

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ НА ОСОБЕННОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ЛАБОРАТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

© 2023 г. В. Л. Гиляров^{1, *}, Е. Е. Дамаскинская^{1, **}, И. Д. Гесин²

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: Vladimir.Hilarov@mail.ioffe.ru

**E-mail: Kat.Dama@mail.ioffe.ru

Поступила в редакцию 16.09.2022 г.

После доработки 02.12.2022 г.

Принята к публикации 09.12.2022 г.

Предложена компьютерная модель разрушения гетерогенных материалов (в том числе, горных пород), позволяющая исследовать эволюцию дефектной структуры (трещин) в процессе деформирования. Модель основана на методе дискретных элементов (DEM – *Discrete element method*), который в отличие от методов, основанных на механике сплошных сред, естественным образом имитируют образование и развитие трещин. В работе была использована модель связанных частиц (*bonded particle model* – BPM). Материал представляется как совокупность сферических частиц (моделирующих зерна поликристалла), соединенных связями (моделирующими межзеренные границы) в местах контактов частиц. В модели BPM зарождение трещин определяется разрывом связей между частицами, а распространение – слиянием множества разорванных связей. Были проведены компьютерные эксперименты при различных параметрах материала (дисперсия зерен по механическим свойствам и размеру, различные свойства на границах зерен), с целью выявления их влияния на картину локальных напряжений, процесс образования дефектов и формирование очага разрушения. Расчеты производились в свободно распространяемом пакете программ MUSEN. Моделировались образцы цилиндрической формы, которые заполнялись сферическими частицами одного или разных размеров и упаковывались до достижения пористости 0.35–0.37. В качестве материалов, из которых состояли сферические зерна и связи между ними (межзеренные границы), использовались материалы с механическими параметрами, соответствующими различным минералам и горным породам: гранит, кварц, ортоклаз, олигоклаз, стекло. Образец помещался в виртуальный пресс, в котором нижняя плита была неподвижна, а верхняя перемещалась в направлении нижней с постоянной скоростью до тех пор, пока образец не разрушался. Расчет максимальных локальных напряжений показал, что гомогенность материала приводит к большей неоднородности локальных напряжений в пространстве, и наоборот, гетерогенность способствует большей их однородности. Сопоставление с результатами лабораторных экспериментов по деформированию горных пород показало, что предложенная модель реалистично описывает некоторые особенности разрушения в тех случаях, когда основные процессы протекают по границам зерен. К таким особенностям относятся хрупкий характер разрушения гомогенных материалов и наличие нелинейной упругости (пластичности) для более гетерогенных, выявленные при помощи диаграммы напряжение–деформация, и поведение во времени “акустической активности” – числа разорванных связей за единицу времени. Для гетерогенных материалов модель демонстрирует двухстадийный характер разрушения, когда на первой стадии происходит накопление дефектов однородно по образцу, а на второй стадии – формирование и рост очага разрушения.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод дискретных элементов, горные породы, механическое нагружение, очаг разрушения, акустическая эмиссия, локальные напряжения.

DOI: 10.31857/S0002333723030031, EDN: JZNSMS

ВВЕДЕНИЕ

За последние 20–30 лет проведено большое число экспериментов, в которых исследовалось развитие разрушения в горных породах [Lockner et al., 1991; Botvina, 2011; Petružálek et al., 2013;

Hamiel et al., 2006; Kuksenko et al., 1996; Smirnov et al., 2010; Xinglin Lei, Shengli Ma, 2014; Tal et al., 2020]. Основной задачей этих исследований был поиск признаков приближающегося катастрофического разрушения (в случае лабораторных об-

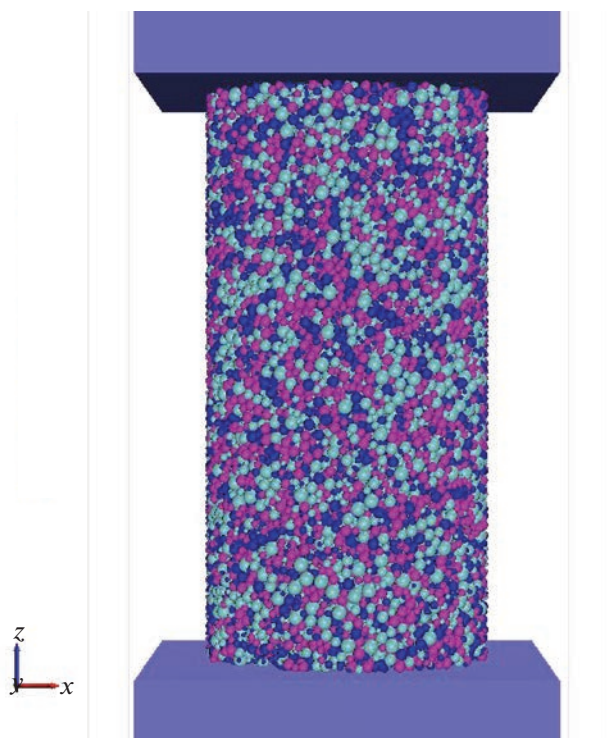


Рис. 1. Образец и схема модельного эксперимента. Пример гетерогенного образца: частицы из разного материала окрашены в разный цвет. Плиты моделируют пуансоны прессы.

разцов — образование магистральной трещины). Однако до сих пор физические механизмы, управляющие переходом от “неопасного” делокализованного образования трещин к ускоренному локализованному процессу, остаются невыясненными [Botvina, 2011; Carpinteri et al., 2011; Ponomarev et al., 1997; Naimark, 2003; Panteleev et al., 2012; Lei, 2019]. В связи с этим, мы решили обратиться к компьютерному моделированию, предполагая, что численные эксперименты позволят не только выявить факторы, существенным образом влияющие на развитие процесса, но и предложить новые схемы лабораторных экспериментов.

Большинство ранее предложенных компьютерных моделей (например, [Krajcinovic, 1989]), используемых для описания механического поведения горных пород, основаны на представлениях механики сплошных сред, которые не позволяют явно учесть образование дефекта (нарушение сплошности).

