

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Физико-механический факультет
Кафедра “Теоретическая механика”

Диссертация допущена к защите
Зав. кафедрой
А. М. Кривцов
“ ”
2012г.

**ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание академической степени
МАГИСТРА**

Тема: Моделирование деформирования и разрушения
хрупких гранулированных материалов методом динамики
частиц

Направление: 010900 — Механика

Выполнил студент гр. 60510/11

И. Е. Асонов

Руководитель, к.ф.-м.н.

В. А. Кузькин

Консультант по вопросам охраны труда, к.т.н., доц.

В. В. Монашков

Санкт-Петербург
2012

Содержание

1 Введение	3
2 Безмоментный модельный материал	6
2.1 Введение	6
2.2 Метод динамики частиц и основные обозначения	7
2.3 Используемое парное силовое взаимодействие	12
2.4 Кристаллическая решетка	17
2.5 Тестирование модельного материала	25
2.6 Результаты	30
3 Моментный модельный материал	32
3.1 Введение	32
3.2 Парное взаимодействие твердых тел: общий случай	34
3.3 Моментная модель взаимодействия для одной связи	35
3.4 Калибровка параметров	39
3.4.1 Жесткости связи	39
3.4.2 Калибровка для длинных связей: теории стержней Бернулли-Эйлера и Тимошенко	41
3.4.3 Калибровка для коротких связей	43
3.5 О численной реализации модели	45
3.6 Пример работы модели	47
3.6.1 Квазистатический изгиб дискретного стержня	48
3.7 Результаты	49
4 Приложение А. Охрана труда	51
4.1 Требования к вентиляции, отоплению и кондиционированию воздуха	52
4.2 Требования к уровням шума	53
4.3 Требования к естественному и искусственному освещению для помещений вычислительных комнат	54
4.4 Пожарная безопасность при работе с вычислительной техникой .	55
4.5 Требования электробезопасности	56
4.6 Эргономические требования	56
4.7 Напряженность трудового процесса	57
5 Приложение В. Обозначения для безмоментного взаимодействия	58

1 Введение

Разрушение – сложнейшее явление природы, присущее многим процессам, происходящим на Земле. Это явление может работать как во благо (обработка материалов, бурение горных пород, создание тоннелей и др.), так и во вред (наземные, воздушные, наводные и подводные катастрофы, землетрясения и др.). Возникает естественное желание минимизировать наносимый разрушением вред и оптимизировать процесс разрушения в случае, когда он является полезным. Этих целей сложно достичь, не научившись на высоком уровне исследовать системы, в которых происходят сильные деформирования и разрушения. Нарушение континуальности материалов при сильном деформировании и разрушении создает серьезные сложности для описания этих процессов в рамках классической механики сплошной среды. Большинство возникающих сложностей можно преодолеть, если представить среду не как сплошную, а как составленную из структурных элементов. Системы, полученные в результате дискретизации, могут исследоваться как аналитически, так и численно, посредством моделирования с использованием вычислительных мощностей. Компьютерное моделирование позволяет исследовать в том числе те задачи, аналитическое решение которых затруднено или вовсе невозможно. Одним из методов аналитического и численного исследования физических систем, является метод динамики частиц (МДЧ). Согласно этому методу тела, входящие в рассматриваемую систему, представляются как совокупности частиц, движущихся согласно классическим уравнениям динамики под действием заданных законов межчастичного взаимодействия. МДЧ позволяет описывать такие эффекты, как пластичность, образование трещин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы [31]. Как правило, межчастичное взаимодействие представляет собой взаимодействие частиц посредством заданного потенциала (к примеру, потенциала Леннарда-Джонса, Ми, Морзе, Терсоффа, погруженного атома и др.). Потенциал взаимодействия в МДЧ играет ту же роль, что и тензорные определяющие уравнения в механике сплошной среды, но его вид несопоставимо проще. Конкретный вид потенциала межчастичного взаимодействия определяется из сравнения механических свойств реального и компьютерного материалов. Для простейших характеристик, таких как, например, упругие модули, это сравнение может быть проведено аналитически. В остальных случаях соответствие устанавливается на основе тестовых компьютерных экспериментов.

Целью данной работы является создание модельных материалов, которые затем могут быть использованы, с помощью компьютерных методов основанных на динамике дискретных частиц, в моделировании процессов деформирования и раз-

рушения хрупких гранулированных материалов.

Стоит отметить, что есть несколько определений того, что такое хрупкие и гранулированные материалы. Представим наиболее распространенные версии и отметим те, что будут использоваться в данной работе. В [18] под хрупкостью материала подразумевается сохранение им свойства упругости вплоть до момента разрушения; в [19] под хрупкостью материала подразумевается малость деформаций (до 1%), предшествующих разрушению при одноосном растяжении. Вообще говоря, деление материалов на хрупкие и пластичные довольно условно, т.к. поведение материала в натурных экспериментах может сильно зависеть от его температуры, скорости и вида нагружения, а также от других факторов. В связи с этим, правильнее говорить о хрупком характере разрушения материала. Материал, описанный в первой части работы согласуется с обоими определениями хрупкости. Материал, описанный во второй части работы не исследуется на разрушение, однако при введении соответствующих критериев разрушения (к примеру, по достижении максимальной деформации на растяжения материала), также будет являться хрупким. Гранулированным материалом считается большой агломерат дискретных макроскопических частиц [20], [21], [22]. В первой части работы гранулы будут представляться в виде набора частиц, а из гранул будет составлен модельный материал. С помощью такого подхода можно исследовать внутреннюю микроструктуру гранул, их взаимодействие (в т.ч. слипание) и разрушение. Также в первой части работы под гранулами можно подразумевать кластеры/кристаллы, которые входят в состав поликристалла. Во второй части работы сами частицы, между которыми будет строиться закон взаимодействия, будут представлять из себя гранулы. Соответственно по представленному выше определению рассматриваемые в данной работе материалы являются гранулированными. В первой части работы гранулы не притягиваются (а только отталкиваются или слипаются), во второй части работы гранулы взаимодействуют абсолютно упруго (по аналогии с [41]), т.к. считаются соединенными связью из некоего упругого материала. Согласно терминологии в данной работе исследуется материал с когезией между гранулами. Считается, что свойства гранулированных материалов определяются в первую очередь двум причинам: малое влияние температурных факторов на движение гранул и диссипативное взаимодействие между гранулами (из-за сухого трения между гранулами и неупругости их столкновений). Однако в данной работе дополнительно не будут вводиться силы трения между гранулами, т.к. в первой части работы энергия взаимодействия (столкновения) гранул переходит в тепловое движение частиц, составляющих гранулы, а во второй части работы исследуется только упругая составляющая взаимодействия между гранулами (упругая

связь), которая при моделировании реальных гранулированных материалов может быть дополнена взаимодействием Герца-Миндлина [23], отвечающим за контактное взаимодействие гранул (в т.ч. за трение между ними). Отметим, что в российской научной школе для гранулированных материалов используется также термин "сыпучие тела"[21], который, однако, не подходит к телам, исследуемым в данной работе.

Есть много работ, посвященных дискретному моделированию гранулированных материалов: с помощью клеточных автоматов [24], с помощью метода молекулярной динамики, метода дискретных элементов, а также континуальных методов (подробный литературный обзор и способы перехода от дискретного к континуальному описанию есть в [25]). В данной работе для моделирования будут использоваться две разновидности метода динамики частиц. В первой части работы — метод молекулярной динамики, во второй части работы — метод дискретных элементов.

Выходя за рамки данной работы отметим: материал, разработанный в первой части работы, используется при создании модели вибрационного сверления в рамках совместного проекта кафедры "Теоретическая Механика" и научной группы Resonance Enhanced Drilling Абердинского университета; взаимодействие, разработанное во второй части работы, используется для моделирования керамико-полимерных композитов в рамках совместного проекта кафедры "Теоретическая Механика" и Institute of Solids Process Engineering and Particle Technology (SPE) Гамбургского технического университета.

2 Безмоментный модельный материал

2.1 Введение

Методы, основанные на дискретном описании исследуемого материала (метод динамики частиц, метод дискретных элементов, подвижные клеточные автоматы и пр.) широко используются для компьютерного моделирования гранулированных материалов. Данной тематике посвящены обзорные статьи [1] и [9] в которых представлен большой литературный обзор а также используемые для описания гранулированных материалов модели межчастичного взаимодействия. При этом в большинстве работ ([3], [41], [4]) гранулы представляются в виде отдельных частиц, а не в виде набора частиц, как это будет сделано далее в данной работе. Существующие модели взаимодействия гранул уже исследованы и для них найдены соответствия между микропараметрами материалов и их макропараметрами. Так в работе [2] представлены алгоритмы калибровки микропараметров модельных материалов исходя из лабораторных экспериментов (одноосное и трехосное нагружение).

Однако есть и работы в которых гранулы представляются в виде наборов частиц. Так в работе [5] гранулы и связующее их вещество дискретизируются (разбиваются на частицы) и затем исследуется возможность моделирования таких гетерогенных хрупких структур. Существует много работ в которых гранулы состоят из частиц, но моделируются при этом не горные породы, а металлы в которых гранулы упорядочены в поликристаллическую решетку [6], [7]. В работе [6] исследуется многомасштабное моделирование разрушения поликристаллических металлов, для чего используется метод динамики частиц и метод конечных элементов. Также в работе [6] дан широкий обзор методов и подходов к многомасштабному моделированию. В работе [7] метод динамики частиц используется для исследования атомарной структуры границ зерен/гранул. Есть также работы описывающие поликристаллические структуры безотносительно их применения к моделированию того или иного материала [8], [31].

В данной работе будет описан процесс создания поликристаллического образца, проведение над ним модельных тестов и дальнейшее сопоставление модельных параметров образца реальным, из сравнения модельных характеристик с таким для горных пород. Метод создания и тестирования поликристалла а также преобразования межчастичного взаимодействия основаны на идеях и методах, предложенных в [31]. При создании поликристалла используются не диаграммы Вороного, а метод предполагающий разогрев монокристаллического модельного материала и его последующее охлаждение.

Результаты экспериментальных исследований горных пород представлены в работах [10], [11], [12], [13], [14]. Особенno отмeтим работы, посвященные сверлению горных пород: [15], [16], [17]. Свойства хрупких гранулированных материалов из данных работ могут быть использованы для калибровки предложенного далее модельного материала.

2.2 Метод динамики частиц и основные обозначения

Объектом исследования является дискретный модельный материал. Для его расчета используется частный случай метода динамики частиц — метод молекулярной динамики. В рамках данного метода материал представляется в виде совокупности частиц, взаимодействующих друг с другом посредством заданного закона взаимодействия. Как правило, задается потенциал межчастичного взаимодействия, исходя из которого высчитываются силы (в общем случае и моменты) взаимодействия между частицами. Вначале создается исходная конфигурация частиц (положение частиц в пространстве), при этом каждой частице присваивается некоторая начальная скорость, которая состоит из двух компонент: определенная скорость частицы, как части единого целого модельного объекта (рассчитывается исходя из поступательной скорости и угловой скорости модельного объекта), и случайная скорость частицы, характеризующая хаотическое движение частиц и моделирующая таким образом тепловое движение частиц в модельном объекте¹. Хаотическая (случайная) составляющая скорости характеризуется девиацией скоростей частиц (7). Для простоты масса всех частиц одного модельного материала считается одинаковой. После задания начальных условий моделирование проводится итерационно: на каждой итерации рассчитываются силы межчастичного взаимодействия и затем для каждой частицы численно интегрируются уравнения движения:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1, n \neq k}^N F(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|) \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|} + \mathbf{F}_k^{\text{ex}}(\mathbf{r}_k, \dot{\mathbf{r}}_k), \quad \text{для } k = \overline{1, N} \quad (1)$$

где m — масса частицы (для простоты массы всех частиц считаются одинаковыми), \mathbf{r}_k — радиус-вектор k -ой частицы, N — число частиц, $F(r) = -\Pi'(r)$ — сила межчастичного взаимодействия, $\Pi(r)$ — потенциал взаимодействия, $\mathbf{F}_k^{\text{ex}}(\mathbf{r}_k, \dot{\mathbf{r}}_k)$ — суммарная внешняя сила, действующая на k -ую частицу (в дальнейшем будет использоваться сила вязкого трения). Для удобства, многочисленные обозначения, представленные в тексте данной части работы, вынесены в приложение В.

¹направление хаотической составляющей скорости для каждой частицы выбирается равновероятно, а модуль хаотической составляющей скорости не превышает некоторого заданного значения

Посредством численного интегрирования рассчитываются положения частиц и их скорости в следующий момент времени, а после этого итерация повторяется. В данной работе в качестве метода численного интегрирования используется полунеявный метод Эйлера [26]:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_k(t + \tau) &= \mathbf{v}_k(t) + \mathbf{w}_k(t)\tau, \\ \mathbf{r}_k(t + \tau) &= \mathbf{r}_k(t) + \mathbf{v}_k(t + \tau)\tau, , \quad \text{для } k = \overline{1, N}\end{aligned}\tag{2}$$

где t — модельное время в задаче, τ — шаг численного интегрирования, $\mathbf{r}_k(t)$ — радиус-вектор k -ой частицы в момент времени t , $\mathbf{v}_k(t)$ — скорость k -ой частицы в момент времени t , $\mathbf{w}_k(t)$ — ускорение k -ой частицы в момент времени t , которое вычисляется из соответствующего уравнения движения (1). Данный метод численного интегрирования обладает двумя важными для моделирования свойствами: ускорение частицы рассчитывается единожды (к примеру, в отличие от метода Рунге-Кутта), как и другие методы из семейства Leap Frog полунеявный метод Эйлера сохраняет среднее значение суммарной энергии системы частиц (к примеру, метод интегрирования Эйлера привносит энергию в систему) [26]. Во второй части работы для описания вращательных движений частиц рекомендуется использовать кватернионы, т.к. с помощью данного описания проще всего добиться высокой точности расчетов, по сравнению с использованием углов поворотов и тензоров поворотов [27].

В данной работе для задания взаимодействия между частицами будет использоваться частоупотребимый, в силу своей вычислительной простоты, потенциал Леннарда-Джонса:

$$\Pi_0(r) = D_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right],\tag{3}$$

где r — расстояние между двумя частицами, $\Pi_0(r)$ — зависимость потенциала Леннарда-Джонса от расстояния, D_0 — глубина потенциальной ямы или энергия связи потенциала или энергия диссоциации потенциала Леннарда-Джонса, a — равновесное расстояние или длина связи. Потенциал задается с точностью до константы: обычно (и в данной работе) константа берется так, чтобы потенциал на бесконечности равнялся нулю. Сила взаимодействия Леннарда-Джонса рассчитывается по следующей формуле:

$$F_0(r) = -\Pi'_0(r) = \frac{12D_0}{a} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r} \right)^7 \right],\tag{4}$$

где $F_0(r)$ — зависимость силы Леннарда-Джонса от расстояния, $'$ — операция дифференцирования по r ($' = \frac{\partial}{\partial r}$).

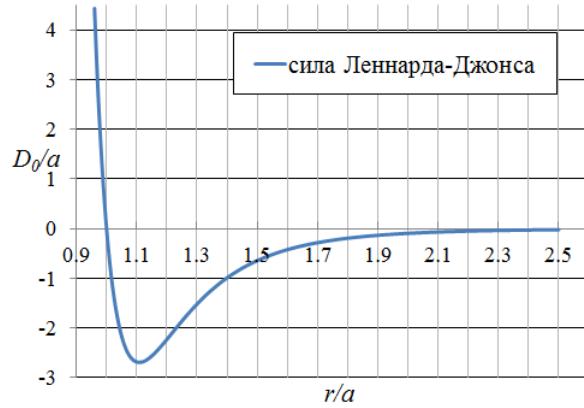


Рис. 1: График силы межчастичного взаимодействия Леннарда-Джонса

В методе динамики частиц большую часть времени расчета занимает вычисление сил взаимодействия между каждой парой частиц. Исходя из быстрого убывания силы взаимодействия с расстоянием (рис. 1) логично ограничить расстояние взаимодействия. Для этого в расчетах с использованием метода динамики частиц вводится радиус обрезания — максимальное расстояние между частицами на котором еще рассчитывается взаимодействие между ними, т.е. если расстояние между частицами больше чем радиус обрезания, то сила взаимодействия равна нулю: рис.2. Обозначим радиус обрезания для взаимодействия Леннарда-Джонса через a_{cut_0} . Чтобы не было разрыва функции силы взаимодействия от

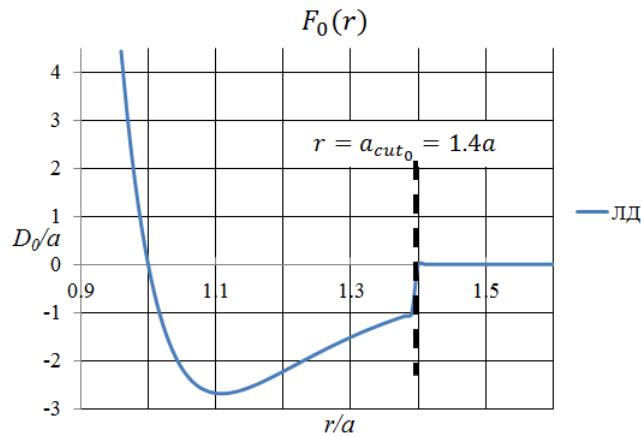


Рис. 2: Обрезание силы межчастичного взаимодействия на примере силы Леннарда-Джонса

межчастичного расстояния при $r = a_{cut_0}$ используются различные сглаживающие функции, с помощью которых сила плавно сглаживается в ноль. Различные виды сглаживающих функций представлены в [31] и [32], используемая в данной рабо-

те сглаживающая функция будет представлена далее. Ограничив максимальное расстояние взаимодействия между частицами, мы, тем не менее, не освобождаем себя от расчета расстояния между каждой парой частиц. Для того, чтобы не рассчитывать расстояние между заведомо далекими друг от друга частицами, можно разбить расчетную область на сетку с шагом a_{cut_0} , затем создать двумерный массив из списков частиц, находящихся в каждой из клеток сетки. После выполнения данной процедуры достаточно рассчитывать расстояние от выбранной частицы только до частиц из текущей клетки и частиц из соседних клеток к текущей (рис. 3), что осуществляется перебором по списку частиц в данной расчетной клетке и в соседних клетках к данной.

