: 10.1007/s10035-010-0230-7.
- Gibowicz S.J., Kijko A., 1994, *An Introduction to Mining Seismology*, Academic Press, San Diego.
- Hansen A., Hemmer P.C., Pradhan S., 2015, *The Fiber Bundle Model*, Wiley-VCH, Vennheim.
- Hidalgo R.C., Kun F., Herrmann H.J., 2002, Fracture model with variable range of interaction, *Physi-*

- cal Review E, 65, DOI: 10.1103/PhysRevE.65.046148.
- Kun F., Varga I., Lennartz-Sassinek S., Main G., 2013, Approach to failure in porous granular materials under compression, Physical Review E, 88, DOI: 10.1103/PhysRevE.88.062207.
- Landau L.D. Lifszyc E.M., 1993, Teoria sprężystości, PWN, Warszawa.
- Potyondy D., Cundall P., 2004, A bonded-particle model for rock, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 41 (8), 1329-1364, DOI: 10.1016/j.ijrmms.2004.09.011.

## S t r e s z c z e n i e

Proces pękania i fragmentacji ciał stałych jest zjawiskiem niezwykle powszechnym, a równocześnie niezwykle skomplikowanym. W zakresie zainteresowania geofizyki manifestuje się on najczęściej w postaci trzęsień ziemi i pęknięć lodowców. Dotychczasowe próby jakościowego zrozumienia tych naturalnych procesów nie dały w pełni zadowalających wyników. Ciągłe nie rozumiemy wielu ich aspektów fizycznych, w konsekwencji czego nie jesteśmy w stanie przewidywać zdarzeń z akceptowalną wiarygodnością. Losowość trzęsień ziemi i zjawisk lodowcowych znacząco ogranicza możliwości ich badań eksperymentalnych. Z tego powodu istotnego znaczenia nabiera podejście komplementarne, oparte na symulacjach komputerowych. W niniejszej pracy ilustrowano podejście analizujące pęknięcie materiału o ziarnistej strukturze mikroskopowej w procesie rozciągania. Wykonane symulacje pokazały, jak struktura mikroskopowa determinuje losowość procesu pęknięcia i wpływa na takie elementy procesu jak lokalizacja obszarów o zwiększonej gęstości energii kinetycznej, a więc powstawanie centrów nukleacji pęknięcia materiału.

Słowa kluczowe: symulacje numeryczne, Metoda Elementów Dyskretnych, pęknięcie ciał stałych, materiały ziarniste, zniszczenie przez rozciąganie.

## S u m m a r y

Fragmentation of solid materials is a very common and simultaneously very complex physical process. From geophysical point of view the most interesting examples of such processes are earthquakes and glacial processes like icequakes. In spite of a huge effort of analyzing them these processes are still poorly understood for many reasons. One of them is their stochasticity. For these reasons more important become numerical simulations which allow to cast some light on physical mechanism leading to nucleation, development and finally arresting earthquakes or glacial breaking processes. In this paper we illustrate advantages of such approach analyzing a tensional breaking process of macroscopically homogeneous material of granular microstructure. Our simulations have revealed how microstructure determines the fragmentation process including its stochasticity and influences creation of hotspots – regions of high concentration of kinetic energy leading finally to creation of nucleation centers.

Key words: numerical simulations, Discrete Element Method, solid material fragmentation, granular media, tensional fracturing.