Однако для понимания физических закономерностей образования и эволюции дефектов (трещин), наиболее адекватными являются модели, основанные на методе дискретных элементов (DEM) [Lisjak, Grasselli, 2014; Cundall, 1971]. Модель дискретных элементов позволяет явно учи-

тывать локальные нарушения сплошности в процессе деформирования, естественным образом имитируя образование и развитие трещин.

В этом методе материал дискретизируется на отдельные независимые элементы различной формы, называемые частицами. В качестве частиц могут выступать отдельные зерна минералов, частицы порошков и другие отдельныености. В местах соприкосновения частиц возникают контакты. Второй закон Ньютона используется для определения поступательного и вращательного движения каждой частицы, в то время как уравнение состояния материала для каждой связи используется для обновления контактных сил, возникающих из относительного движения в каждом контакте. Таким образом, метод дискретных элементов представляет собой расширение молекулярно-динамических методов (см. например [Rapaport, 1995]).

В данной работе предпринята попытка разработки компьютерной модели разрушения, базирующейся на методе дискретных элементов и позволяющей исследовать влияние степени неоднородности материала на процесс разрушения.

ОПИСАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе использовалась модель связанных частиц (*bonded particle model* — BPM), которая подробно описана в работе [Potyondy, Cundall, 2004]. Различные модификации этой модели применяются для изучения поведения материалов при механическом разрушении. Модель материала (горной породы) — сферические частицы одного или разных размеров, которые имитируют зерна, и связи между частицами, которые имитируют межзеренные границы. Физико-механические параметры материалов, из которых состоят частицы и связи, приведены в таблице.

Модельные эксперименты выполнялись в свободном распространяемом пакете программ MUSEN [Dosta, Skorych, 2020].

Связи формировались в местах контактов частиц. Материал связей выбирался из таблицы. Частицы из одного материала соединялись связью из того же материала, а частицы из разных материалов соединялись либо низкопрочными хрупкими стеклянными связями, либо низкопрочными связями (набор связей типа 6, 7, 8 из таблицы). Диаметр связей (d) выбирался генератором связей автоматически равным меньшему диаметру пары соединяемых частиц 1 и 2: $d = \min\{d_1, d_2\}$ (d_1, d_2 — диаметры частиц 1 и 2) [Dosta, Skorych, 2020]. Максимальная длина связей выбиралась из того условия, чтобы между парой соединяемых частиц не могла поместиться

Параметры материалов, использованные при моделировании

№	материал	ρ , кг/м ³	E , ГПа	ν	σ_n , МПа	σ_s , МПа	η , Па · с
1	Гранит	2700	45	0.13	175	175	5E19
2	Кварц	2650	94	0.29	600	600	5E19
3	Ортоклаз	2560	62	0.29	420	420	1E19
4	Олигоклаз	2560	70	0.29	480	480	1E19
5	Стекло	2500	50	0.22	50	50	1E40
6	Связь кварц—ортоклаз	2500	5.8	0.2	200	200	5E19
7	Связь кварц—олигоклаз	2500	5.8	0.2	300	300	5E19
8	Связь ортоклаз—олигоклаз	2500	5.8	0.2	100	100	5E19

Примечание: ρ — плотность материала; E — модуль Юнга; ν — коэффициент Пуассона; σ_n — прочность материала на разрыв; σ_s — прочность материала на сдвиг; η — динамическая вязкость.

еще одна частица. Минимальная длина $L_{\min}$ обычно была нулевой.

Для описания трения на контактах между частицами, а также между частицами и поверхностью плит, использовалась модель Герца—Миндлина [Hertz, 1882; Tsuji et al., 1992]. Параметры трения на контактах не представляются важными для данной задачи, так как этот вид взаимодействия вступает в силу после разрыва связей. Он будет определять, например, проскальзывание двух частей образца относительно друг друга, после его разрушения. Поэтому выбирались значения параметров по умолчанию: коэффициент восстановления = 0.6; коэффициент трения скольжения = 0.45, коэффициент трения качения = 0.05. При этих значениях параметров проскальзывание в зажимах отсутствовало.

Моделировались образцы цилиндрической формы диаметром 10 мм и высотой 20 мм. Цилиндры заполнялись сферическими частицами одного или разных размеров и упаковывались генератором упаковки MUSEN до достижения пористости 0.35–0.37. Образец помещался в виртуальный пресс. Нижняя плита была неподвижна, а верхняя перемещалась вниз с постоянной скоростью $v = 0.02$ м/с. Тем самым имитировалось одноосное сжатие.

В настоящей работе рассмотрено изотермическое нагружение, поэтому вопросы, связанные с характерным временем, определяемым теплопроводностью, не рассматриваются, предполагая, что тепло передается мгновенно. Характерное время релаксации упругих напряжений определяется скоростью звука $\tau_e = \frac{H}{V} \approx 4 \times 10^{-6}$ с, что намного меньше времени разрушения образца, а скорость звука в гранитах 5400 м/с намного превосходит скорость нагружения. С этой точки зрения нагружение медленное. Поскольку расчет делается с шагом $\sim 5 \times 10^{-9}$ с, за время жизни образца

~ 0.02 с система проходит около 4000000 состояний, что сводит динамические эффекты к минимуму [Brown, 2013]. Наконец, процессы, связанные с конечной вязкостью, в данной работе тоже не рассматриваются.

Эксперимент заканчивался, когда образец разрушался (разделялся на части). В процессе эксперимента через равные промежутки времени — интервал сохранения данных — записывался большой набор механических параметров, который использовался для дальнейшего анализа.

Задачей данной работы является исследование влияния гетерогенности структуры материала на процесс разрушения.