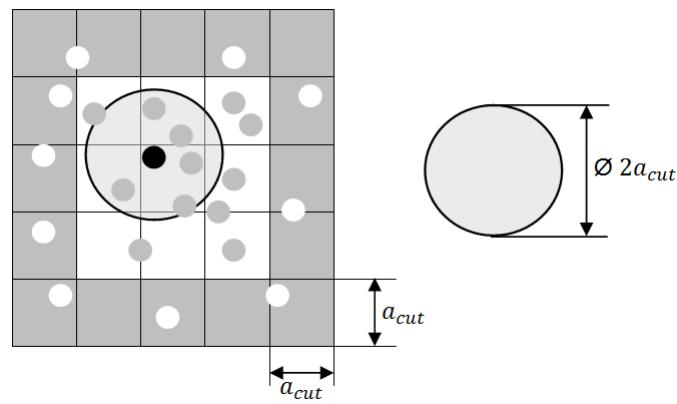


Рис. 3: Чёрная частица взаимодействует только с серыми частицами из своей и соседней к своей клеток

Для выбора единиц измерения микропараметров моделируемого объекта проведем линеаризацию взаимодействия Леннарда-Джонса вблизи положения равновесия $r = a$. Рассмотрим одномерную систему из одной частицы, которая находится под воздействием линеаризованной, вблизи положения равновесия, силы Леннарда-Джонса и линейной силы вязкого трения. Введя обозначение для координаты частицы $x = r - a$, можно получить следующее уравнение движения:

$$m\ddot{x} + b_{fric}\dot{x} + C_0x = 0, \quad (5)$$

где $x = r - a$ — координата частицы (равновесное положение частицы соответствует $x = 0$), m — масса частицы, b_{fric} — коэффициент линейного вязкого трения, $C_0 = \Pi''_0(a)$ — коэффициент жесткости межчастичной связи Леннарда-Джонса вблизи положения равновесия, \cdot — операция дифференцирования по времени. Критический коэффициент линейного вязкого трения при котором частица перестает совершать периодические колебания (начинает двигаться апериодически) обозначим B_0 . Для данной системы $B_0 = 2\sqrt{mC_0}$.

Таким образом, ниже перечислены необходимые далее параметры модельного материала Леннарда-Джонса [31]:

$$\begin{aligned}
C_0 &= \Pi_0''(a) = \frac{72D_0}{a^2}, & T_0 &= 2\pi\sqrt{\frac{m}{C_0}}, \\
B_0 &= 2\sqrt{mC_0}, \\
b_0 &= \sqrt[6]{\frac{13}{7}}a, & f_* &= |F_0(b_0)| \approx 2.7\frac{D_0}{a}, \\
v_{dis_0} &= \sqrt{\frac{2D_0}{m}}, & \bar{\mathbf{v}} &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{v}_k, \\
v_{long2D_0} &= \sqrt{\frac{9C_0}{8m}}a, & V_0 &= \frac{\sqrt{3}}{2}a^2, \\
k_{v_0} &= \frac{v_{long2D_0}}{v_{dis_0}} = \frac{9}{\sqrt{2}} \approx 6.36
\end{aligned} \tag{6}$$

где $\Pi_0(r)$ — потенциал Леннарда-Джонса, C_0 — жесткость связи Леннарда-Джонса вблизи положения равновесия, T_0 — период колебания частицы вблизи положения равновесия в неподвижном потенциальном поле Леннарда-Джонса, m — масса частицы, B_0 — критический коэффициент линейного вязкого трения для частицы при котором она перестает совершать колебательные движения под действием силы Леннарда-Джонса вблизи положения равновесия, b_0 — расстояние разрыва связи Леннарда-Джонса, на котором производная от силы взаимодействия обращается в ноль ($F'_0(b_0) = 0$), f_* — максимальная сила притяжения для взаимодействия Леннарда-Джонса, v_{dis_0} — скорость диссоциации для взаимодействия Леннарда-Джонса (минимальная скорость, которую надо сообщить неподвижной частице, находящейся в положении равновесия, чтобы она улетела на бесконечность), $\bar{\mathbf{v}}$ — скорость центра масс модельного объекта, v_{long2D_0} — скорость продольной волны в двумерной гексагональной плотноупакованной решетке (ГПУ-решетка, в двумерном случае называется также треугольной), V_0 — элементарный объем, занимаемый одной частицей в двумерной треугольной (ГПУ) решетке, k_{v_0} — коэффициент динамичности для двумерного материала Леннарда-Джонса. Девиация скоростей частиц v_{dev} считается как среднее квадратичное отклонение скоростей частиц от скорости центра масс модельного объекта:

$$v_{dev} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{v}_k - \bar{\mathbf{v}})^2} \tag{7}$$

Напряжения в образце в точке расположения какой-либо частицы рассчитываются по следующей формуле:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}_k) = -\frac{1}{2V_0} \sum_{n, |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_k| < a_{cut}} F(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_k|) \frac{(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_k)}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_k|} (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_k), \tag{8}$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ — тензор напряжений Гамеля, Каппуса, Треффтца [29], a_{cut} — радиус обрезания для используемого взаимодействия. Интенсивность σ_{int} напряжения $\boldsymbol{\sigma}$ считается по формуле (9):

$$\sigma_{int}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}(|\sigma_x| + |\sigma_y|), \quad (9)$$

где σ_x и σ_y — соответствующие компоненты тензора напряжений. В качестве единицы измерения напряжения в материале возьмем величину

$$\sigma_* = \frac{f^*}{a} \quad (10)$$

равную максимальной силе межчастичного притяжения на равновесное расстояние.

Часто в расчетах с использованием метода динамики частиц используются периодические граничные условия. Идея данных граничных условий состоит в том, что частицы на одной стороне образца взаимодействуют с частицами на противоположной стороне образца (программными средствами это достигается копированием приграничных частиц на противоположную сторону образца).

2.3 Используемое парное силовое взаимодействие

В данной части работы исследуется двумерный модельный материал без учета вращательных степеней свободы частиц, т.е. каждая частица материала обладает только двумя поступательными степенями свободы. Здесь и далее параметры идеального монокристаллического модельного материала будем обозначать волной сверху (к примеру, \tilde{a}_{cut}). Частицы модельного материала взаимодействуют посредством силы \tilde{F} , которая получается из F_0 в результате последовательных преобразований сглаживания (11) и сжатия (12):

$$F_1(r) = \begin{cases} F_0(r) & \text{при } 0 < r \leq b_0; \\ k(r)F_0(r) & \text{при } b_0 < r < a_{cut_0}; \\ 0 & \text{при } a_{cut_0} \leq r, \end{cases} \quad b_0 = \sqrt[6]{\frac{13}{7}}a, \quad (11)$$

где $k(r)$ — сглаживающая функция.

$$\tilde{F}(r) = F_1(c(r - a) + a), \quad (12)$$

где c — коэффициент сжатия силы взаимодействия. Преобразование (12) имеет смысл при $c > 0$, а при $c > 1$ преобразование становится сжимающим. Именно сжатие взаимодействия будет рассматриваться в дальнейшем, т.к. оно позволяет достичь критической деформации на растяжение модельного материала сравнимой с результатами натурных экспериментов над хрупкими, в первую очередь горными породами, для которых она составляет порядка 0.001-0.01 [?].

Сглаживающая функция $k(r)$, используемая в данной работе, имеет вид, предложенный в работе [32]:

$$k(r) = (1 + \alpha) \left(1 - \left(1 + \sqrt{\frac{\alpha}{1 + \alpha}} \right) \left(\frac{r^2 - b_0^2}{a_{cut_0}^2 - b_0^2} \right)^2 \right)^2 - \alpha, \quad (13)$$

где α — положительный коэффициент, определяющий хрупкость материала. Примеры сглаживания силы взаимодействия Леннарда-Джонса при $a_{cut_0} = 1.4a$ приведены на рис. 4. При сглаживании силы взаимодействия из параметров (6) изменяется только энергия связи/диссоциации D_1 (становится меньше D_0) и, вследствие этого, скорость диссоциации и коэффициент динамичности. Далее будет представлена таблица значений D_1 для частоупотребимых значений a_{cut_0} и α .

Увеличение α приводит к возникновению второй зоны отталкивания на графике зависимости силы межчастичного взаимодействия от расстояния (см. рис. 4). Коэффициент α имеет физическое ограничение сверху для различных a_{cut_0} . В рассматриваемом далее случае, при $a_{cut_0} = 1.4a$ максимальный $\alpha \approx 2.16$. При $\alpha > 2.16$ высота горба отталкивания станет больше глубины впадины притяжения; с энергетической точки зрения: энергия частицы в положении равновесия ($r = a$) станет больше свободной энергии (энергия частицы при $r \geq cut_0$). Таким образом, если какой-то участок материала снабдить излишком энергии, достаточным для преодоления частицами потенциального барьера, то материал в ходе моделирования может "сдетонировать", т.к. частицам энергетически выгоднее быть порознь, а не в составе решетки модельного материала. Для радиуса обрезания $a_{cut_0} = 2.1a$ максимальный $\alpha \approx 5.9$ (данные значения рассчитаны в работе [30]). Использование сглаживающей функции (13) при $\alpha > 0$ позволяет моделировать незарастающие в материале трещины, в отличие от случая $\alpha = 0$, т.к. при $\alpha > 0$ возникает дополнительная зона отталкивания, которую надо преодолеть (сжать края трещины друг к другу), чтобы трещина заросла. Это согласуется с экспериментальными данными: сами по себе трещины в хрупких материалах не зарастают, а при сжатии материала - могут уменьшиться и даже исчезнуть [33]. Примеры сжатия силы взаимодействия Леннарда-Джонса при $a_{cut_0} = 1.4a$ приведены на рис. 5. Отметим, что сглаженное взаимодействие F_1 является частным случаем сжатого сглаженного взаимодействия \tilde{F} при коэффициенте сжатия $c = 1$. При сжатии силы изменяются практически все параметры материала (6). Рассмотрим, для начала, каким образом изменяется энергия связи. Для этого рассчитаем зависимость потенциала

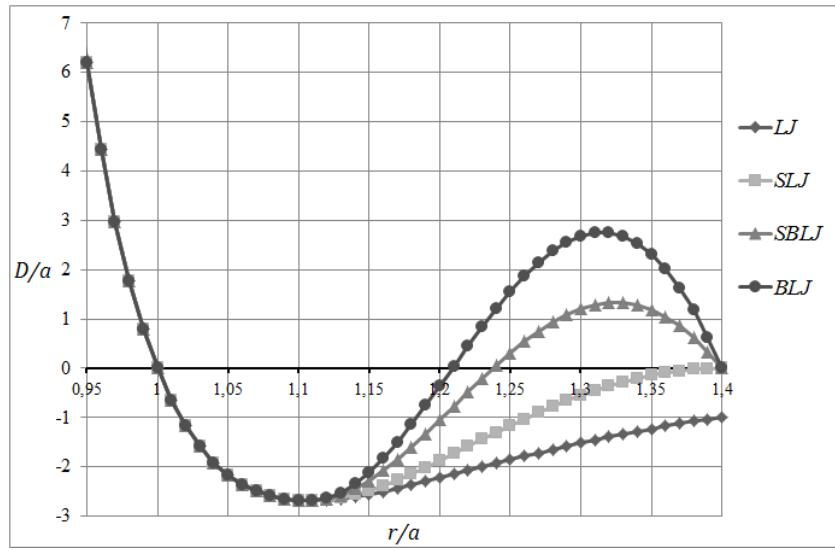


Рис. 4: Различные виды сил межчастичного взаимодействия: сила Леннарда-Джонса (LJ), сглаженная сила Леннарда-Джонса (SLJ , $\alpha = 0$), полухрупкая сила Леннарда-Джонса ($SBLJ$, $\alpha = 1$), хрупкая сила Леннарда-Джонса (BLJ , $\alpha = 2$)

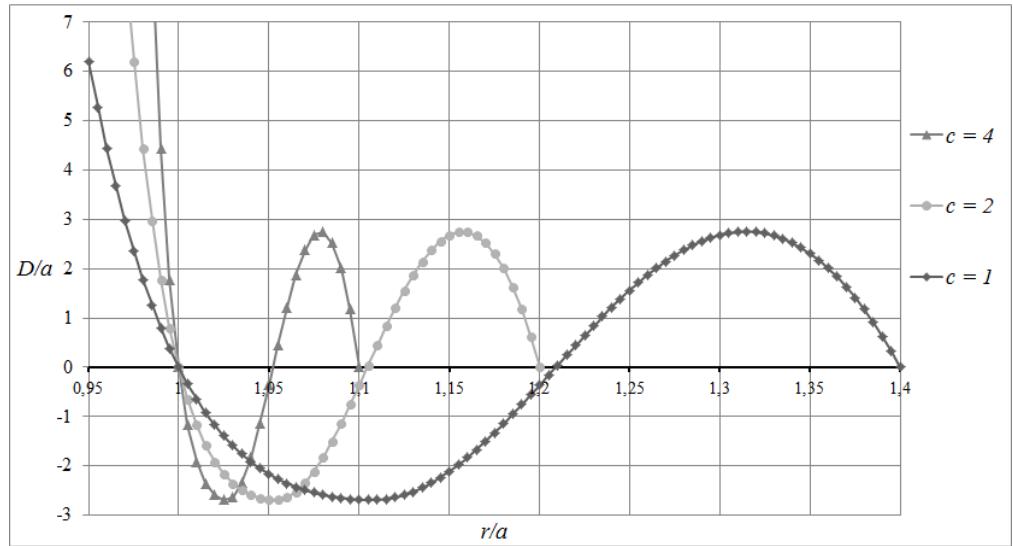


Рис. 5: Несколько примеров сжатия сглаженной силы взаимодействия Леннарда-Джонса при $\alpha = 2$ и $a_{cut_0} = 1.4a$. Коэффициенты сжатия 1, 2 и 4

$\tilde{\Pi}$ от параметров α и c :

$$\begin{aligned} \Pi_1(r) &= \int_r^{a_{cut_0}} k'(r) \Pi_0(r) dr + k(r) \Pi_0(r) - k(a_{cut_0}) \Pi_0(a_{cut_0}), \\ \tilde{\Pi}(r) &= \frac{1}{c} \Pi_1(c(r-a) + a) \end{aligned} \tag{14}$$

Для $\alpha > 0$ потенциал $\Pi_1(r)$ будет иметь помимо минимума в точке $r = a$

локальный максимум в точке $r_{loc\ max_1} = \sqrt{\sqrt{\frac{1-A}{1+A}}(a_{cut_0}^2 - b_0^2) + b_0^2}$, где $A = \sqrt{\frac{\alpha}{1+\alpha}}$ (см. рис. 6), значит энергия связи сглаженного взаимодействия $D_1 = \Pi_1(r_{loc\ max_1}) - \Pi_1(a)$.

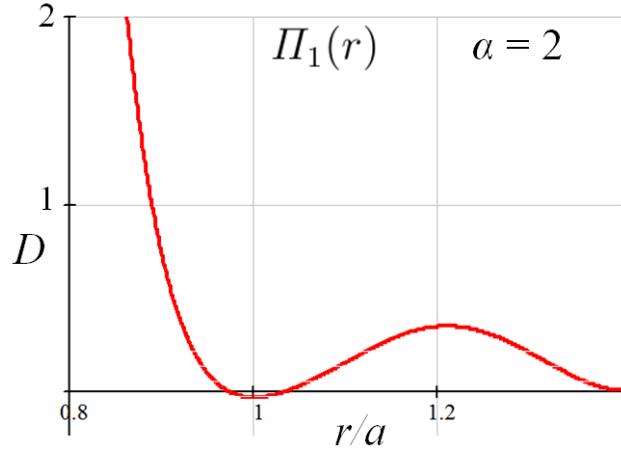


Рис. 6: Потенциал сглаженной силы взаимодействия Леннарда-Джонсса при $\alpha = 2$ и $a_{cut_0} = 1.4a$

Для сжатого взаимодействия локальный максимум достигается на расстоянии $\tilde{r}_{loc\ max} = \frac{1}{c}(r_{loc\ max_1} - a) + a = \frac{1}{c} \left(\sqrt{\sqrt{\frac{1-A}{1+A}}(a_{cut_0}^2 - b_0^2) + b_0^2} - a \right) + a$. Для несжатого ($c = 1$) сглаженного взаимодействия получена таблица энергий связи (такая энергия, которую необходимо сообщить частице, чтобы она вылетела из положения равновесия) — табл.1. Особый интерес к радиусам обрезания $a_{cut_0} = 1.4$ и

a_{cut_0}	α	$r_{loc\ max_1}$	D_1
1.4a	0	1.4a	0.56754
1.4a	0.5	1.268a	0.46122
1.4a	1	1.238a	0.42328
1.4a	1.5	1.22a	0.39934
1.4a	2	1.209a	0.38233
1.4a	2.164	1.206a	0.37772
2.1a	0	2.1a	0.88437
2.1a	1	1.596a	0.75995
2.1a	2	1.497a	0.70153
2.1a	3	1.443a	0.66103
2.1a	4	1.407a	0.63032
2.1a	5	1.381a	0.60580
2.1a	5.87	1.364a	0.58798

Таблица 1: Энергия связи сглаженного взаимодействия для различных a_{cut_0} и α при $c = 1$

$a_{cut_0} = 2.1$ обусловлен тем фактом, что в двумерном случае при $a_{cut_0} = 1.4$ частица взаимодействует только с частицами из своей первой координационной сферы, а при $a_{cut_0} = 2.1$ — с частицами из первой, второй и третьей координационных сфер. Для $c \neq 1$ энергию связи \tilde{D} можно пересчитать по формуле:

$$\tilde{D} = \frac{D_1}{c} \quad (15)$$

При сжатии силы взаимодействия очевидным образом изменяются расстояние разрыва связи и радиус обрезания:

$$\tilde{b} = \frac{b_0 - a}{c} + a, \quad \tilde{a}_{cut} = \frac{a_{cut_0} - a}{c} + a \quad (16)$$

Жесткость сжатого взаимодействия \tilde{C} увеличивается в c раз относительно несжатого взаимодействия т.к. $\tilde{C} = -\tilde{F}'(a) = -cF'_0(a) = c C_0$. Изменение жесткости связи вблизи положения равновесия ведет к изменению остальных параметров модельного материала:

$$\begin{aligned} \tilde{T} &= 2\pi \sqrt{\frac{m}{\tilde{C}}} = \frac{T_0}{\sqrt{c}}, \\ \tilde{B} &= 2\sqrt{m\tilde{C}} = \sqrt{c}B_0, \\ \tilde{f}_* &= |\tilde{F}(\tilde{b})| = f_*, \\ \tilde{v}_{long2D} &= \sqrt{\frac{9\tilde{C}}{8m}}a = \sqrt{c}v_{long2D_0}, \\ \tilde{v}_{dis} &= \sqrt{\frac{2\tilde{D}}{m}}, \\ \tilde{k}_v &= \frac{\tilde{v}_{long2D}}{\tilde{v}_{dis}} = c \frac{v_{long2D_0}}{\sqrt{\frac{2D_1}{m}}} \end{aligned} \quad (17)$$

Отметим, что единица измерения силы f_* и единица измерения напряжений σ_* не меняются при сжатии и сглаживании взаимодействия, т.е. не зависят от c и α :

$$\begin{aligned} \tilde{f}_* &= f_*, \\ \tilde{\sigma}_* &= \sigma_*; \end{aligned} \quad (18)$$

Полученные формулы (17) и значения в таблице 1 были сверены с результатами компьютерного моделирования, которое выявило соответствие аналитических и рассчитанных в ходе моделирования значений с погрешностью менее 3%.

В данном пункте описан закон межчастичного взаимодействия, который в следующем пункте будет использован для создания модельного материала.

2.4 Кристаллическая решетка

Зафиксируем желаемые параметры силы межчастичного взаимодействия. В качестве радиуса обрезания взаимодействия возьмем $a_{cut_0} = 1.4a$, что обусловлено упрощением вычислительной сложности задачи. При данном радиусе обрезания учитываются только ближайшие соседи частицы в двумерной ГПУ решетке. Желаемые коэффициенты хрупкости и сжатия силы взаимодействия обозначим через α и β соответственно. Таким образом, остается только упаковать частицы в желаемую структуру, чтобы получить определенный модельный материал. В данной работе рассматривается поликристаллическая структура модельного материала. При этом поликристалл состоит из гранул/клusterов, а гранулы/клusterы состоят из частиц. Данный подход планируется применить в дальнейших работах для описания деформирования и разрушения горных пород. При этом с помощью предложенного выше подхода помимо макроскопического поведения модельного материала можно также исследовать микроскопическое поведение (к примеру, взаимодействие гранул друг с другом, их разрушение и слипание).

Есть несколько подходов к созданию поликристаллических структур [31],[34]. Метод, основанный на диаграммах Вороного [34], состоит в следующем: сначала на плоскости случайным образом располагается множество точек Q ; затем создается такое разбиение плоскости, что каждая область этого разбиения образует множество точек, более близких к одному из элементов множества точек Q , чем к любому другому элементу множества точек Q (рис.7). После данного разби-

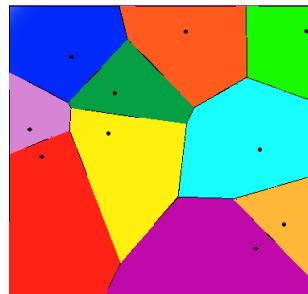


Рис. 7: Пример диаграммы Вороного

ния каждая подобласть заполняется плотноупакованным набором частиц со случайной ориентацией упаковки. Метод создания поликристалла, предложенный в [31] состоит в создании монокристаллической решетки, ее разогреве выше температуры плавления, а затем постепенном охлаждении материала. Данный метод намного естественнее, чем метод диаграмм Вороного и более прост в реализации, поэтому именно метод из [31] будет в дальнейшем взят за основу при создании

поликристаллической структуры.

Молекулярно-динамические опыты показали, что нельзя сразу создать материал с желаемыми параметрами хрупкости $\hat{\alpha}$ и сжатия силы \hat{c} , поэтому далее будет представлена многоэтапная система создания образца модельного материала. Напомним, что волной сверху (к примеру, \tilde{b}) обозначаются величины, соответствующие идеальному монокристаллическому материалу. Стоит понимать, что характеристики исследуемого далее поликристаллического модельного материала будут отличаться от характеристик монокристалла.

Поликристаллическая решетка любых размеров с гранулами (рис. 12) создается по следующей технологии. Сначала частицы упорядочиваются в монокристаллическую ГПУ (треугольную) решетку с дефектами (рис. 8). Под дефектами подразумеваются удаленные из монокристалла частицы, число которых равно общему числу частиц, умноженному на задаваемую пористость образца. В дальнейшем пористость считается как $\frac{V_\Sigma - NV_0}{V_\Sigma} \cdot 100\%$, где V_Σ — площадь расчетной области, N — число частиц в расчетной области, V_0 — элементарный "объем" (площадь поверхности), занимаемый одной частицей в двумерной ГПУ решетке. Границные усло-

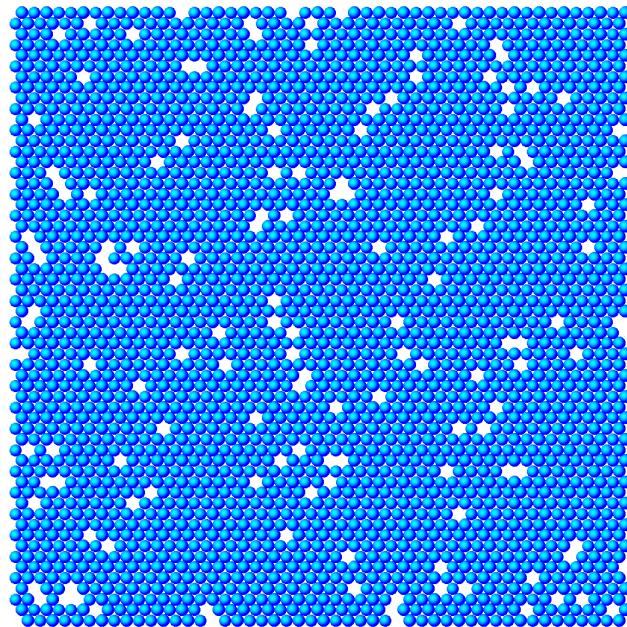


Рис. 8: Монокристалл с 5% пористостью

вия — периодические, что позволит, при желании, создать сколь угодно большой поликристаллический образец копируя созданный по данной технологии поликристалл. Начальные скорости частиц выбираются из равномерного случайного распределения таким образом, чтобы девиация скоростей частиц $v_{dev} = v_{rand}$. Считая, что температура в данной точке пространства пропорциональная средней кине-

тической энергии частиц в близлежащей области, задание большой хаотической составляющей скоростей частиц $v_{rand} > \tilde{v}_{dis}$ соответствует моментальному разогреву материала, которое приводит к тому, что в ходе последующего молекулярно-динамического расчета нарушается монокристаллическая структура образца. Стоит отметить, что скорость диссоциации для взаимодействия Леннарда-Джонса $v_{dis_0} > \sqrt{c}\tilde{v}_{dis}$. К силам потенциального взаимодействия между частицами образца добавляется диссипативное слагаемое $-B\dot{\mathbf{r}}$, с помощью которого из материала отводится энергия (материал охлаждается). B — параметр влияющий на скорость охлаждения материала. Таким образом, уравнение движения каждой частицы принимает вид:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1, n \neq k}^N \tilde{F}(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|) \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|} - B\dot{\mathbf{r}}_k, \quad \text{для } k = \overline{1, N} \quad (19)$$

где m — масса частицы, \mathbf{r}_k — радиус-вектор k -ой частицы, N — число частиц, $\tilde{F}(r)$ — модельная сила взаимодействия частиц (сжатая сглаженная сила Леннарда-Джонса). Отметим, что сила \tilde{F} и другие параметры материала будут изменяться от этапа к этапу т.к. зависят от параметров α и c согласно формулам (17). Для удобства последующего использования данной работы все параметры также будут представлены через неизменные при сглаживании и сжатия взаимодействия микропараметры материала a, f_*, m .

Далее на первом этапе после мгновенного разогрева образца производится молекулярно-динамический расчет системы при $\alpha = 0$ и $c = 1$, с учетом сил линейного вязкого трения до момента, когда девиация скоростей частиц образца v_{dev} станет меньше предельного значения девиации v_{dev}^* . Коэффициент вязкого трения на данном этапе равен B . Параметры моделирования для первого этапа сведены в таблицу 2 В результате данного этапа в образце формируются зер-

Параметры 1го этапа	Символ	Значение	Значение
Начальная девиация скоростей	v_{rand}	$3v_{dis_0}$	$2.5868\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Коэффициент сжатия силы	c	1	1
Коэффициент хрупкости материала	α	0	0
Коэффициент отвода тепла	B	$0.08B_0$	$0.8278\sqrt{\frac{mf_*}{a}}$
Предельное значение девиации	v_{dev}^*	$0.02v_{dis_0}$	$0.01725\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Шаг интегрирования	τ	$0.01T_0$	$0.012145\sqrt{\frac{am}{f_*}}$

Таблица 2: Значение параметров моделирования на первом этапе создания поликристалла

на/гранулы (рис.9), размеры которых зависят от коэффициента вязкого трения (скорости охлаждения), что более подробно исследовано в [31] и [35].

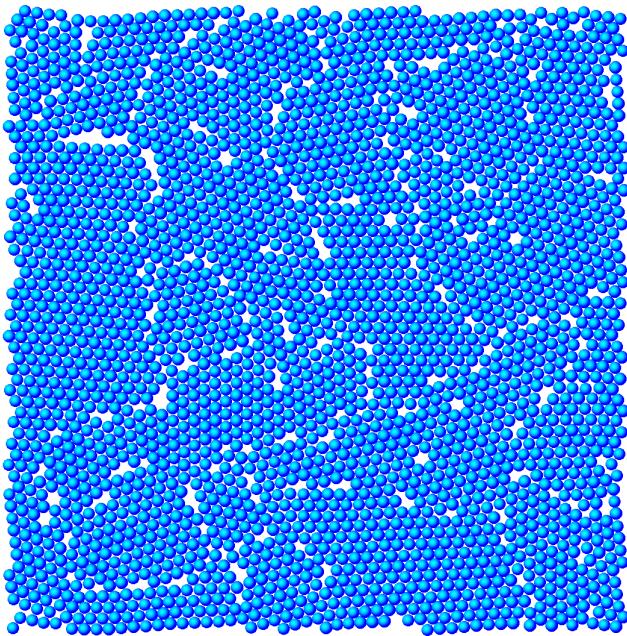


Рис. 9: Образец с 5%-пористостью после моделирования первого этапа при параметрах из таблицы 2

Необходимость первого этапа особенно проявляется при больших $\tilde{\alpha}$ (к примеру, при $\tilde{\alpha} = 2$). Так, на рис.10 представлен результат расчета при котором коэффициент α сразу задавался равным $\tilde{\alpha} = 2$. Как видно из рис. 10, гранулы четко не сформировались. Причина отличия рис.9 и рис.10 состоит в том, что при $\alpha > 0$ сила взаимодействия имеет вторую зону отталкивания (рис.4 при $r_{loc\ max_1} < r < a_{cut_0}$), а при $\alpha = 0$ взаимодействие частиц при любом $r > a$ является притягивающим, что позволяет собраться частицам в гранулы/кластеры. Таким образом, если в ходе первого этапа взять ненулевой коэффициент α — получится аморфный материал (рис. 10).

На втором этапе моделирование продолжается, при этом изменяется только предельное значение девиации скоростей частиц (уменьшается в два раза) и значение коэффициента хрупкости α (с 0 на желаемое $\tilde{\alpha}$). Параметры моделирования на втором этапе сведены в таблицу 3.