В гомогенном образце все частицы и связи состоят из одного материала. В гетерогенном образце (как и в реальных материалах) присутствуют частицы разных минералов и связи (межзеренные границы) также имеют свойства разных материалов: гранит, ортоклаз, олигоклаз, кварц, стекло. Изменялась степень гетерогенности модельного материала: варьировались размеры частиц, длина и толщина связей, материал частиц и связей. Число частиц гомогенного образца — 28125, гетерогенного — 48695.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 приведены диаграммы нагружения гомогенного и гетерогенного образцов. Для вычисления деформации использовалась формула $\epsilon = (vt)/H$, где H — высота образца в начальный момент времени. Напряжения рассчитывались исходя из сил, действующих на нагружающие плиты. Поскольку в численном эксперименте невозможно в общем случае выдержать равенство сил, действующих на плиты, напряжение рассчитывалось по формуле $\sigma = 0.5(F_t + F_b)/S$, где индексы t и b означают верх и низ, S — сечение об-

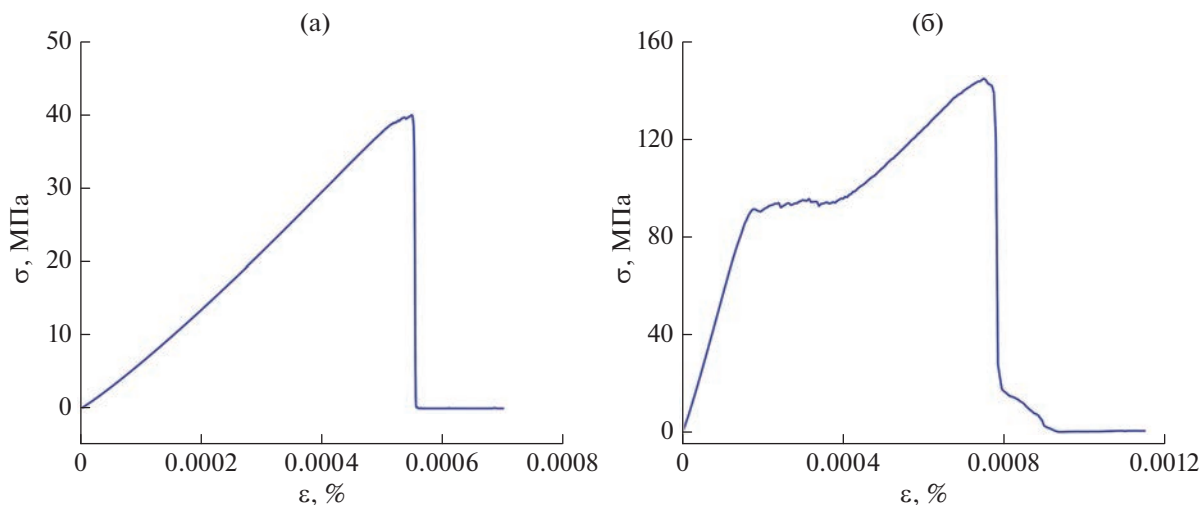


Рис. 2. Диаграммы нагружения (напряжение (σ) — деформация (ε)) при деформировании однородного (а) и гетерогенного (б) образцов.

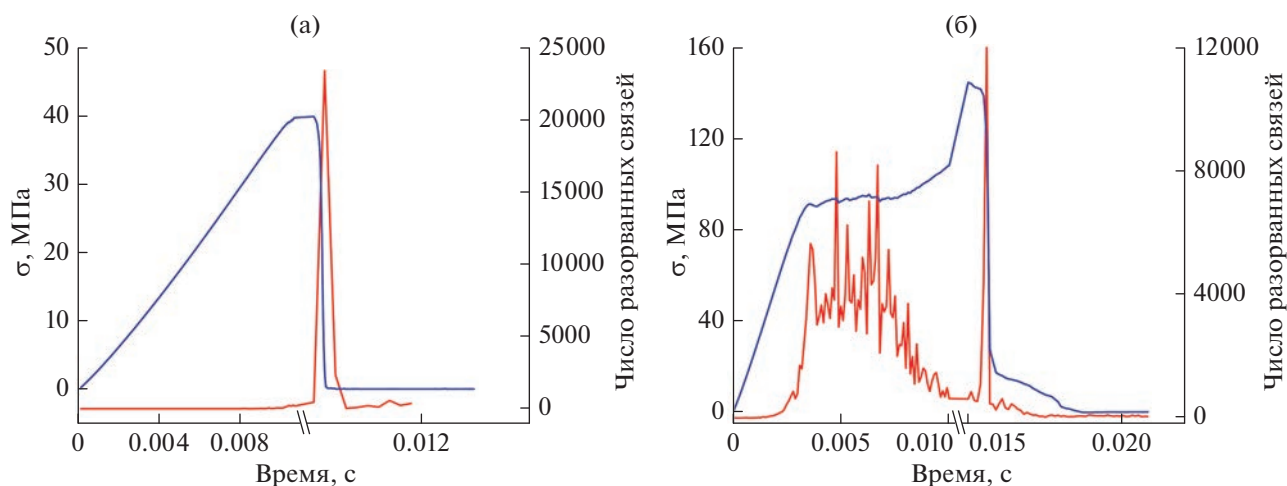


Рис. 3. Изменение напряжения (синие кривые) и активность акустической эмиссии (красные кривые) при деформировании однородного (а) и гетерогенного (б) образцов.

разца (использовалось сечение в начальный момент времени) [Brown, 2013].

Видно, что однородный образец демонстрирует хрупкое поведение (линейное увеличение напряжения без выхода на горизонтальную площадку) и резкое падение напряжения после достижения максимального значения.

При разрушении гетерогенного образца наблюдается наличие нелинейного (пластичного) участка на диаграмме нагружения. Это связано с тем, что сначала рвутся более слабые связи, а уж затем более прочные.

Модель позволяет изучать “акустическую эмиссию”. В первом приближении можно считать, что каждый разрыв связи (разрушение меж-

зеренной границы) сопровождается излучением сигнала акустической эмиссии. На рис. 3 показаны графики зависимости числа разорванных связей за определенный промежуток времени — аналог активности акустической эмиссии (красные кривые). Хорошо видна разница в поведении “акустической активности” (АА) при деформировании однородного и гетерогенного материала.

Для однородного характерно очень небольшое число разорванных связей вплоть до момента разрушения, когда достигается максимальное значение напряжений (синяя кривая). В этот момент происходит всплеск АА.

В гетерогенном образце накопление разрывов связей начинается в пластической области, когда

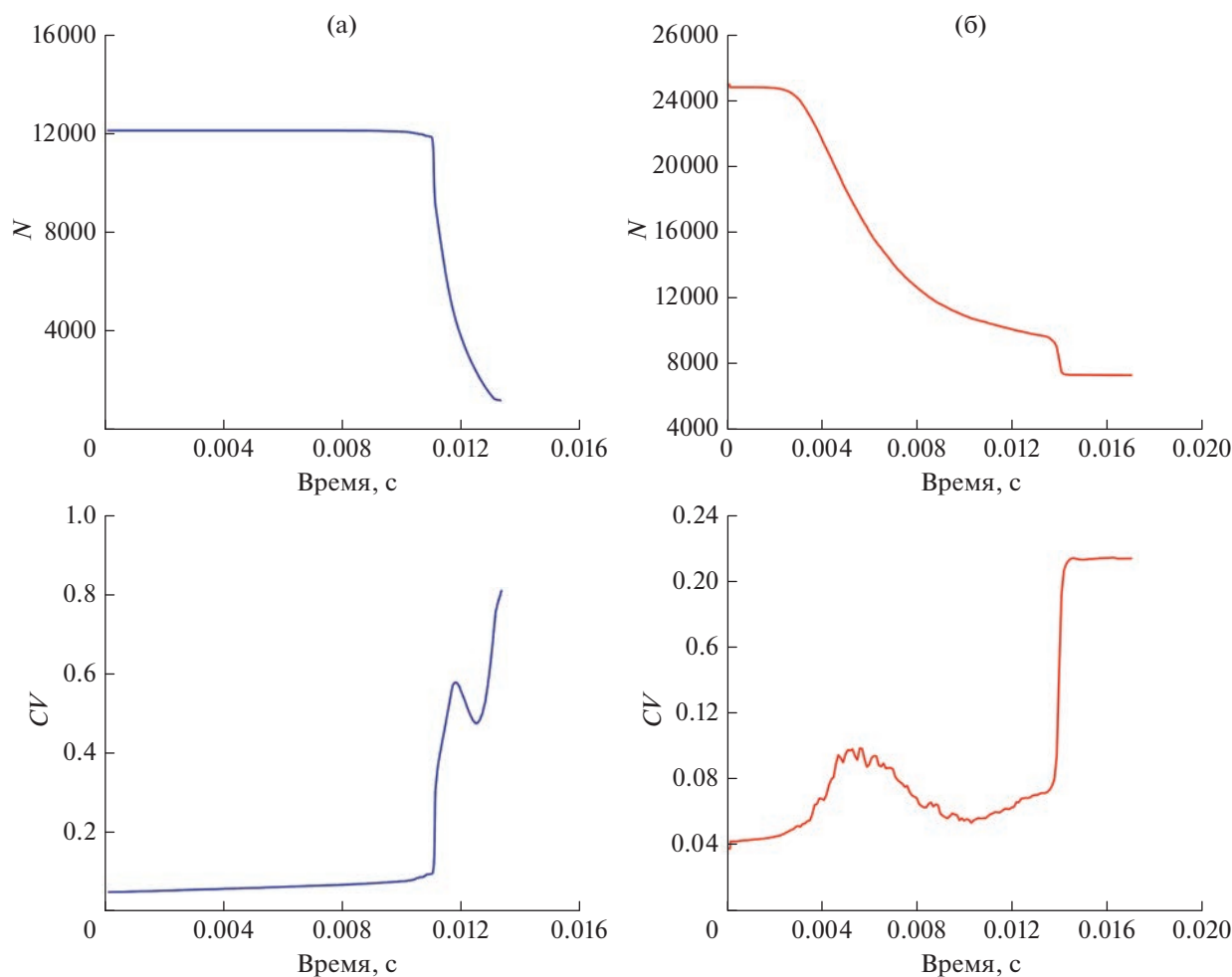


Рис. 4. Зависимости от времени числа целых связей усредненных по слоям (N) и коэффициента вариации (CV): (а) – однородный образец; (б) – гетерогенный образец.

начинают разрушаться наиболее слабые связи. Отметим, что основное влияние на механические свойства моделируемых в настоящей работе материалов оказывает гетерогенность и механические свойства межзеренных границ (связей), в то время как свойства зерен (частиц) существенной роли не играет. Это связано с тем, что разрушение самих частиц в рассматриваемой модели не происходит.

Представляет интерес рассмотреть, какова неоднородность числа разрывов связей (т.е. разрушения межзеренных границ) по объему образца. Для этого выполнялась следующая процедура.

Образец разбивался на 10 слоев по высоте, и параметры разрушения рассчитывались в каждом слое для каждого сохраненного момента времени. В качестве меры пространственной неоднородности был выбран коэффициент вариации числа целых связей по слоям.

В однородном образце наблюдается хрупкое разрушение: незначительное уменьшение числа целых связей в течение длительного времени (рис. 4а). При этом коэффициент вариации сохраняет низкие значения (рис. 4а). Это говорит об однородности разрушения по всему объему. Затем наблюдается резкое уменьшение числа целых связей. При этом происходит взрывоподобный скачок коэффициента вариации. Это указывает на локализацию разрушения и прорастание трещины.

На рис. 4б показано изменение этих же параметров при разрушении гетерогенного образца. Видно, что в гетерогенном образце происходит накопление повреждений при значительно меньших временах. Однако коэффициент вариации на этой стадии также небольшой, что говорит о том, что повреждения накапливаются более или менее однородно по объему образца. Это подтверждает справедливость модели двухстадийного разруше-