Т.к. в ходе первых двух этапов в границы образца были неподвижны (образец был "зажат") после перестройки монокристаллической решетки в поликристаллическую в материале возникают внутренние напряжения (что соответствует реальному поведению материалов). Задача третьего этапа создания модельного материала состоит в том, чтобы достичь нужного коэффициента сжатия силы

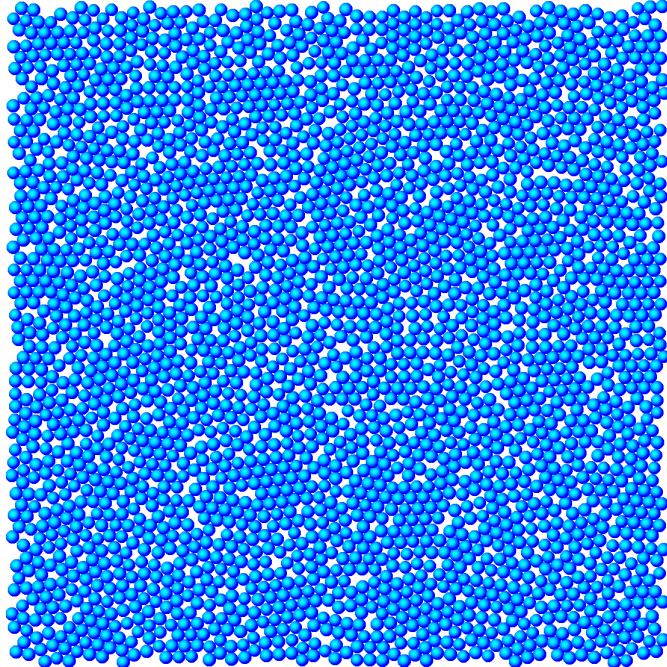


Рис. 10: Образец с 5%-пористостью после моделирования первого этапа при $\alpha = 2$

Параметры 2го этапа	Символ	Значение	Значение
Коэффициент сжатия силы	c	1	1
Коэффициент хрупкости материала	α	$\tilde{\alpha}$	$\tilde{\alpha}$
Коэффициент отвода тепла	B	$0.08B_0$	$0.8278\sqrt{\frac{mf_*}{a}}$
Предельное значение девиации	v_{dev}^*	$0.01v_{dis_0}$	$0.008623\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Шаг интегрирования	τ	$0.01T_0$	$0.012145\sqrt{\frac{am}{f_*}}$

Таблица 3: Значение параметров моделирования на втором этапе создания поликристалла

взаимодействия \tilde{c} (после второго этапа $c = 1$) и избавиться от внутренних напряжений в материале, для чего третий этап разбивается на несколько итераций. В начале каждой итерации коэффициент сжатия силы взаимодействия c увеличивается на Δc (вплоть до \tilde{c}). После чего материал охлаждается и однородно деформируется до момента, когда девиация скоростей частиц образца v_{dev} станет меньше предельного значения девиации v_{dev}^* , а интенсивность напряжений в образце σ_{int} станет меньше предельного значения интенсивности σ_{int}^* . Охлаждение материала производится аналогичным первому и второму этапу образом. Деформирование материала осуществляется посредством наложения на ячейку периодичности однородных деформаций: ε_x вдоль горизонтальной оси x и ε_y вдоль вертикальной

оси y (оси параллельны ребрам ячейки периодичности)

$$\varepsilon_x = -k_\sigma \frac{\sigma_x}{\sigma_0}, \quad \varepsilon_y = -k_\sigma \frac{\sigma_y}{\sigma_0}, \quad k_\sigma = \kappa_\sigma \frac{T_0}{\tau|_{c=1}}, \quad (20)$$

где k_σ — безразмерный коэффициент, определяющий инерционность баростата, κ_σ — баростатический коэффициент [31]. С математической точки зрения, при деформировании ячейки периодичности позиции её границ, а также позиции всех находящихся в ней частиц умножаются на коэффициенты (масштабируются) $1 + \varepsilon_x$ и $1 + \varepsilon_y$ по осям x и y соответственно. Значения параметров моделирования на третьем этапе создания поликристалла занесены в таблицу 4. Разбитие третье-

Параметры 3го этапа	Символ	Значение	Значение
Изменение за итерацию коэффициента сжатия силы	Δc	0.1	0.1
Диапазон изменения коэффициента сжатия силы	c	$1.. \tilde{c}$	$1.. \tilde{c}$
Коэффициент хрупкости материала	α	$\tilde{\alpha}$	$\tilde{\alpha}$
Коэффициент отвода тепла	B	$0.08\sqrt{c}B_0$	$0.8278\sqrt{\frac{cmf_*}{a}}$
Предельное значение девиации	v_{dev}^*	$0.01v_{diso}$	$0.008623\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Предельное значение интенсивности	σ_{int}^*	$0.0001\sigma_0$	$0.0001\frac{f_*}{a}$
Баростатический коэффициент	κ_σ	$0.00003/\sqrt{c}$	$0.00003/\sqrt{c}$
Шаг интегрирования	τ	$0.01T_0/\sqrt{c}$	$0.012145\sqrt{\frac{am}{cf_*}}$

Таблица 4: Значение параметров моделирования на третьем этапе создания поликристалла

го этапа на итерации необходимо, чтобы возникающая между частицами сила не стала чрезмерно большой, что может случиться при одномоментном изменении коэффициента сжатия силы c с 1, к примеру, до 2. Скачок силы возникает т.к. равновесная конфигурация частиц с одним коэффициентом сжатия силы перестает быть равновесной конфигурацией с большим коэффициентом сжатия силы в силу своей исходной неидельности (т.к. в поликристалле при $c = 1$ межчастичные расстояния $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \approx a$, а не $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \equiv a$). По этой же причине необходим учет коэффициента сжатия в баростатическом коэффициенте κ_σ . Также стоит отметить, что при расчете интенсивности не учитываются сдвиговые напряжения в образце, т.к. они получаются достаточно малы и не существенны в дальнейших расчетах.

По результатам третьего этапа параметры взаимодействия c и α достигли желаемых величин \tilde{c} и $\tilde{\alpha}$, а образец охлажден и в нем малы внутренние напряжения. Однако, при этом в ходе итеративного увеличения коэффициента сжатия силы

и последующей разгрузки образца материал "расползся" на отдельные гранулы (рис. 11) и его пористость увеличилась сверх желаемого значения.

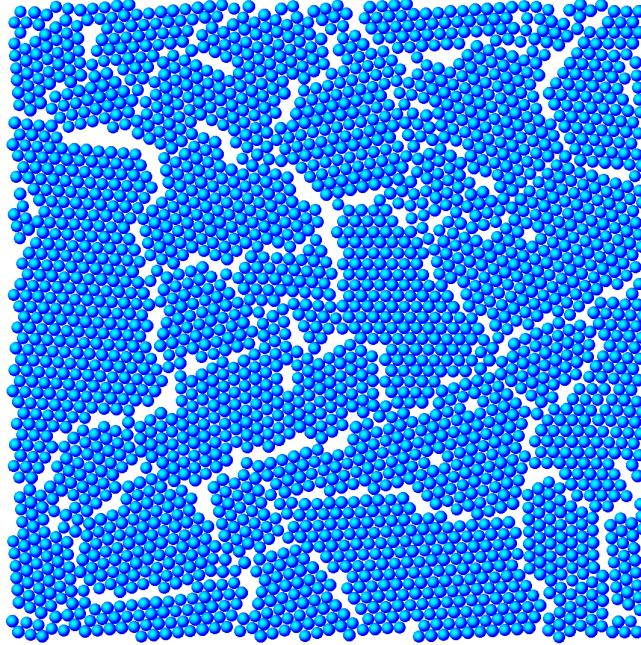


Рис. 11: Образец с изначально 5%-пористостью после моделирования третьего этапа при $\tilde{\alpha} = 2$ и $\tilde{c} = 5$. Пористость 9%

Для того, чтобы уменьшить пористость материала, его следует сжать, а потом разжать (произвести релаксацию модельного материала). Сжимающее давление будем измерять в $\tilde{P}_* = 2 \cos \left(\arcsin \left(\frac{a}{2\tilde{b}} \right) \right) \frac{f_*}{a}$ [36]. \tilde{P}_* — такое растягивающее напряжение, которое надо приложить к одной паре противоположных граней идеального монокристалла со сжатым сглаженным взаимодействием, чтобы он разрушился (ненагруженные грани — свободные). Отметим, что \tilde{P}_* зависит от \tilde{c} но слабо: $\tilde{P}_*|_{\tilde{c}=1} = 1.781 \frac{f_*}{a}$, $\tilde{P}_*|_{\tilde{c} \rightarrow +\infty} = 1.732 \frac{f_*}{a}$.

Четвертый этап изготовления поликристалла заключается в объемном сжатии материала давлением P , итеративно возрастающим до P_{max} с шагом ΔP . Для этого используется наложение на расчетную область следующих однородных деформаций:

$$\varepsilon_x = -k_\sigma \frac{\sigma_x + P}{\sigma_0}, \quad \varepsilon_y = -k_\sigma \frac{\sigma_y + P}{\sigma_0}, \quad k_\sigma = \kappa_\sigma \frac{\tilde{T}}{\tau}, \quad (21)$$

Знак "+" в формуле (21) перед P учитывает то, что внешнее давление является сжимающим. Итерация длится, по аналогии с третьим этапом, до момента, когда девиация скоростей частиц образца v_{dev} станет меньше предельного значения девиации v_{dev}^* , а интенсивность напряжений в образце σ_{int} станет меньше предельного значения интенсивности σ_{int}^* . Охлаждение материала производится аналогичным

первому и второму этапу образом. Параметры моделирования, используемые на четвертом этапе, сведены в таблицу 5.

Параметры 4го этапа	Символ	Значение	Значение
Изменение давления за итерацию	ΔP	$0.05\tilde{P}_*$	$0.087\frac{f_*}{a}$
Диапазон изменения давления	P	$0..P_{max}$	$0..P_{max}$
Коэффициент сжатия силы	c	\tilde{c}	\tilde{c}
Коэффициент хрупкости материала	α	$\tilde{\alpha}$	$\tilde{\alpha}$
Коэффициент отвода тепла	B	$0.08\tilde{B}$	$0.8278\sqrt{\frac{\tilde{c}m f_*}{a}}$
Предельное значение девиации	v_{dev}^*	$0.01v_{dis_0}$	$0.008623\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Предельное значение интенсивности	σ_{int}^*	$0.001\sigma_0$	$0.001\frac{f_*}{a}$
Баростатический коэффициент	κ_{sigma}	0.00003	0.00003
Шаг интегрирования	τ	$0.01\tilde{T}$	$0.012145\sqrt{\frac{am}{\tilde{c}f_*}}$

Таблица 5: Значение параметров моделирования на четвертом этапе создания поликристалла

Стоит отметить, что в процессе сжатия образца некоторые зерна/гранулы объ-

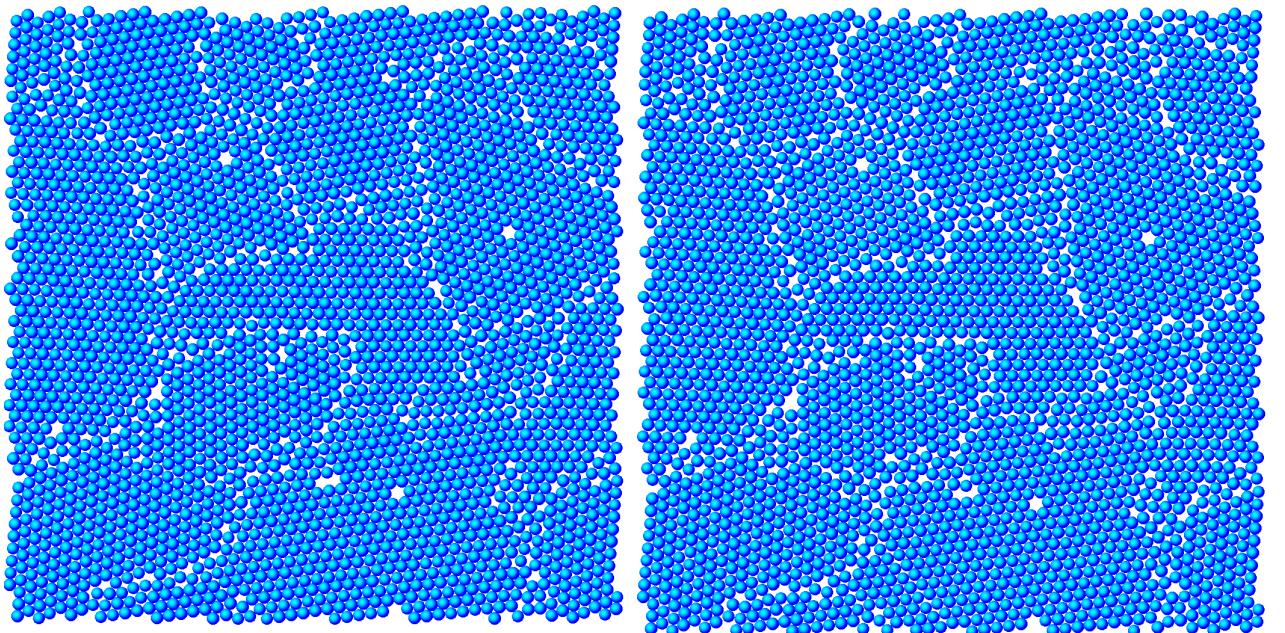


Рис. 12: Образец с изначально 5%-пористостью после моделирования четвертого этапа (слева) и пятого этапа (справа) при $\tilde{\alpha} = 2$, $\tilde{c} = 5$, $P_{max} = 2.5\tilde{P}_*$. Окончательная пористость 5.05%

Пятый этап создания поликристалла аналогичен четвертому с той лишь разницей, что внешнее давление на данном этапе итеративно уменьшается до нуля. Параметры этапа представлены в таблице 6.

Параметры 5го этапа	Символ	Значение	Значение
Изменение давления за итерацию	ΔP	$-0.05\tilde{P}_*$	$-0.087\frac{f_*}{a}$
Диапазон изменения давления	P	$P_{max..0}$	$P_{max..0}$
Коэффициент сжатия силы	c	\tilde{c}	\tilde{c}
Коэффициент хрупкости материала	α	$\tilde{\alpha}$	$\tilde{\alpha}$
Коэффициент отвода тепла	B	$0.08\tilde{B}$	$0.8278\sqrt{\frac{\tilde{c}mf_*}{a}}$
Предельное значение девиации	v_{dev}^*	$0.01v_{dis_0}$	$0.008623\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Предельное значение интенсивности	σ_{int}^*	$0.0001\sigma_0$	$0.0001\frac{f_*}{a}$
Баростатический коэффициент	κ_{sigma}	0.00003	0.00003
Шаг интегрирования	τ	$0.01\tilde{T}$	$0.012145\sqrt{\frac{am}{\tilde{c}f_*}}$

Таблица 6: Значение параметров моделирования на пятом этапе создания поликристалла

Как видно из рис.12 структура материала по результатам пятого этапа практически не изменяется. В результате снятия с образца внешнего давления, он увеличивается в размерах. После окончания пятого этапа модельный материал готов к дальнейшему тестированию.

Значения для \tilde{P}_* в таблицах 5 и 6 посчитаны для $\tilde{c} = 5$. P_{max} зависит от желаемой пористости образца. Для получения пористости $\approx 5\%$ необходимо задать изначальную пористость равной 5% , а $P_{max} = 2.5\tilde{P}_*$. При необходимости получить более холодный материал или материал с меньшими внутренними напряжениями надо уменьшить на каждом из этапов значения v_{dev}^* и σ_{int}^* соответственно. Далее будет исследован модельный материал при $\tilde{\alpha} = 2$, $\tilde{c} = 5$ и $a_{cut_0} = 1.4a$.

2.5 Тестирование модельного материала

Для общности, свойства модельного материала можно измерять не в числовых величинах, а в модельных единицах измерения. Это позволит в дальнейшем при желании, произвести пересчет свойств модельного материала, задавшись некоторыми опорными характеристиками реального материала. Чтобы провести подобный пересчет надо задаться тремя размерными модельными единицами измерения (к примеру: расстояние, масса, время). В данной работе такими единицами будут служить следующие модельные единицы измерения, посчитанные для монокристаллической решетки²: характерный размер исследуемого образца W_* (высота или ширина в зависимости от теста); сила, которую надо приложить, чтобы разо-

²В качестве единиц измерения используются величины для монокристаллической решетки, т.к. они могут быть посчитаны аналитически в отличие от тех же величин для поликристаллической решетки

рвать образец в teste на растяжение $F_* = 2 \cos(\arcsin(\frac{a}{2b})) \frac{W_*}{a} f_*$; время, за которое продольная волна деформации (звуковая волна в образце) пройдет характерный размер образца $T_* = W_*/\tilde{v}_{long2D}$, где $\tilde{v}_{long2D} = \frac{39}{2\sqrt{14}} \sqrt[12]{\frac{13}{7}} \sqrt{\frac{c a f_*}{m}}$ — скорость распространения продольной волны деформаций вдоль монокристаллического двумерного образца.

Таким образом, для идентификации модельных единиц измерения W_*, F_*, T_* требуется проведение калибровочных расчетов. В результате этих расчетов должно быть установлено соответствие между единицами расстояния, времени и силы в модели и в натурных экспериментах. Кроме того, калибровочные расчеты позволяют установить соответствие между физико-механическими свойствами модельного и реального материала: модулем Юнга, критической растягивающей деформацией, пористостью, скоростью продольной волны, размерами гранул, коэффициентом динамичности. Такие параметры, как коэффициент Пуассона, предел текучести, предел прочности — могут быть измерены для модельного материала, но не могут быть изменены при использовании силы взаимодействия (12). Исследуем модельный материал с параметрами $\tilde{a} = 2$, $\tilde{c} = 5$, $a_{cut_0} = 1.4a$, пористость 5%, с характерным размером $W_* = 200a$ (рис. 13).

Соответствие между модельной единицей расстояния W_* и физическими размерами образца, измеряемыми в метрах, можно установить, зная размер зерен материала. В используемом компьютерном поликристалле (рис. 13) одно зерно имеет протяженность в среднем 15 частиц. Таким образом, зная размер зерна для некоторого реального материала можно составить пропорцию и рассчитать размер образца модельного материала. *Размер зерна гранита составляет порядка 1 - 5 мм. Размер одной частицы, таким образом, составляет от 0.064 до 0.32 мм. Образец имеет 200 частиц в ширину, следовательно макроскопическая единица измерения линейных размеров в модели, равная ширине образца, после осреднения оказывается равной 38 мм.* Для установления соответствия между физическим временем, измеряемым в секундах, и модельным временем T_* , проводится исследования скорости распространения упругой волны в образце материала известного размера. Границные условия на левом и правом крае образца — периодические, на верхнем и нижнем крае образца — свободные. Верхнему приграничному слою частиц, по высоте равному a , сообщается ненулевая начальная скорость v_{imp} . Ширина образца составляет W_* , высота образца составляет kW_* ($k > 1$). Начальная девиация скоростей частиц v_{rand} . Дополнительных сил (к примеру, диссилирующих) не вводится. В процессе молекулярно-динамического моделирования осуществляется наблюдение за средней скоростью частиц слоя на противоположной стороне образца. Первый максимум значения скорости этого слоя соответствует

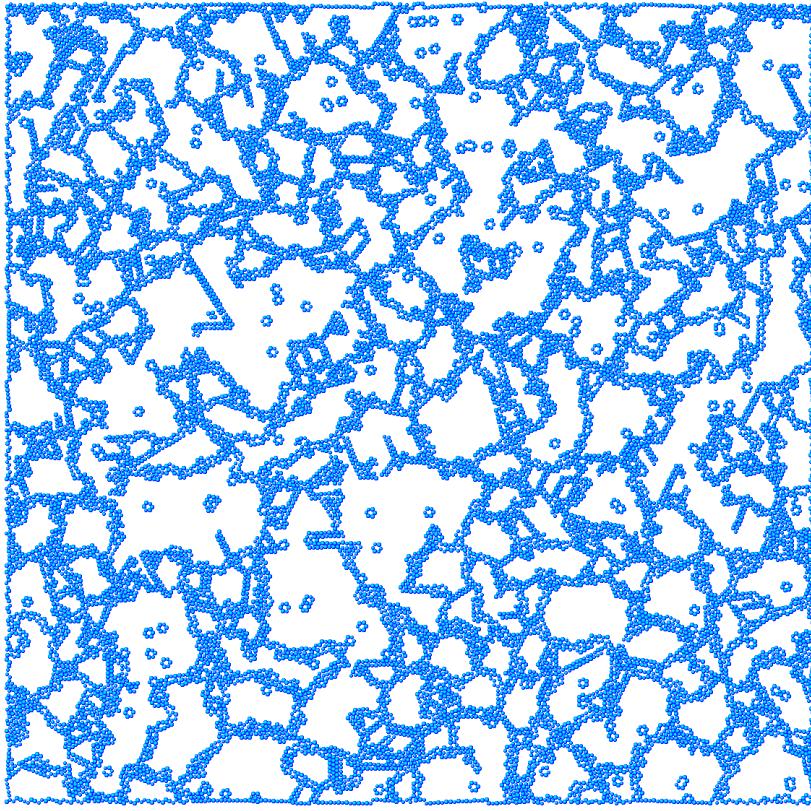


Рис. 13: Исследуемый образец модельного материала с параметрами: $\tilde{\alpha} = 2$, $\tilde{c} = 5$, $a_{cut_0} = 1.4a$, пористость 5%, характерный размер $W_* = 200a$. Для лучшего восприятия на рисунке удалены все частицы, которые имеют по 6 соседей, таким образом представлены только частицы на границах дефектов

моменту прихода волны, что позволяет вычислить скорость волны в материале, измеренную в модельных единицах времени W_*/T_* . А т.к. характерный размер W_* уже сопоставлен с реальными единицами измерения, то сопоставление этой величины с экспериментальными сведениями о скорости распространения упругих волн в граните позволяет установить соответствие между T_* и физическим временем. При известной скорости волны порядка 3000000 м/с, T_* составляет $3.9 * 10^{-7}$ с. Стоит отметить, что должно выполняться следующее неравенство для скоростей: $v_{rand} \ll v_{imp} \ll \tilde{v}_{long2D}$. Первая часть неравенства должна выполняться, чтобы была возможность отследить приход волны на другой конец образца (т.е. отличить пришедшую волну от случайных флуктуаций скорости), а вторая часть неравенства должна выполняться, чтобы на скорость определения продольной волны не влияли эффекты, возникающие в ударных волнах. При желании, можно занулить скорость всех частиц после создания поликристалла, тогда в тесте будет рассчитываться скорость распространения продольной волны

без учета тепловых эффектов. Для удобства дальнейшего использования данной работы все параметры моделирования собраны в таблицу 7. Результаты расчета

Параметры	Символ	Значение	Значение
Начальная девиация скоростей	v_{rand}	$0.00001v_{dis_0}$	$8.62\text{e-}6\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Скорость приграничного слоя	v_{imp}	$0.001\tilde{v}_{long2D}$	$5.49\text{e-}3\sqrt{\frac{\tilde{c}af_*}{m}}$
Коэффициент сжатия силы	c	5	5
Коэффициент хрупкости материала	α	2	2
Коэффициент отвода тепла	B	0	0
Отношение высоты и ширины образца	k	4	4
Шаг интегрирования	τ	$0.01\tilde{T}$	$0.00543\sqrt{\frac{am}{f_*}}$

Таблица 7: Использованные значения параметров моделирования в teste на определение скорости продольной волны

показали, что скорость распространения продольной волны в поликристалле составляет $(0.8 - 0.9) \tilde{v}_{long2D}$.

Для идентификации упругих и прочностных характеристик модельного материала проводится тест на его одноосное растяжение. Этот тест позволяет получить: значение критической деформации на растяжение ε_{cr} , соответствующее заданному коэффициенту \tilde{c} сжатия силы межчастичного взаимодействия, предел прочности модельного материала, визуализировать распространение трещины в образце. Суть данного вычислительного эксперимента заключается в следующем. Подготовленный по описанному в п. 2.4 алгоритму поликристаллический материал с периодическими граничными условиями подвергается одноосной растягивающей деформации (точно такой же деформации подвергаются и границы ячейки периодичности). Исходное значение деформации $\varepsilon_0 = 0$. На каждой итерации на образец одномоментно накладывается деформация ε_x вдоль оси x с шагом $\Delta\varepsilon$ (при этом $\varepsilon_y \equiv 0$), далее производится молекулярно-динамический расчет, с учетом диссипации энергии, в течение времени t_0 , затем расчет продолжается до тех пор, пока девиация скоростей частиц не опустится ниже предельного значения $v_{dev} < |\varepsilon_x|\delta_v$, зависящего от текущей деформации ε_x и предельного коэффициента δ_v . Охлаждение образца происходит с помощью ранее рассматривавшегося диссипативного слагаемого (19). В конце итерации рассчитываются значения напряжений, интересующие компоненты тензора жесткости, модуль Юнга и коэффициент Пуассона:

$$C_{xx} = \frac{\sigma_x - \sigma_x^0}{\varepsilon_x}, \quad C_{xy} = \frac{\sigma_y - \sigma_y^0}{\varepsilon_x}, \quad E = \frac{C_{xx}C_{xx} - C_{xy}C_{xy}}{C_{xx}}, \quad \nu = \frac{C_{xy}}{C_{xx}}, \quad (22)$$

где σ_x^0, σ_y^0 — напряжения в исходной (недеформированной) конфигурации, E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона. Зависимость $\sigma_x(\varepsilon_x)$ напряжений от деформаций, полученная в ходе выполнения данного теста, приведена на рис. 14. Для сравнения на этом же рисунке показана диаграмма нагружения монокристаллического образца. Видно, что поликристаллическая структура исследуемого модельного материала вносит существенные видоизменения в диаграмму нагружения: уменьшается предел прочности по отношению к модулю Юнга материала, в среднем уменьшается критическая деформация на растяжение ε_{cr} , появляются небольшие зоны пластичности (появление данных зон связано с тем, что одноосное деформирование, а не одноосное нагружение; также это может быть связано со сдвиговыми напряжениями, появляющимися между зернами).

На рис. 15 изображен образец с трещиной, образовавшейся в ходе выполнения данного теста.

Для удобства дальнейшего использования данной работы все параметры моделирования собраны в таблицу 8. *При известном модуле Юнга гранита порядка*

Параметры	Символ	Значение	Значение
Изменение деформации за итерацию	$\Delta\varepsilon$	0.0001	0.0001
Минимальное время расчета	t_0	$10\tilde{T}$	$5.43\sqrt{\frac{am}{f_*}}$
Предельная девиация	δ_v	$0.05v_{dis_0}$	$0.043\sqrt{\frac{af_*}{m}}$
Коэффициент сжатия силы	c	5	5
Коэффициент хрупкости материала	α	2	2
Коэффициент отвода тепла	B	$0.03\tilde{B}$	$0.694\sqrt{\frac{mf_*}{a}}$
Отношение высоты и ширины образца	k	1	1
Шаг интегрирования	τ	$0.01\tilde{T}$	$0.00543\sqrt{\frac{am}{f_*}}$

Таблица 8: Использованные значения параметров моделирования в teste на определение скорости продольной волны

55 МПа, модельная единица измерения силы F_* оказалась равной в среднем 70кН. Критическая деформация ε_{cr} , определенная в данном teste, равна 0.49%, а коэффициент Пуассона - 0.47. Стоит отметить, что установленные значения указанных механических параметров материала близки к свойствам реальных геоматериалов, кроме коэффициента Пуассона, который должен составлять 0.15-0.4. Данный факт говорит об одной из границ применимости модели и том, что модель стоит подвергнуть дальнейшей доработке для достижения реалистичных показателей коэффициента Пуассона модельного материала.

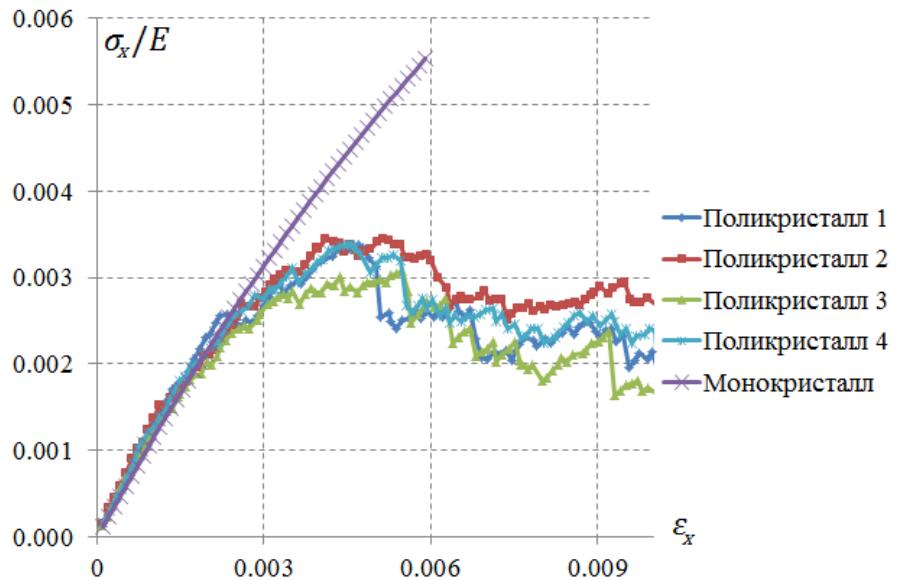


Рис. 14: Диаграммы нагружения четырех различных поликристаллических образцов, созданных по одной и той же технологии, в teste на одноосное деформирование. Для сравнения также приведена диаграмма нагружения монокристаллического образца

2.6 Результаты

С взаимодействием Леннарда-Джонса проделаны последовательные преобразования сглаживания и сжатия. Рассчитаны параметры взаимодействия, а также скорость распространения продольных волн в идеальной монокристаллической решетке. Получена таблица энергии связи сглаженного взаимодействия для радиусов обрезания $a_{cut_0} = 1.4a$ и $a_{cut_0} = 2.1a$.

Представлена технология создания двумерного поликристаллического модельного материала, который может быть использован в различных модельных тестах. Исследованы свойства модельного материала в teste на растяжения, на определение скорости продольной волны. Скорость продольной волны в поликристалле составляет 80%-90% от скорости продольной волны в монокристалле. Представлен метод с помощью которого значения параметров модельного материала могут быть сопоставлены с параметрами реальных материалов. Калибровочные расчеты позволяют установить соответствие между физико-механическими свойствами модельного и реального материала: модулем Юнга, критической растягивающей деформацией, пористостью, скоростью продольной волны, размерами гранул, коэффициент динамичности. Измерены такие безразмерные параметры, как коэффициент Пуас-

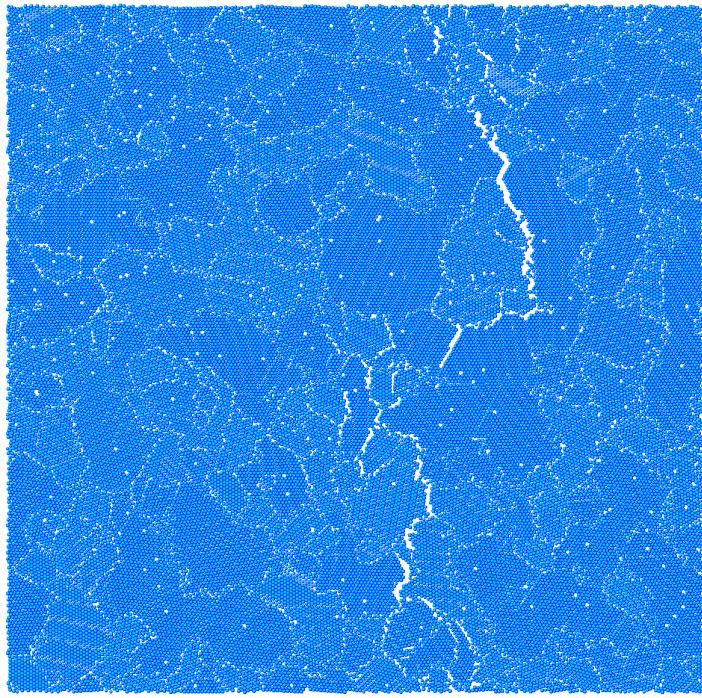


Рис. 15: *Образец модельного материала после проведения теста на растяжение*

сона и предел прочности. Для данного материала и силы взаимодействия они не могут быть изменены. Несмотря на то, что в данной работе представлен двумерный модельный материал, технологию его создания не представляется сложным обобщить на трехмерный случай. При этом, однако, в разы возрастет вычислительная сложность задачи, и для ее решения за приемлемое время, необходимо будет применить суперкомпьютерные вычисления.

3 Моментный модельный материал

3.1 Введение

Виталием Кузькиным в работе [37] была предложена описанная далее модель межчастичного взаимодействия. Автор данной работы сделал только несколько добавлений в модель, которые будут отдельно отмечены.

Метод дискретных элементов (МДЭ) широко используется для компьютерного моделирования твердых тел и сыпучих материалов. По аналогии с классическим методом молекулярной динамики [39, 40], в основе МДЭ лежит представление материала в виде совокупности твердых взаимодействующих частиц (гранул). В сыпучих материалах частицы взаимодействуют посредством контактных сил, сил сухого и вязкого трения, электромагнитных сил и т.д. Для расчета твердых тел необходимо введение законов межчастичного взаимодействия, позволяющих описать устойчивость, упругость, прочность и другие свойства, которые отличают твердые тела от сыпучих сред. На практике для моделирования твердых тел гранулы, их составляющие, связывают т.н. связями [41, 42], передающими силовое и моментное взаимодействие. Моментное взаимодействие особо важно при моделировании тонких структур [43]. Связи могут рассматриваться либо как модель взаимодействия между различными частями одного тела (представленными частицами), либо как модель дополнительного материала, связующего частицы (к примеру: клей [41] или цемент [44]). Согласно обзору, представленному в статье [42], только несколько моделей, предложенных в литературе, позволяют описать все возможные деформации связи (растяжение/сжатие, сдвиг, изгиб и кручение).

Модель связанных частиц (Bonded-Particle Model – BPM), предложенная в работе [41], широко используется для моделирования деформирования и разрушения твердых тел (как правило, горных пород [45, 46, 47] и агломератов [48]). Моделирование диаметрального сжатия шаровидного образования из частиц рассмотрено в работе [45]. Сжатие сферических и кубических образцов исследовано в работе [46]. Fluid-rock взаимодействие представлено в работе [47]. Соударение гранул о жесткую стенку рассмотрено в работе [48]. Несколько недостатков BPM, в случае совместного изгиба и кручения связи, показаны в статье [42]. Отмечено, что главной причиной недостатков является инкрементальный алгоритм, являющийся основой BPM. Также стоит отметить что BPM содержит только два независимых параметра, описывающих жесткости связи, хотя всего есть четыре независимых жесткости связи (продольная, сдвиговая, изгибная, крутильная).

Модель балки Тимошенко, связывающая центры частиц, используется как модель связи в работе [43]. Модель имеет ясную физическую структуру и применима к

тонким длинным связям в случае малых деформаций. Однако она имеет малую точность при описании коротких связей, соединяющих поверхности частиц. К примеру, модель [43] плохо подходит для описания склеенных частиц. Также неочевидно обобщение модели на случай больших нелинейных деформаций связи.