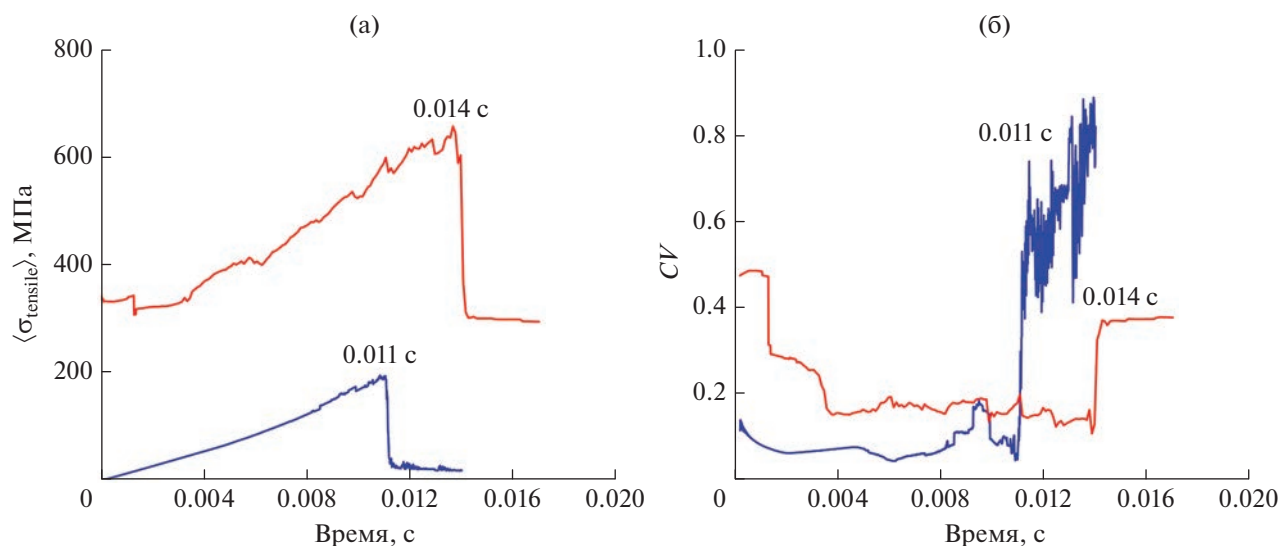


Рис. 5. Усредненные по слоям максимальные растягивающие напряжения (а) и их коэффициенты вариации (б): синие кривые — однородный образец, красные кривые — гетерогенный образец. Метки времени позволяют сопоставить характерные точки изменения напряжений и их коэффициентов вариации.

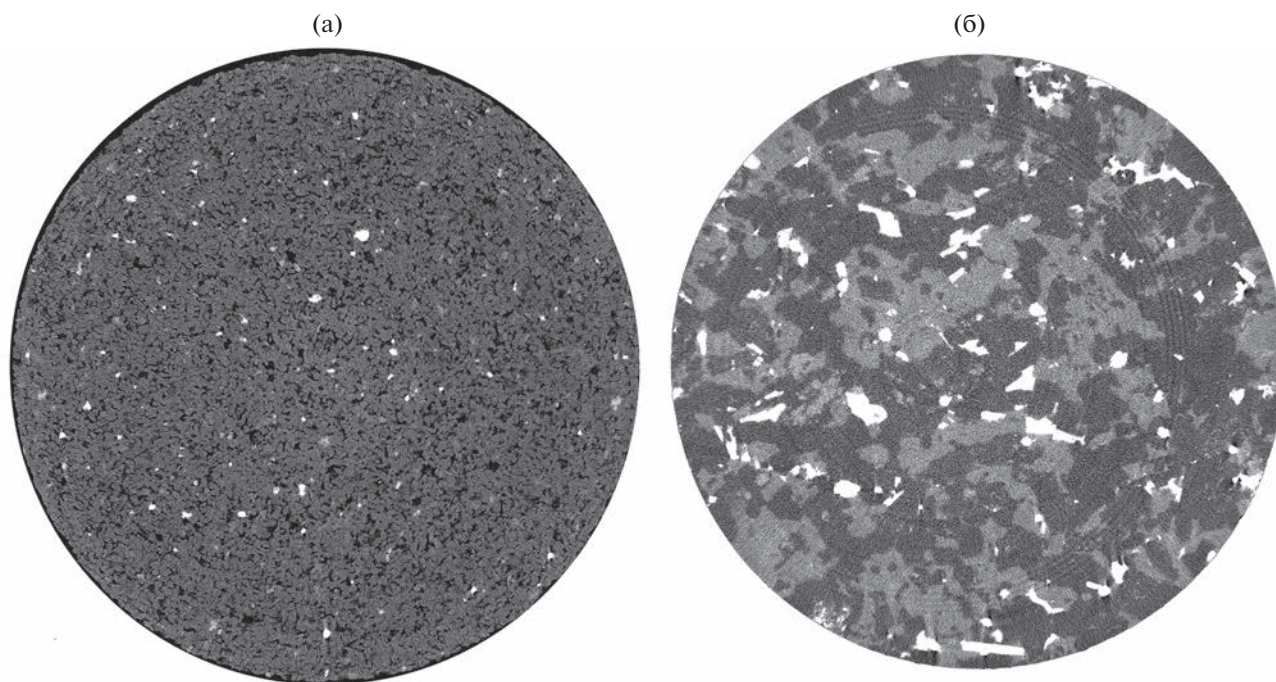


Рис. 6. Примеры томографических срезов: (а) — песчаник Berea; (б) — гранит Westerly. Градации серого соответствуют различной плотности материала: наиболее плотным фракциям соответствует белый цвет, пустотам (поры, трещины и т.д.) — черный цвет.

ния гетерогенных материалов [Kuksenko et al., 1996].

Далее был проведен анализ растягивающих напряжений на связях.

На рис. 5а показаны зависимости от времени значения максимальных растягивающих напря-

жений на связях (средние по 10 слоям). Эти напряжения получены усреднением по слоям максимальных напряжений в каждом слое в каждый сохраненный момент времени. На рис. 5б приведены коэффициенты вариации для этих величин.

Видно, что по мере нагружения растягивающие напряжения растут. Однако коэффициент

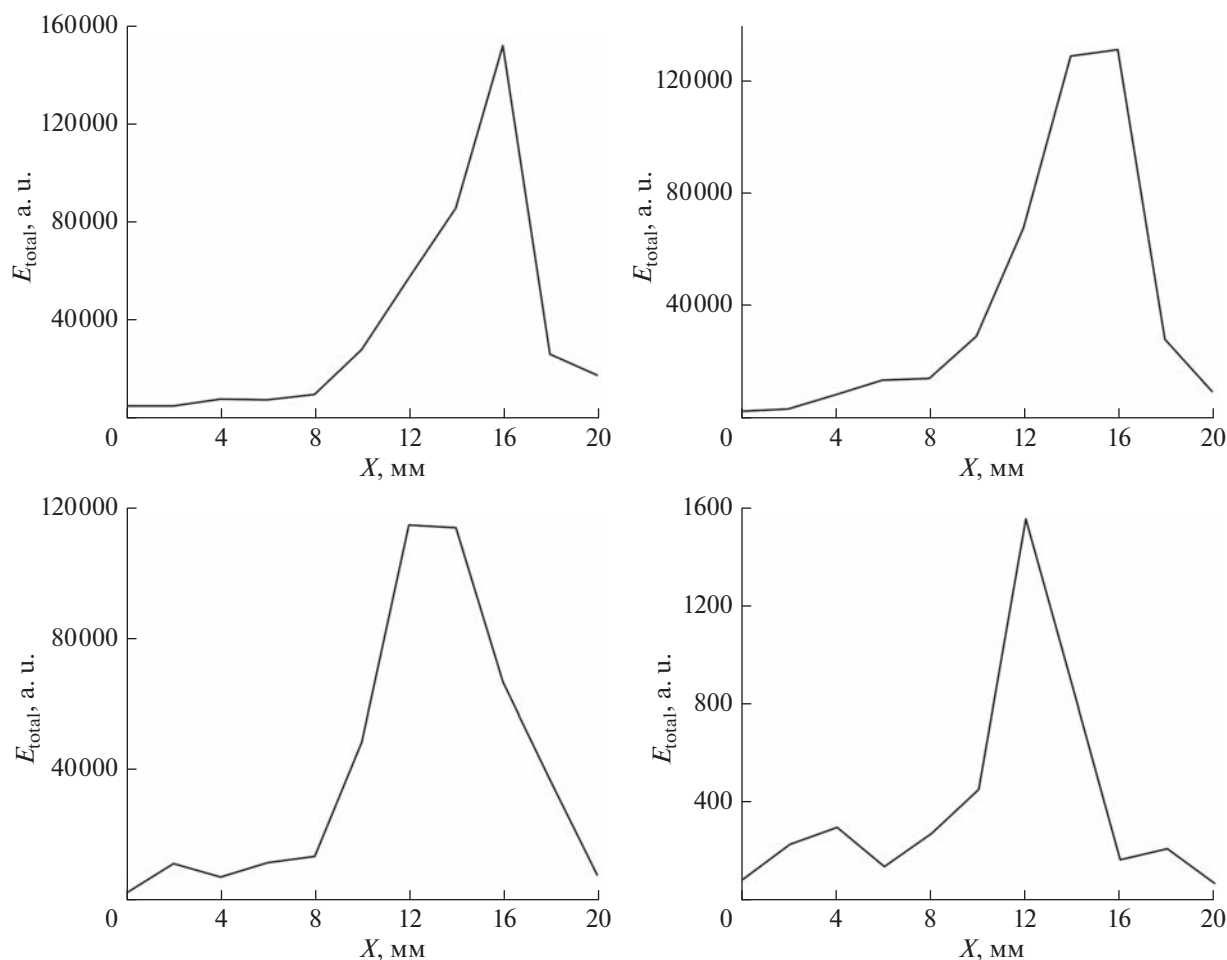


Рис. 7. Изменение суммарной энергии сигналов АЕ по координате (высоте образца) при деформировании образца песчаника Berea.

вариации остается одинаковым по объему и имеет низкие значения. При образовании очага разрушения, которому соответствует скачок коэффициента вариации, локальные напряжения становятся существенно неоднородными по объему. Причем у гетерогенного образца величина этой неоднородности меньше, чем у более гомогенных.

Для проверки адекватности построенной компьютерной модели реальным процессам, происходящим при деформировании образцов горных пород, необходимо выполнить сопоставление с лабораторным экспериментом. У нас имеются обширные экспериментальные данные, полученные при деформировании образцов различных горных пород [Damaskinskaya et al., 2018; 2021]. Обратимся к данным экспериментов, в которых проводилось одноосное сжатие цилиндрических образцов ($d = 10$ мм, $h = 20$ мм) песчаника Berea и гранита Westerly.

Для качественного сопоставления с компьютерными экспериментами выбраны именно эти

горные породы, поскольку песчаник Berea является более однородным материалом по сравнению с существенно гетерогенным гранитом Westerly. Это демонстрируют томографические срезы данных материалов, показанные на рис. 6.

Сигналы акустической эмиссии (АЕ) регистрировались двумя пьезопреобразователями, прикрепленными к торцам образца. Каждый сигнал акустической эмиссии характеризовался временем излучения, координатой источника по высоте образца и энергией. Точность определения координат источника сигнала АЕ составляла около 2 мм. Постановка экспериментов и результаты подробно описаны ранее в работах [Damaskinskaya et al., 2018; 2021; 2022].

На рис. 7 и рис. 8 приведены примеры распределений по координате (высоте образца) суммарной энергии сигналов акустической эмиссии. Распределения построены для последовательных временных отрезков. Данное рассмотрение позволяет проследить изменения распределений