Другой подход, базирующийся на декомпозиции относительного вращения частиц, предлагается в статье [42]. Силы и моменты представляются как функции от углов, описывающих относительные повороты частиц. Показано, что метод, используемый в [42], более точен с вычислительной точки зрения, чем инкрементальная процедура, используемая в BPM. Несмотря на то, что подход, предложенный в работе [42] корректен с математической точки зрения, он имеет свои недостатки. Из статьи следует, что если частицы вращаются в одном направлении и нет относительного смещения, то силы и моменты между ними равны нулю. Это следует из предположения, допущенного в статье, что силы и моменты зависят только от относительного положения и ориентации частиц, в то время как в общем случае надо также учитывать ориентацию частиц, относительно соединяющей их связи.

В данной работе силы и моменты на частицы со стороны связи вычисляются исходя из потенциальной энергии. Данный подход используется в классической молекулярной динамике как для набора материальных частиц [39] так и для набора твердых тел [40].

Подход к созданию межчастичных потенциалов взаимодействия твердых тел предложен в работе [49]. Вначале данных подход использовался для моделирования молекулярных жидкостей [40]. В работах [50, 51] схожие идеи применялись для твердых кристаллических структур. В частности аналитическое описание упругих свойств графена представлено в работе [51]. Потенциалы для нелинейного взаимодействия твердых тел в двумерном и трехмерном случаях представлены в работах [52, 53] и [54]. В данной работе схожие идеи использованы для разработки простой моментной модели взаимодействия (далее — В-модель), основанной на связанных с частицами векторах, для упругих связей в твердых телах. При этом использована комбинация подходов, предложенных в работах [50, 55] и [40, 49]. В данной работе представлены уравнения, описывающие взаимодействие между двумя твердыми телами в общем случае. Общее выражение для потенциальной энергии связи представлено через вектора, жестко связанные со взаимодействующими частицами. Данные вектора используются для описания различных типов деформации связи. Затем в работе предложены выражения для потенциальных энергий, отвечающих деформациям сжатия/растяжения, сдвига, изгиба, кручения. Силы и моменты выражены исходя из потенциальной энергии связи. В работе представлены два подхода к калибровке параметров В-модели для различных отношений

длины связи к ее толщине. При этом получены аналитические формулы, связывающие геометрические и упругие характеристики связи с параметрами В-модели. В конце раздела приводится численный расчет с использованием В-модели.

3.2 Парное взаимодействие твердых тел: общий случай

Рассмотрим общий подход для описания парного потенциального взаимодействия между твердыми телами [40, 49, 51, 55]. В литературе данный подход называется "моментное взаимодействие" [51, 54]. В данной работе моментные взаимодействия применяются для описания упругих связей между частицами.

Рассмотрим систему, состоящую из двух взаимодействующих твердых частиц, обозначенных индексами i и j . В общем случае частицы взаимодействуют посредством сил и моментов, зависящих от их относительного положения, относительной ориентации и от ориентации относительно вектора, связывающего рассматривающие частицы. Введем обозначения: \mathbf{F}_{ij} , \mathbf{M}_{ij} — сила и момент со стороны частицы j на частицу i . Момент \mathbf{M}_{ij} рассчитывается относительно центра масс частицы i .

В работе [51] показано, что \mathbf{F}_{ij} , \mathbf{M}_{ij} удовлетворяют третьему закону Ньютона, его аналогу для моментов и энергетическому балансу:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij} &= -\mathbf{F}_{ji}, \quad \mathbf{M}_{ij} + \mathbf{M}_{ji} - \mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij} = 0, \\ \dot{\Pi}_{ij} &= \mathbf{F}_{ij} \cdot \dot{\mathbf{r}}_{ij} - \mathbf{M}_{ij} \cdot \boldsymbol{\omega}_i - \mathbf{M}_{ji} \cdot \boldsymbol{\omega}_j, \end{aligned} \tag{23}$$

где $\mathbf{r}_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$; $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ — радиус-векторы частиц i и j ; $\boldsymbol{\omega}_i, \boldsymbol{\omega}_j$ — угловые скорости частиц; Π_{ij} — внутренняя энергия системы.

Положим, что взаимодействие между частицами потенциально и внутренняя энергия Π_{ij} зависит от относительного положения частиц, их относительной ориентации и от ориентации по отношению к \mathbf{r}_{ij} . Относительное положение частицы может быть описано вектором \mathbf{r}_{ij} . Поэтому Π_{ij} должна быть функцией от \mathbf{r}_{ij} . Для того, чтобы ввести зависимость Π_{ij} от ориентации частиц, используется подход, предложенный для жидкостей в работе [49] и для твердых тел в работе [54]. Опишем ориентацию частицы i с помощью набора векторов $\{\mathbf{n}_i^k\}_{k \in \Lambda_i}$, жестко связанных с частицей, где Λ_i — набор индексов.

Здесь и далее нижние индексы соответствуют номеру частиц, верхние индексы соответствуют номерам векторов, связанных с частицами. Максимальное число векторов не ограничено и не влияет на общие выкладки. После введенных обозначений для определения ориентации частиц с помощью векторов $\{\mathbf{n}_i^k\}_{k \in \Lambda_i}$ и $\{\mathbf{n}_j^m\}_{m \in \Lambda_j}$, внутренняя энергия будет записываться в следующей форме:

$$\Pi_{ij} = \Pi(\mathbf{r}_{ij}, \{\mathbf{n}_i^k\}_{k \in \Lambda_i}, \{\mathbf{n}_j^m\}_{m \in \Lambda_j}). \tag{24}$$

Рассмотрим взаимосвязь между силами, моментами и потенциальной энергией P_{ij} . Подставляя формулу (24) в уравнение баланса энергии (23) и считая, что силы \mathbf{F}_{ij} и моменты \mathbf{M}_{ij} не зависят от поступательных и угловых скоростей частиц, получаем:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{ij} &= -\mathbf{F}_{ji} = \frac{\partial P}{\partial \mathbf{r}_{ij}}, \quad \mathbf{M}_{ij} = \sum_{k \in \Lambda_i} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}_i^k} \times \mathbf{n}_i^k, \\ \mathbf{M}_{ji} &= \sum_{m \in \Lambda_j} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}_j^m} \times \mathbf{n}_j^m.\end{aligned}\tag{25}$$

Если внутренняя энергия (24) задана, то силы и моменты межчастичного взаимодействия могут быть посчитаны по формулам (25). Обратим, что функция P должна удовлетворять принципу материальной объективности, то есть должна быть инвариантной относительно вращения тела, как единого целого. Если данный принцип выполняется, то силы и моменты, рассчитанные по формулам (25), удовлетворяют третьему закону Ньютона для моментов автоматически.

По этой причине P должна быть функцией от инвариантных аргументов.

Например, в качестве аргументов P могут быть использованы следующие инварианты: r_{ij} , $\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^k$, $\mathbf{e}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^m$, $\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{n}_j^m$, $|\mathbf{e}_{ij} \times \mathbf{n}_i^k|$, $|\mathbf{n}_i^k \times \mathbf{n}_j^m|$, и т.д., где $\mathbf{e}_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$, $k \in \Lambda_i$, $m \in \Lambda_j$.

На практике первые четыре инварианта являются достаточными (остальные инварианты могут быть пересчитаны через комбинацию первых четырех). Даные выражения имеют простое геометрическое значение. Первый инвариант — расстояние между частицами. Второй и третий инварианты ($\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^k$ и $\mathbf{e}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^m$) описывают ориентацию частиц i и j относительно вектора \mathbf{r}_{ij} . Четвертый инвариант $\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{n}_j^m$ описывает относительную ориентацию частиц. Поэтому в общем случае зависимость потенциала взаимодействия твердых тел может быть представлена в следующей форме:

$$P_{ij} = P(r_{ij}, \{\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^k\}_{k \in \Lambda_i}, \{\mathbf{e}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^m\}_{m \in \Lambda_j}, \{\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{n}_j^m\}_{k \in \Lambda_i, m \in \Lambda_j})\tag{26}$$

В общем случае, наборы Λ_i, Λ_j могут содержать любое количество векторов. Однако с вычислительной точки зрения логично минимизировать их количество.

3.3 Моментная модель взаимодействия для одной связи

Воспользуемся моментным взаимодействием для описания упругих деформаций связи. В общем случае частица может быть связана с любым количеством соседей, при этом поведение каждой связи полагается независимым. Рассмотрим, для простоты, систему состоящую только из двух связанных друг с другом частиц i и j . Положим что связь соединяет две точки, которые принадлежат частицам.

Данные точки лежат на линии, соединяющей центры частиц в начальном (недеформированном) состоянии. К примеру, данные точки могут совпадать с центрами частиц или лежать на поверхности частиц. Обозначим расстояние от центров масс частиц до данных точек величинами R_i, R_j соответственно (см. рис. 16). На рис.16 представлен случай, когда точки лежат на поверхности частиц (тогда R_i, R_j совпадают с радиусами частиц). Введем ортонормированные системы векторов $\mathbf{n}_i^1, \mathbf{n}_i^2, \mathbf{n}_i^3$ и $\mathbf{n}_j^1, \mathbf{n}_j^2, \mathbf{n}_j^3$, жестко связанные с частицами i и j соответственно. Нижние индексы соответствуют номерам части, верхние индексы соответствуют номерам векторов в тройках. Введение в модель параметров, характеризующих расстояние между центрами частиц и соединенными точками, является заслугой автора данной работы.

Положим, что в недеформированном состоянии верны следующие уравнения:

$$\mathbf{n}_i^1 = -\mathbf{n}_j^1 = \mathbf{e}_{ij}, \quad \mathbf{n}_i^2 = \mathbf{n}_j^2, \quad \mathbf{n}_i^3 = \mathbf{n}_j^3. \quad (27)$$

Согласно идее, описанной в предыдущем параграфе, запишем потенциальную

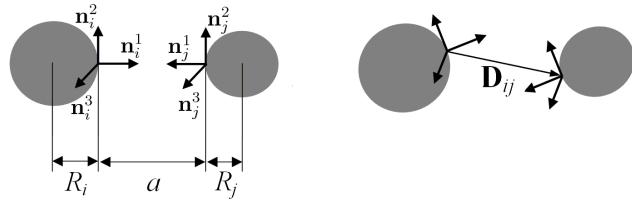


Рис. 16: Две частицы в недеформированном (слева) и деформированном (справа) состоянии. Здесь и далее a обозначает равновесное расстояние

энергию связи как функцию векторов $\mathbf{D}_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_{ij} + R_j \mathbf{n}_j^1 - R_i \mathbf{n}_i^1$ и векторов $\mathbf{n}_i^k, \mathbf{n}_j^m, k, m = 1, 2, 3$. Вектор \mathbf{D}_{ij} соединяет "связанные" точки с радиус-векторами $\mathbf{r}_i + R_i \mathbf{n}_i^1$ и $\mathbf{r}_j + R_j \mathbf{n}_j^1$ (см. рис. 16).

Предложим следующую зависимость для потенциальной энергии Π связи:

$$\begin{aligned} \Pi = & \Pi_L(D_{ij}) + \Pi_B(\mathbf{n}_i^1 \cdot \mathbf{n}_j^1, \mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^1, \mathbf{d}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^1) + \\ & + \Pi_T(\{\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{n}_j^k, \mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^k, \mathbf{d}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^k\}_{k=2,3}), \end{aligned} \quad (28)$$

$$D_{ij} = |\mathbf{D}_{ij}|, \quad \mathbf{d}_{ij} = \mathbf{D}_{ij}/D_{ij}.$$

Отметим, что потенциальная энергия (28) удовлетворяет принципу материальной объективности, т.е. инвариантна относительно поворота системы как единого целого. Рассмотрим зависимость между функциями Π_L, Π_B, Π_T и различными видами деформации связи, представленными на рис.17. Функция Π_L описывает

растяжение/сжатие связи, функция Π_B описывает изгиб и сдвиг связи. Аргументы $\mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^1, \mathbf{d}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^1$ меняются в случае изгиба и сдвига, аргумент $\mathbf{n}_i^1 \cdot \mathbf{n}_j^1$ меняется только в случае изгиба и инвариантен по отношению к деформации сдвига. Функция Π_T изменяется в случае кручения и/или изгиба. Кузькиным В.А. были

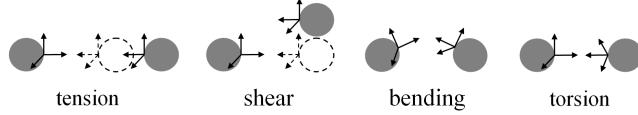


Рис. 17: Различные виды деформаций связи и соответствующие изменения векторов, жестко связанных с частицами. Штриховые линии показывают исходное положение частиц

предложены следующие частные выражения для функций Π_L, Π_B, Π_T из формулы (28):

$$\begin{aligned}\Pi_L(s) &= \frac{B_1}{2}(s - a)^2 \\ \Pi_B(s_1, s_2, s_3) &= -\frac{B_2}{2}s_1^2 - \frac{B_3}{2}(s_2^2 + s_3^2) \\ \Pi_T(\{s_{1k}, s_{2k}, s_{3k}\}_{k=2,3}) &= -\frac{B_4}{4} \sum_{k=2,3} (s_{1k} + s_{2k}s_{3k})^2(1 + s_{2k}^2)(1 + s_{3k}^2),\end{aligned}\quad (29)$$

где a — равновесное расстояние связи (см. рис.16); $B_m, m = 1,..,4$ — параметры модели. Функции (29) подобраны так, чтобы иметь независимые продольную, изгибную, сдвиговую и крутильную жесткости (см. раздел 3.4.1). Отметим, что число параметров В-модели равняется числу жесткостей связи. Далее будет показано, что поведение связи при малых деформациях может быть в точности описано с помощью подбора параметров модели. Для хрупких материалов, таких как горные породы[41], это имеет большое значение, т.к. критические деформации как правило малы. С другой стороны, далее будет показано, что В-модель имеет адекватное поведение при больших деформациях (см. раздел 3.6). Таким образом, с тем же успехом могут рассматриваться гибкие структуры.

Также В-модель может быть обобщена на нелинейный случай изменением выражений для Π_L, Π_B, Π_T и посредством введения новых параметров в потенциал. Данное обобщение может быть важно, например, для моделирования полимерных связей [44]. Отметим, что аналогичное обобщение для существующих моделей, к примеру ВРМ [41], не очевидно.

Рассмотрим формулы (29). В то время как выражения для Π_L и Π_B довольно просты, выражение для Π_T — нет. Рассмотрим идею, поясняющую выбранный вид функции Π_T более детально. Здесь и далее введем обозначение $\tilde{\mathbf{n}}_i^k \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_i^k - \mathbf{d}_{ij}\mathbf{d}_{ij} \cdot$

\mathbf{n}_i^k . Вектор $\tilde{\mathbf{n}}_i^k$ лежит в плоскости, ортогональной плоскости, содержащей связь. Очевидно, вектора $\tilde{\mathbf{n}}_i^k/|\tilde{\mathbf{n}}_i^k|, \tilde{\mathbf{n}}_j^k/|\tilde{\mathbf{n}}_j^k|, k = 2, 3$ изменяются только в случае кручения, т.е. поворота относительно \mathbf{d}_{ij} .

По этой причине потенциальная энергия Π_T , описывающая кручение связи, может быть представлена в форме $\Pi_T(\{\tilde{\mathbf{n}}_i^k \cdot \tilde{\mathbf{n}}_j^k / |\tilde{\mathbf{n}}_i^k| |\tilde{\mathbf{n}}_j^k|\}_{k=2,3})$. Однако это выражение становится сингулярным в случае $|\tilde{\mathbf{n}}_i^k| = 0$ или $|\tilde{\mathbf{n}}_j^k| = 0$. Несмотря на то, что данный случай соответствует большим деформациям связи, он не желателен.

Для того, чтобы избежать подобной сингулярности используются следующие аргументы функции Π_T (см. формулу (29) для Π_T):

$$\begin{aligned} & \frac{(\tilde{\mathbf{n}}_i^k \cdot \tilde{\mathbf{n}}_j^k)^2}{|\tilde{\mathbf{n}}_i^k|^2 |\tilde{\mathbf{n}}_j^k|^2} (1 - (\mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^k)^4)(1 - (\mathbf{d}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^k)^4) = \\ & = (\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{n}_j^k + \mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^k \mathbf{d}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^k) \cdot (1 + (\mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{n}_i^k)^2)(1 + (\mathbf{d}_{ji} \cdot \mathbf{n}_j^k)^2), \quad k = 2, 3. \end{aligned} \quad (30)$$

Выражения (30) не инвариантны относительно деформации изгиба, как и Π_T , из формул (29). Однако далее будет показано, что в случае малых деформаций Π_T не вносит дополнительных слагаемых в изгибную жесткость (см. формулу (41)).