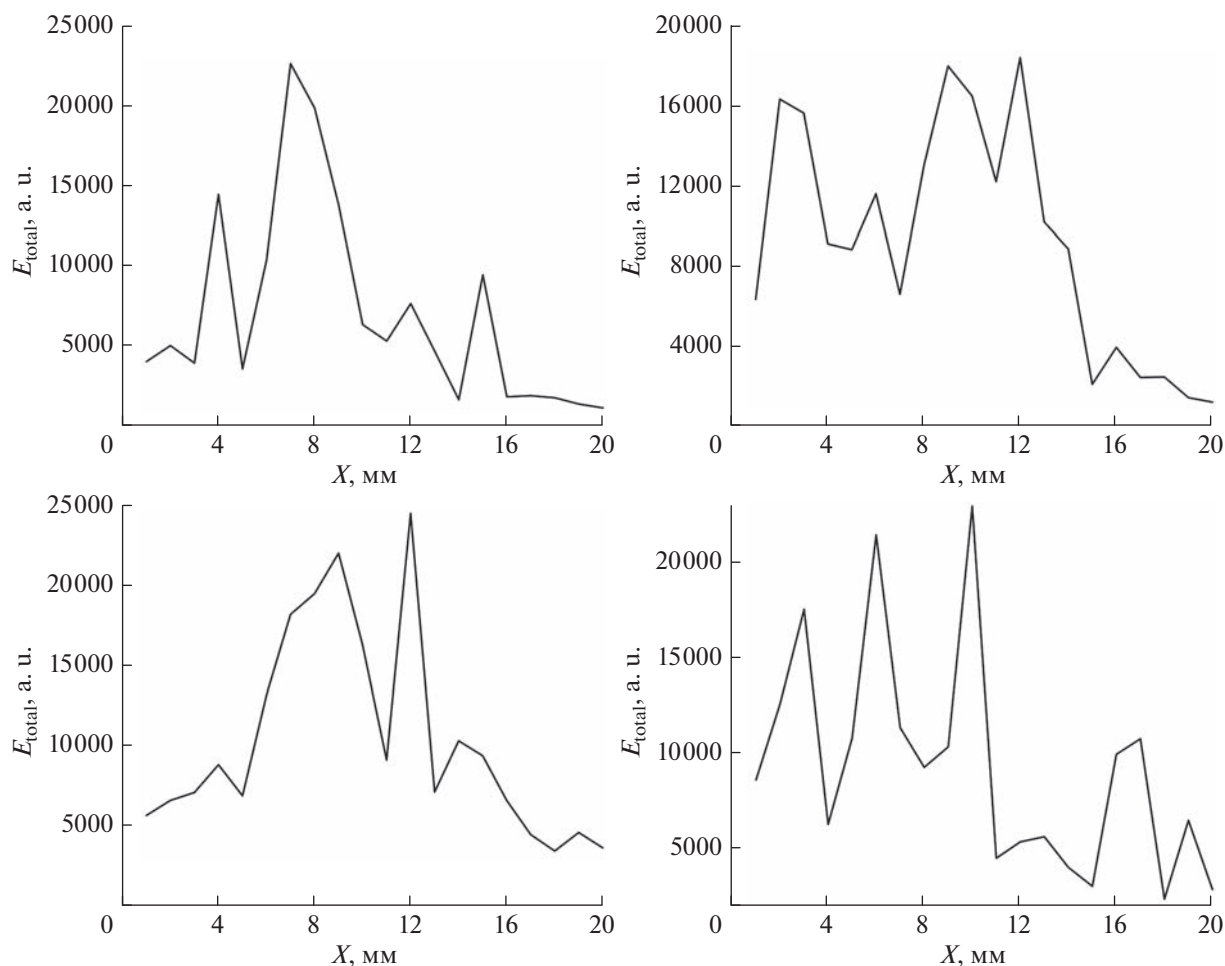


Рис. 8. Изменение суммарной энергии сигналов АЕ по координате (высоте образца) при деформировании образца гранита Westerly.

энергии по координате в процессе нагружения. Предполагается, что наиболее интенсивное деформирование происходит в области, в которой наблюдается наибольшее энерговыделение. Этот факт был проверен экспериментально в работах [Damaskinskaya et al., 2021; 2022].

На рис. 7 показаны такие зависимости, полученные при деформировании образца песчаника Berea. Видно, что на каждом временном отрезке наблюдается одна область повышенного энерговыделения. Это указывает на то, что имеется один очаг, координаты которого незначительно изменяются в процессе деформирования.

На рис. 8 показаны распределения энерговыделения по координате, полученные при деформировании образца гранита Westerly. Видно, что на каждом временном отрезке наблюдается несколько областей повышенного энерговыделения (имеется несколько локальных очагов). Это позволяет говорить о том, что разрушение носит более однородный характер.

Как отмечалось выше, песчаник Berea является более гомогенным материалом по сравнению с гранитом Westerly. Проведенный анализ распределений энергии сигналов АЕ по координате дает основания говорить о том, что более гетерогенному материалу присущ более однородный (многоочаговый) характер разрушения. Важно отметить, что именно такую картину разрушения мы получили и в компьютерных экспериментах. Это говорит об адекватности построенной компьютерной модели.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построенная модель поликристаллических материалов адекватно описывает некоторые особенности их разрушения в тех случаях, когда основные процессы протекают по границам зерен, а именно: хрупкий характер разрушения гомогенных материалов, наличие нелинейной упругости (пластичности) для более гетерогенных.

Для гетерогенных материалов модель предсказывает двухстадийный характер их разрушения, когда на первой стадии происходит накопление дефектов однородно по образцу, а на второй стадии — формирование и рост очага разрушения.

Расчет максимальных локальных напряжений показал, что гомогенность материала приводит к большей неоднородности локальных напряжений в пространстве, и наоборот, гетерогенность способствует большей их однородности.

Мы предполагаем, что дальнейшие компьютерные эксперименты и их анализ позволят сопоставить эволюционирующие в процессе деформирования распределения дефектов по размерам и энергетическое распределение сигналов акустической эмиссии. Это позволит выявить условия перехода от Марковского процесса к состоянию самоорганизованной критичности.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено в рамках Государственного задания ФТИ им. А.Ф. Иоффе, тема 0040-2014-0008.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Botvina L.R.* Damage evolution on different scale levels // *Izv. Phys. Solid Earth*, 2011. V. 47. № 10. P. 859–872.
- Brown N.J.* Discrete Element Modelling of Cementitious Materials. Ph.D. Thesis. Edinburgh: The University of Edinburgh. 2013. 247 p.
- Carpinteri A., Chiodoni A., Manuello A., Sandrone R.* Compositional and microchemical evidence of piezonuclear fission reactions in rock specimens subjected to compression tests // *Strain*. 2011. V. 47. P. 282–292.
- Cundall P.A.* A computer model for simulating progressive largescale movements in blocky rock systems. Proceedings of the Symposium of International Society of Rock Mechanics. Nancy: France. 1971. V. 1. Paper № II-8.
- Damaskinskaya E.E., Hilarov V.L., Nosov Yu.G., Podurets K.M., Kaloyan A.A., Korost D.V., Panteleev I.A.* Defect structure formation in quartz single crystal at the early stages of deformation // *Physics of the Solid State*. 2022. V. 64. № 4. P. 439–445.
- Damaskinskaya E.E., Panteleev I.A., Gafurova D.R., Frolov D.I.* Structure of a Deformed Inhomogeneous Material on the Data of Acoustic Emission and X-Ray Computer Microtomography // *Phys. Solid State*. 2018. V. 60. № 7. P. 1363–1367.
- Damaskinskaya E.E., Panteleev I.A., Korost D.V., Damaskinskii K.A.* Structure-Energy Regularities of Accumulation of Damages during Deformation of a Heterogeneous Material // *Phys. Solid State*. 2021. V. 63. № 1. P. 101–106.
- Dosta M., Skorych V.* MUSEN: An open-source framework for GPU-accelerated DEM simulations // *SoftwareX*. 2020. 12. 100618.
- Hamiel Y., Katz O., Lyakhovsky V., Reches Z., Fialko Yu.* Stable and unstable damage evolution in rocks with implications to fracturing of granite // *Geophys. J. Int.* 2006. V. 167. P. 1005–1016.
- Hertz H.* Über die Berührung fester elastischer Körper // *Journal die reine und angewandte Mathematik*. 1882. V. 92. P. 156–171.
- Krajcinovic D.* Damage mechanics // *Mech Mater.* 1989. V. 8. P. 117–97.
- Kuksenko V., Tomilin N., Damaskinskaya E., and Lockner D.* A two-stage model of fracture of rocks // *Pure Appl. Geophys.* 1996. V. 146. № 2. P. 253–263.
- Lei X.* Evolution of b-Value and Fractal Dimension of Acoustic Emission Events During Shear Rupture of an Immature Fault in Granite // *Applied Sciences*. 2019. V. 9. № 12. P. 2498.
- Lisjak A., Grasselli G.* A review of discrete modeling techniques for fracturing processes in discontinuous rock masses // *J. Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*. 2014. V. 6. № 4. P. 301–314.
- Lockner D.A., Byerlee J.D., Kuksenko V., Ponomarev A., Sidorin A.* Quasi-static fault growth and shear fracture energy in granite // *Nature*. 1991. V. 350. P. 39–42.
- Naimark O.B.* Collective Properties of Defects Ensemble and Some Nonlinear Problems of Plasticity and Failure // *Phys. Mesomech. J.* 2003. V. 4. № 4. P. 45–72.
- Panteleev I.A., Plekhov O.A., Naimark O.B.* Nonlinear dynamics of the blow-up structures in the ensembles of defects as a mechanism of formation of earthquake sources // *Izv. Phys. Solid Earth*. 2012. V. 48. P. 504–515.
- Petrůžálek M., Vilhelm J., Rudajev V., Lokajčák T., Svitek T.* Determination of the anisotropy of elastic waves monitored by a sparse sensor network // *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 2013. V. 60. P. 208–216.
- Ponomarev A.V., Zavyalov A.D., Smirnov V.B., Lockner D.A.* Physical modeling of the formation and evolution of seismically active fault zones // *Tectonophysics*. 1997. V. 277. P. 57–81.
- Potyondy D.O., Cundall P.A.* A bonded-particle model for rock // *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 2004. V. 41. P. 1329–1364.
- Rapaport D.C.* The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press: Cambridge. 1995. 549 p.
- Smirnov V.B., Ponomarev A.V., Benard P., Patonin A.V.* Regularities in transient modes in the seismic process according to the laboratory and natural modeling // *Izv. Phys. Solid Earth*. 2010. V. 46. P. 104–135.
- Tal Y., Goebel T., Avouac J.-P.* Experimental and modeling study of the effect of fault roughness on dynamic frictional sliding // *Earth and Planetary Science Letters*. 2020. V. 536. P. 116133.
- Tsuji Y., Tanaka T., Ishida T.* Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in horizontal pipe // *Powder Technology*. 1992. 71. P. 239–250.
- Xinglin L., Shengli M.* Laboratory acoustic emission study for earthquake generation Process // *Earthq. Sci.* 2014. V. 27. 6. P. 627–646.

The Influence of Materials Structure on the Main Features of the Fracture Process in Rocks: Discrete Elements Method and Laboratory Experiment

V. L. Hilarov^{a, *}, E. E. Damaskinskaya^{a, **}, and I. D. Gesin^b

^a*Ioffe Institute, Saint Petersburg, 194021 Russia*

^b*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Saint Petersburg, 195251 Russia*

^{*}*e-mail: Vladimir.Hilarov@mail.ioffe.ru*

^{**}*e-mail: Kat.Dama@mail.ioffe.ru*

A computer model of fracture of the heterogeneous materials (including rocks) based on the Discrete Element Method (DEM) is proposed. We used the bonded particle model (BPM), various modifications of which are widely used in the study the fracture process. The material is modeled by a set of spherical particles (simulating polycrystalline grains) connected by bonds placed at the points of particle contacts (simulating grain boundaries). In BPM model, the initiation of cracks was determined by the bonds breakage, and their propagation is provided by the coalescence of many broken bonds. Computer experiments were carried out for the materials with different features (various grain mechanical properties and sizes, various mechanical properties of the grain boundaries), in order to find out the influence of these parameters on local stresses and the defect formation. Calculations were held in the MUSEN software. Cylindrical samples were filled with spherical particles of the same or different radii. The parameters of materials for grains and bonds (grain boundaries) were taken corresponding to granite, quartz, orthoclase, oligoclase, and glass. The sample was placed in a virtual press, in which the lower plate was stationary, and the upper plate moved towards the lower one at a constant velocity until the sample was destroyed. The calculation of the maximum local stresses showed that the homogeneity of material leads to greater space heterogeneity of local stresses and vice versa, heterogeneity contributes to their greater uniformity. Comparison with the results of laboratory experiments on rock deformation showed that the proposed model of polycrystalline materials realistically describes some features of their destruction when the main processes occur along the grain boundaries. These features include the brittle nature of homogeneous materials fracture and the presence of nonlinear elasticity (plasticity) for ones that were more heterogeneous. For heterogeneous materials, the model demonstrates a two-stage character of fracture process, when at the first stage the accumulation of defects occurs uniformly over the sample, and at the second stage – the formation and growth of the fracture site.

Keywords: computer modeling, discrete element method, rocks, mechanical loading, fracture nucleation site, acoustic emission, local stresses