Используя формулы (25) и (29), можно получить следующие формулы для \mathbf{F}_{ij} и \mathbf{M}_{ij} :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij} &= B_1(D_{ij} - a)\mathbf{d}_{ij} - \frac{B_3}{D_{ij}}\mathbf{d}_{ij} \cdot (\mathbf{n}_i^1 \tilde{\mathbf{n}}_i^1 + \mathbf{n}_j^1 \tilde{\mathbf{n}}_j^1) + \frac{1}{D_{ij}} \sum_{k=2,3} \left(\frac{\partial \Pi_T}{\partial s_{2k}} \tilde{\mathbf{n}}_i^k - \frac{\partial \Pi_T}{\partial s_{3k}} \tilde{\mathbf{n}}_j^k \right), \\ \mathbf{M}_{ij} &= R_i \mathbf{n}_i^1 \times \mathbf{F}_{ij} - \mathbf{n}_i^1 \cdot [B_2 \mathbf{n}_j^1 \mathbf{n}_j^1 + B_3 \mathbf{d}_{ij} \mathbf{d}_{ij}] \times \mathbf{n}_i^1 + \sum_{k=2,3} \left(\frac{\partial \Pi_T}{\partial s_{1k}} \mathbf{n}_j^k + \frac{\partial \Pi_T}{\partial s_{2k}} \mathbf{d}_{ij} \right) \times \mathbf{n}_i^k, \end{aligned} \quad (31)$$

где $\tilde{\mathbf{n}}_i^k = \mathbf{n}_i^k - \mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{d}_{ij} \mathbf{d}_{ij}$. Представим выражения для частных производных $\partial \Pi_T / \partial s_{mk}$, $m = 1, 2, 3, k = 2, 3$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi}{\partial s_{1k}} &= -\frac{B_4}{2}(s_{1k} + s_{2k}s_{3k})(1 + s_{2k}^2)(1 + s_{3k}^2), \\ \frac{\partial \Pi}{\partial s_{2k}} &= -\frac{B_4}{2}(s_{1k} + s_{2k}s_{3k})(1 + s_{3k}^2)(s_{3k} + s_{1k}s_{2k} + 2s_{3k}s_{2k}^2), \\ \frac{\partial \Pi}{\partial s_{3k}} &= -\frac{B_4}{2}(s_{1k} + s_{2k}s_{3k})(1 + s_{2k}^2)(s_{2k} + s_{1k}s_{3k} + 2s_{2k}s_{3k}^2), \quad k = 2, 3. \end{aligned} \quad (32)$$

Данные формулы (31), (32) используются для расчета сил и моментов, необходимых для, к примеру, компьютерного моделирования.

3.4 Калибровка параметров

3.4.1 Жесткости связи

Рассмотрим параметры В-модели, точно описывающие упругие свойства связи в случае малых деформаций. Следуя идеи, предложенной в [51], введем жесткости связи. Положим, что сила \mathbf{F}_{ij} и момент

$$\mathbf{M} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{M}_{ij} - (R_i \mathbf{n}_i^1 + \mathbf{D}_{ij}/2) \times \mathbf{F}_{ij}, \quad (33)$$

расчитаны относительно центра связи, который определяется радиус-вектором $\mathbf{r}_i + R_i \mathbf{n}_i^1 + \mathbf{D}_{ij}/2$. Согласно результатам, полученным в статье [51], при малых деформациях \mathbf{F}_{ij} и \mathbf{M} могут быть представлены в следующей форме:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij} &= \mathbf{A} \cdot \left(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i - (R_i \boldsymbol{\varphi}_i + R_j \boldsymbol{\varphi}_j) \times \mathbf{d}_{ij} + \frac{1}{2} \mathbf{D}_{ij} \times (\boldsymbol{\varphi}_i + \boldsymbol{\varphi}_j) \right), \\ \mathbf{M} &= \mathbf{G} \cdot (\boldsymbol{\varphi}_j - \boldsymbol{\varphi}_i), \end{aligned} \quad (34)$$

где \mathbf{A} , \mathbf{G} — тензоры жесткости; \mathbf{u}_i , $\boldsymbol{\varphi}_i$ — перемещение и вектор малого поворота частицы i . В работе [51] показано, что в случае трансверсально-симметричной связи, рассматриваемой в данной работе, тензоры жесткости представимы в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= c_A \mathbf{d}_{ij} \mathbf{d}_{ij} + c_D (\mathbf{E} - \mathbf{d}_{ij} \mathbf{d}_{ij}), \\ \mathbf{G} &= c_B (\mathbf{E} - \mathbf{d}_{ij} \mathbf{d}_{ij}) + c_T \mathbf{d}_{ij} \mathbf{d}_{ij}, \end{aligned} \quad (35)$$

где \mathbf{E} — единичный тензор; величины c_A, c_D, c_B, c_T — продольная, сдвиговая, изгибная, крутильная жесткости соответственно. Из формул (34), (35) видно, что данные жесткости полностью определяют поведение связи в случае малых деформаций.

Выведем соответствие между параметрами потенциала (29) и жесткостями связи. Сначала рассмотрим выражение (31) для силы \mathbf{F}_{ij} в случае чистого растяжения:

$$\mathbf{F}_{ij} = B_1 (D_{ij} - a) \mathbf{e}_{ij} = B_1 (|r_{ij} - R_i - R_j| - a) \mathbf{e}_{ij}. \quad (36)$$

Значит, согласно формуле (34), продольная жесткость связи c_A равна B_1 . Рассмотрим далее зависимость между сдвиговой жесткостью c_D и параметром B_3 , для чего положим, что частица i зафиксирована, а частица j поступательно переместилась на $u_j \mathbf{k}$, где \mathbf{k} — вектор, ортогональный линии связи в недеформированном положении. Ориентация обеих частиц зафиксирована. В данном случае первая формула уравнения (34) примет вид

$$\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{k} = c_D u_j. \quad (37)$$

Раскладывая выражение (31) для \mathbf{F}_{ij} в ряд, положим что $|u_j/a| \ll 1$ и пренебрежем слагаемыми второго и более порядков. В данном случае проекция \mathbf{F}_{ij} на вектор \mathbf{k} примет вид (37). Опуская выкладки, покажем финальное выражение для c_D :

$$c_D = \frac{2B_3}{a^2}. \quad (38)$$

Аналогично получим формулу для изгибной жесткости c_B . Положим, что вектор \mathbf{D}_{ij} зафиксирован в равновесной конфигурации связи, в то время как частицы поворачиваются согласно векторам малого поворота $\boldsymbol{\varphi}_i, \boldsymbol{\varphi}_j$. В данном случае вектора $\mathbf{n}_i^k, \mathbf{n}_j^m$ в актуальной (деформированной) конфигурации могут быть рассчитаны как

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_i^k &\approx \mathbf{n}_i^k(0) + \boldsymbol{\varphi}_i \times \mathbf{n}_i^k(0), \\ \mathbf{n}_j^k &\approx \mathbf{n}_j^k(0) + \boldsymbol{\varphi}_j \times \mathbf{n}_j^k(0), \quad k = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (39)$$

Ноль обозначает исходную конфигурацию, к примеру: $\mathbf{n}_i^1(0) = -\mathbf{n}_j^1(0) = \mathbf{e}_{ij}(0)$. Данная деформация соответствует изгибу связи. Подставляя (31), (39) в (33) и оставляя только слагаемые первого порядка получаем:

$$\mathbf{M} \approx \left[\left(\frac{B_3}{2} + B_2 \right) (\mathbf{E} - \mathbf{d}_{ij}\mathbf{d}_{ij}) + B_4 \mathbf{d}_{ij}\mathbf{d}_{ij} \right] \cdot (\boldsymbol{\varphi}_j - \boldsymbol{\varphi}_i), \quad (40)$$

Выражение для изгибной жесткости c_B и крутильной жесткости c_T получаются из сравнения формулы (40) с второй формулой из (34). В результате, получаются простые формулы, устанавливающие взаимоотношение между параметрами В-модели и жесткостями связи:

$$c_A = B_1, \quad c_D = \frac{2B_3}{a^2}, \quad c_B = \frac{B_3}{2} + B_2, \quad c_T = B_4. \quad (41)$$

Из формулы (41) следует, что с помощью параметров модели $B_m, m = 1,..,4$ можно получить любые значения жесткостей связи. Вследствие этого линейное упругое поведение связи может быть в точности описано. Отметим, что соотношение между длиной и толщиной связи не накладывалось никаких ограничений.

Таким образом, зная жесткости связи можно легко рассчитать параметры В-модели. В принципе, жесткости связи могут быть измерены с помощью экспериментов по растяжению, сдвигу, изгибу, кручению системы из двух связанных частиц. В таком случае формулы (41) достаточны для калибровки модели. Однако если тело, к примеру, агломерат, содержит много связей с различными геометрическими характеристиками, то экспериментальная калибровка не представляется возможной. По этой причине необходимы дополнительные модели, которые могли бы связать геометрические и физические характеристики связи (такие как длина

связи, форма, площадь поперечного сечения, модули упругости связующего материала и др.) с жесткостями связи. Несомненно, что поведение связи сильно зависит от соотношения ее длины и толщины. Поэтому калибровочные модели жесткостей связи должны быть разными для различных соотношений длины и толщины связи. Две процедуры калибровки (для длинных и коротких связей) представлены далее.

3.4.2 Калибровка для длинных связей: теории стержней Бернулли-Эйлера и Тимошенко

Допустим, что связи длинны (под этим подразумеваем, что отношение длины к толщине больше единицы). В данном случае в качестве модели связи можно воспользоваться моделью упругого стержня. Сравнение В-модели с результатами теории стержней используются в дальнейшем для калибровки В-модели. Рассматриваются модели стержней Бернулли-Эйлера и Тимошенко [57]. Отметим, что в отличие от подхода, используемого в статье [43], в рамках В-модели могут рассматриваться связи соединяющие, например, поверхности частиц (а не только центры частиц). Данный факт очень важен для моделирования тел, составленных из склеенных частиц, например керамико-полимерных композитов [44].

Выведем взаимосвязь между параметрами В-модели и безмассовым стержнем Бернулли-Эйлера, соединяющим частицы (стержень соединяет точки с радиус-векторами $\mathbf{r}_i + R_i \mathbf{n}_i^1$ и $\mathbf{r}_j + R_j \mathbf{n}_j^1$). Положим, что стержень имеет равновесную длину a , постоянное поперечное сечение и изотропную изгибную жесткость. Выражение для продольной, сдвиговой, изгибной и крутильной жесткости стержня Бернулли-Эйлера получены в работе [56]:

$$c_A = \frac{EA}{a}, \quad c_D = \frac{12EJ}{a^3}, \quad c_B = \frac{EJ}{a}, \quad c_T = \frac{GJ_p}{a}, \quad (42)$$

где E, G, A, J, J_p — модуль Юнга, модуль сдвига, площадь поперечного сечения, момент инерции поперечного сечения и полярный момент инерции поперечного сечения соответственно. К примеру, для стержня с круглым поперечным сечением

$$J = \frac{\pi d_b^4}{64}, \quad J_p = 2J, \quad A = \frac{\pi d_b^2}{4}, \quad (43)$$

где d_b — диаметр связи. Используя формулы (41) и (42) можно получить параметры В-модели

$$B_1 = \frac{EA}{a}, \quad B_2 = -\frac{2EJ}{a}, \quad B_3 = -3B_2, \quad B_4 = \frac{GJ_p}{a}. \quad (44)$$

Формула (44) может быть использована для калибровки параметров потенциала (29) в случае длинных связей. Если параметры потенциала рассчитаны по форму-

ле (44), то в случае малых деформаций В-модель эквивалентна балке Бернулли-Эйлера, связывающей частицы. Отметим, что в таком случае параметры $\tilde{B}_m \stackrel{\text{def}}{=} B_m a, m = 1, \dots, 4$, не зависят от равновесной длины связи a . По этой причине \tilde{B}_m одинаковы для всех связей с разными длинами, но одинаковыми поперечными сечениями и упругими свойствами. Данный факт может быть использован для уменьшения числа параметров, хранимых в оперативной памяти компьютера в ходе моделирования системы с различными длинами связей.

Модель Бернулли-Эйлера позволяет просто откалибровать параметры В-модели, однако если длина и толщина связи сравнимы, то модель Бернулли-Эйлера перестает быть применимой [57]. В таком случае нужны более точные модели. Подобной моделью является модель балки Тимошенко [57], которая описана далее.

Рассмотрим балку Тимошенко длины a и постоянного поперечного сечения с шаровым тензором инерции. Выведем выражения, связывающие параметры стержня с его жесткостями. Продольная и крутильная жесткости определяются формулами (42), т.е. $c_A = EA/a, c_T = GJ_p/a$. Без потери общности получим выражения для сдвиговой и изгибной жесткостей. Рассмотрим чистый сдвиг стержня. Уравнения, описывающие систему, и граничные условия для стержня примут следующую форму [57]:

$$\begin{aligned} w''(s) - \theta'(s) &= 0, \\ \theta''(s) + \frac{kA}{2J(1+\nu)}(w'(s) - \theta(s)) &= 0, \end{aligned} \quad (45)$$

$$w(0) = 0, \quad \theta(0) = 0, \quad w(a) = u_j, \quad \theta(a) = 0, \quad (46)$$

где ν — коэффициент Пуассона материала связи; $w(s)$ и $\theta(s)$ — прогиб и угол поворота поперечного сечения с координатой s ; k — безразмерный сдвиговой коэффициент [57]. В общем случае, сдвиговой коэффициент k зависит от формы поперечного сечения и соотношения длины стержня к его толщине. Обычно k получают из сравнения результатов теории стержней с предсказаниями теории упругости. Сдвиговой коэффициент для стержней с различными поперечными сечениями получен в работе [58]. К примеру, нижеследующий коэффициент предлагается для стержней с круговым поперечным сечением:

$$k = \frac{6(1+\nu)^2}{7+12\nu+4\nu^2}. \quad (47)$$

С другой стороны k можно воспринимать как дополнительный подгоночный параметр. Решая систему дифференциальных уравнений в частных производных (45) с граничными условиями (46) можно получить выражение для модуля величины

сдвиговой силы Q , действующей в стержне, и для сдвиговой жесткости:

$$Q = kGA(w' - \theta) = c_D u_j,$$

$$c_D = \frac{12kAEJ}{a(kAa^2 + 24J(1 + \nu))}. \quad (48)$$

Рассмотрим изгиб стержня, возникающий при следующих граничных условиях:

$$w(0) = 0, \quad \theta(0) = \varphi_i, \quad w(a) = 0, \quad \theta(a) = \varphi_j. \quad (49)$$

Решая систему уравнений (45) с граничными условиями (49) и вычисляя момент M , действующий в середине стержня, получаем:

$$M = EJ\theta' \left(\frac{a}{2}\right) = \frac{EJ}{a} (\varphi_j - \varphi_i). \quad (50)$$

Формула (50) дает выражение для изгибной жесткости стержня. Таким образом, жесткости балки Тимошенко принимают следующие значения:

$$c_A = \frac{EA}{a}, \quad c_D = \frac{12kAEJ}{a(kAa^2 + 24J(1 + \nu))}, \quad (51)$$

$$c_B = \frac{EJ}{a}, \quad c_T = \frac{GJ_p}{a}.$$

Окончательно, используя формулы (51) можно получить взаимосвязь между параметрами В-модели и параметрами балки Тимошенко:

$$B_1 = \frac{EA}{a}, \quad B_2 = -\frac{2EJ(kAa^2 - 12J(1 + \nu))}{a(kAa^2 + 24J(1 + \nu))}, \quad (52)$$

$$B_3 = \frac{6kAEJa}{kAa^2 + 24J(1 + \nu)}, \quad B_4 = \frac{GJ_p}{a}.$$

Отметим, что при $k \rightarrow \infty$ формулы (52) в точности совпадают с аналогичными формулами (44), полученными используя теорию стержней Бернулли-Эйлера. Если для калибровки использовать формулу (52), то в случае малых деформаций В-модель эквивалентна балке Тимошенко, соединяющей частицы.

3.4.3 Калибровка для коротких связей

Вышеприведенный подход применим в случае длинных связей (с соотношением длины и толщины больше единицы). В случае коротких связей для калибровки надо использовать не стержневые модели, а модели, базирующиеся на теории упругости. Рассмотрим подобную модель: положим, что частицы соединены коротким цилиндром с равновесной длиной a как показано на рис.18. Отметим, что в общем случае параметры R_i, R_j не равны радиусам частиц (т.е. связанные частицы

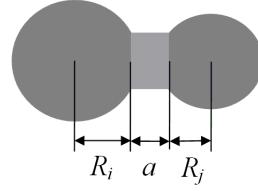


Рис. 18: Частицы соединены коротким цилиндром

могут даже находиться в контакте). Выведем соотношения между параметрами связи и ее жесткостями. Продольная жесткость c_A , по определению, является коэффициентом пропорциональности между силой и удлинением связи. В случае растяжения, в связи возникает сила \mathbf{F}_{ij} , создаваемая нормальными напряжениями σ , при этом выполняются следующие соотношения:

$$\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} = \int_{(A)} \sigma dA, \quad (53)$$

В случае короткой связи, жестко закрепленной к частицам, деформированное состояние связи примерно описывается одноосным растяжением, которое равно $(u_j - u_i)/a$, где u_i, u_j — перемещения частиц. Тогда напряжения могут быть посчитаны по закону Гука $\sigma \approx (\lambda + 2\mu)(u_j - u_i)/a$, где λ, μ — коэффициенты Ламе материала связи. Подставляя эту формулу в уравнение (53) получаем:

$$\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij} = \frac{(\lambda + 2\mu)A}{a}(u_j - u_i) = \frac{(1 - \nu)EA}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)a}(u_j - u_i), \quad (54)$$

Тогда продольная жесткость связи принимает следующий вид:

$$c_A = \frac{(1 - \nu)}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \frac{EA}{a}. \quad (55)$$

Видно, что продольная жесткость (55) отличается от таковой в формуле (51) в $(1 - \nu)/((1 + \nu)(1 - 2\nu))$ раз. Отметим, что для почти несжимаемых материалов связи отличие существенно.

Выведем уравнение для сдвиговой жесткости c_D . Для этого рассмотрим чистый сдвиг связи: положим, что частица i зафиксирована, а частица j перемещается на $u_j \mathbf{k}$, не меняя своей ориентации, где \mathbf{k} — вектор, ортогональный линии, соединяющей частицы в недеформированном положении. В таком случае сила \mathbf{F}_{ij} вызвана сдвиговыми напряжениями τ , действующими внутри связи. Интегрируя напряжения по площади поперечного сечения, получаем следующее представление для $\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{k}$:

$$\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{k} = \int_{(A)} \tau dA, \quad (56)$$

Положим, что напряжения распределены равномерно и $\tau \approx Gu_j/a$. Подставляя данную формулу в уравнение (56) и сравнивая результат с формулой (37) получаем выражение для сдвиговой жесткости:

$$c_D = \frac{GA}{a}. \quad (57)$$

Видно, что полученное выражение для сдвиговой жесткости (57) расходится с ранее полученным выражением (51) (которое было выведено с использованием теории стержней Тимошенко). Однако примечательно, что формулы совпадают при удалении из рассмотрения отношения длины и толщины связи, при сдвиговом коэффициенте $k = 1$. Аналогичные выкладки для изгибной и крутильной жесткостей связи приводят к следующим результатам:

$$c_B = \frac{(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{EJ}{a}, \quad c_T = \frac{GJ_p}{a}. \quad (58)$$

В итоге, используя формулы (41), (58) можно получить выражения для сопоставления параметров В-модели с характеристиками связи:

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{(1-\nu)EA}{(1+\nu)(1-2\nu)a}, & B_2 &= G \left[\frac{2(1-\nu)}{1-2\nu} \frac{J}{a} - \frac{Aa}{4} \right], \\ B_3 &= \frac{GAa}{2}, & B_4 &= \frac{GJ_p}{a}. \end{aligned} \quad (59)$$

Таким образом, в случае коротких связей формулы (59) могут быть использованы для калибровки В-модели.

3.5 О численной реализации модели

Опишем численную процедуру расчета с использованием (29). Рассматривается система из N частиц, соединенных связями. Другие типы взаимодействий в данном разделе не рассматриваются. Уравнения движения имеют классический вид:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}, \quad \Theta_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{M}_{ij}, \quad (60)$$

где m_i, Θ_i — масса и момент инерции частицы (для простоты полагается, что все частицы имеют одинаковые массы и одинаковые шаровые тензоры инерции). Если частицы i и j связаны, то сила \mathbf{F}_{ij} и момент \mathbf{M}_{ij} , вызванные связью, рассчитываются по формуле (31). Иначе они равны нулю. Система уравнений движения (60) решается вкупе с кинематическими уравнениями, связывающими поступательную и вращательную скорость частиц с их позицией и ориентацией. Для примера, определим поворот частицы i из начальной конфигурации в актуальную с помощью тензора поворота \mathbf{P}_i .

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{v}_i, \quad \dot{\mathbf{P}}_i = \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{P}_i. \quad (61)$$

Численное интегрирование уравнений (60), (61) дает текущие позиции и ориентации частиц на каждом шаге интегрирования.

Как было сказано ранее, для расчета сил и моментов между частицами i и j нужно ввести вектора $\mathbf{n}_i^k, \mathbf{n}_j^k, k = 1, 2, 3$. Данные вектора вводятся в момент создания связи t_* согласно формуле (27), и затем вращаются вместе частицами. Рассмотрим простейший вариант расчета текущих координат данных векторов. Для этого введем ортонормированный базис из векторов $\mathbf{x}_i^m, m = 1, 2, 3$, который вращается с частицей i . Текущая ориентация векторов \mathbf{x}_i^m определяется следующим образом:

$$\mathbf{x}_i^m(t) = \mathbf{P}_i(t) \cdot \mathbf{x}_i^m(0). \quad (62)$$

Воспользуемся координатами векторов $\mathbf{n}_i^k, k = 1, 2, 3$ в подвижном базисе $\mathbf{x}_i^m, m = 1, 2, 3$ для расчета текущего положения векторов $\mathbf{n}_i^k, k = 1, 2, 3$. На каждом шаге интегрирования вектора $\mathbf{x}_i^m, m = 1, 2, 3$ вращаются согласно уравнению (62), тогда вектора \mathbf{n}_i^k могут быть определены через их координаты $\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{x}_i^m, m, k = 1, 2, 3$, хранимые в оперативной памяти компьютера:

$$\mathbf{n}_i^k = \sum_{m=1}^3 (\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{x}_i^m) \mathbf{x}_i^m. \quad (63)$$

Отметим, что координаты $\mathbf{n}_i^k \cdot \mathbf{x}_i^m, k, m = 1, 2, 3$ не меняются с течением времени и могут быть всего один раз посчитаны в момент времени $t = t_*$. Описанная процедура позволяет избежать вращения всех векторов, связанных с частицами, используя уравнение (62).

Для расчета сил и моментов в моделируемой системе, необходимо на каждом шаге интегрирования перебирать все связи. Для упрощения данной процедуры в программном коде, написанном на объектно-ориентированном языке программирования, логично ввести класс “Связь”. В общем случае, элементы данного класса должны содержать следующие параметры: указатели на связанные частицы, начальную длину связи a , параметры $B_m, m = 1, \dots, 4$, и координаты векторов $\mathbf{n}_i^k, \mathbf{n}_j^k, k = 1, 2, 3$ во вращающихся базисах. Для перебора по всем связям логично ввести класс для списка всех связей. К примеру, на языке программирования C++ данный класс может быть реализован с использованием std::map.

Таким образом, алгоритм для компьютерного моделирования с использованием В-модели на каждом шаге интегрирования примет следующий вид:

- 1) Создать новые связи, если необходимо. Рассчитать параметры создаваемых связей. Добавить созданные связи в список связей.
- 2) Перебирая по частицам, проверить, соединены ли они связью. Для каждой пары связанных частиц: рассчитать текущие вектора $\mathbf{n}_i^k, \mathbf{n}_j^k, k = 1, 2, 3$ и длину связи

D_{ij} .

- 3) Используя параметры из класса связей и рассчитанные на Земле шаге величины рассчитать силы и моменты между частицами по формуле (31).
- 4) Рассчитать поступательные и угловые скорости частиц на следующем шаге интегрирования.
- 5) Рассчитать позиции и ориентации частиц, а также вектора $\mathbf{x}_i^m, k = 1, 2, 3$ на следующем шаге интегрирования.

3.6 Пример работы модели

Для расчетов с использованием разрабатываемой модели использовался программный комплекс EDEM 2.3 (разработчик: DEM Solutions). Для этого была написана подключаемая библиотека взаимодействий между частицами. Проверка написанной библиотеки осуществлялась посредством расчета четырех модельных задач на нахождение периода колебаний системы из двух частиц в случае продольной, изгибной, сдвиговой, крутильной деформации связи. При этом выявилось несоответствие численных и аналитических результатов. Это можно увидеть на примере следующей задачи: создано две частицы, первая частица зафиксирована, вторая расположена на расстоянии 0.1м от первой частицы и осуществляет крутильные колебания вокруг оси, соединяющей две данные частицы. Крутильная жесткость связи $c_T = B_4 = 1 \text{ Н} \cdot \text{м}$. Момент инерции второй частицы равен $\Theta = 0.000285 \text{ кг} \cdot \text{м}^2$, начальное поворот второй частицы относительно положения равновесия бралось $5^\circ, 10^\circ, 15^\circ$. После проверки сходимости период крутильных колебаний второй частицы оказался равен 0.116 с, в то время как аналитически посчитанный период крутильных колебаний равен $2\pi\sqrt{\frac{\Theta}{c_T}} = 0.106$ с. Расхождение в $\frac{0.116 - 0.106}{0.106} \cdot 100\% = 9.4\%$ было сочтено неприемлемым (в задаче о продольных колебаниях расхождение составило менее 0.1%), поэтому в DEM Solutions было отправлено письмо с просьбой объяснить подобные результаты. Команда разработчиков написала, что занимается проблемой, но, спустя 3 месяца (на момент оформления данной работы), письма, поясняющего причину ошибки получено не было. Это скорее всего говорит о том, что в программном пакете EDEM 2.3 содержится ошибка, связанная с описание вращательных степеней свободы частиц.

В связи с этим был разработан собственный код для моделирования методом динамики частиц с помощью которого была рассчитана тестовая задача по потере устойчивости дискретного стержня.

В общем случае с помощью В-модели можно моделировать механическое поведение любых тел состоящих из частиц. Однако наиболее сложной проблемой для

численного расчета является моделирование тонких структур, таких как стержни и оболочки. Для адекватного описания данных структур связи должны передавать и силы, и моменты, а также иметь четыре независимые жесткости. Далее представлено моделирование дискретного стержня.

Для простоты положим, что все частицы имеют одинаковую массу m и радиус R . Цилиндрические связи соединяют центры частиц и диаметр их поперечного сечения составляет d_b . Для калибровки воспользуемся моделью балки Бернулли-Эйлера. Представим все параметры через три размерных параметра: равновесная длина связи a , масса частицы m , и продольная жесткость связи c_A . В программном коде данные параметры можно приравнять единице. В то время как остальные параметры можно представить через a, m, c_A и безразмерные параметры. Произведем следующее обезразмеривание:

$$\begin{aligned} \frac{Ea}{c_A} &= \frac{4}{\pi} \left(\frac{a}{d_b} \right)^2, & \frac{A}{a^2} &= \frac{\pi}{4} \left(\frac{d_b}{a} \right)^2, & \frac{J}{a^4} &= \frac{\pi}{64} \left(\frac{d_b}{a} \right)^4, \\ \frac{B_1}{c_A} &= 1, & \frac{B_2}{c_A a^2} &= -\frac{1}{8} \left(\frac{d_b}{a} \right)^2, \\ \frac{B_3}{c_A a^2} &= \frac{3}{8} \left(\frac{d_b}{a} \right)^2, & \frac{B_4}{c_A a^2} &= \frac{1}{16(1+\nu)} \left(\frac{d_b}{a} \right)^2. \end{aligned} \quad (64)$$

Видно, что безразмерные параметры связи зависят только от коэффициента Пуассона ν и соотношения d_b/a .

3.6.1 Квазистатический изгиб дискретного стержня

Рассмотрим изначально прямолинейный дискретный стержень, расположенный вдоль оси x и состоящий из N частиц. Положим, что связи соединяют центры частиц. Смоделируем квазистатическое сжатие стержня. Начальные скорости частиц равномерно распределены по шару с радиусом v_{dev} . Начальные угловые скорости частиц равны нулю. Через каждые T_* времени на стержень накладывается однородная деформация ε_* .

После наложения деформации происходит численное интегрирование уравнений движения (60) с помощью метода центральных разностей [40]. Поступательные степени свободы концов стержня остаются зафиксированными. Процедура повторяется вплоть до потери устойчивости стержня. В ходе моделирования рассчитывается сдавливающая стержень сила и осредняется по времени T_* . В расчете

используются следующие параметры:

$$\begin{aligned}
n &= 10, \quad \frac{R}{a} = 0.4, \quad \frac{\Theta}{ma^2} = 64 \cdot 10^{-3}, \quad \frac{v_{dev}}{v_{long1D}} = 10^{-6}, \\
\frac{\Delta t}{T_0} &= 10^{-2}, \quad \frac{d_b}{a} = 0.2, \quad \nu = 0.2, \\
\frac{B_1}{c_A} &= 1, \quad \frac{B_2}{c_A a^2} = -5 \cdot 10^{-3}, \\
\frac{B_3}{c_A a^2} &= 15 \cdot 10^{-3}, \quad \frac{B_4}{c_A a^2} = 2.08 \cdot 10^{-3}, \\
\varepsilon_* &= -10^{-7}, \quad \frac{T_*}{T_0} = 10,
\end{aligned} \tag{65}$$

где Θ — момент инерции частиц, Δt — шаг интегрирования, $T_0 = 2\pi\sqrt{m/c_A}$ — период малых колебаний частицы на пружине с жесткостью c_A , $v_{long1D} = a\sqrt{c_A/m}$ — скорость длинный волн в одномерной цепочке из частиц с массами m , соединенных пружинами с жесткостью c_A . В результате расчета получена следующая критическая сила сдавливания стержня: $f/(c_A a) = 3.19 \cdot 10^{-4}$. Результат всего на 4% больше аналитически посчитанной критической сдавливающей силы для балки Бернулли-Эйлера $f_E/(c_A a) = \pi^2 E J / (c_A a^3) = 3.05 \cdot 10^{-4}$. Отметим, что в теории стержней Бернулли-Эйлера критическая сила зависит от длины стержня и его изгибной жесткости. По этой причине изгибная жесткость дискретного стержня с точностью 4% соответствует изгибной жесткости балки Бернулли-Эйлера.

3.7 Результаты

В данной части работы предложена новая модель для упругих связей в твердых телах. Для описания деформации связи используются вектора, жестко соединенные с частицами. Предложено выражение для потенциальной энергии связи, как функции данных векторов. Используя функцию потенциальной энергии получены выражения для сил и моментов, действующих между связанными частицами. Данный подход гарантирует консервативность сил и моментов а также идеальную упругость связи. При необходимости могут быть добавлены диссипативные слагаемые. В случае малых деформаций получены выражения, сопоставляющие параметры В-модели с продольной, изгибной, сдвиговой и крутильной жесткостью связи. Показано, что с помощью параметров В-модели можно точно задать любые желаемые жесткости связи. Представлены две процедуры калибровки для разных соотношений длины и толщины связи.

В случае стержнеподобных связей для калибровки используется сравнение с результатами теорий стержней Бернулли-Эйлера и Тимошенко. Показано, что в

случае малых деформаций параметры В-модели могут быть подобраны так, чтобы связь была эквивалентна стержню Бернулли-Эйлера или Тимошенко. Отметим, что в рамках В-модели связь может соединять любые две точки, принадлежащие частицами и лежащие на линии их соединения в отсчетной конфигурации (в т.ч. точками соединения связью могут быть центры частиц, точки на поверхностях части). Для случая коротких связей также получена калибровочная модель, связывающая параметры В-модель с геометрическими и механическими характеристиками связи.

Представлено компьютерное моделирование квазистатического сжатия дискретного стержня. Показано, что результаты моделирования сходятся с аналитическими предсказаниями с высокой точностью.

В данной части работы разрушение не рассматривается. Однако В-модель позволяет формулировать критерии разрушения связи. К примеру, без каких бы то ни было затруднений могут быть использованы критерии разрушения, представленные в работе [41].

4 Приложение А. Охрана труда

Основные нагрузки при выполнении данной работы: интеллектуальные, эмоциональные, зрительные, и, в меньшей степени, слуховые. Вся работа проводилась за персональным компьютером и за письменным столом, натурные эксперименты отсутствовали. Организация работы должна проводиться в этом случае согласно СниП 2.2.2/2.41340-03. По природе действия вредные и опасные факторы подразделяются на следующие группы:

- физические факторы: температура, влажность и подвижность воздуха, неионизирующие электромагнитные излучения (ультрафиолетовое, видимое, инфракрасное, лазерное, микроволновое, радиочастотное, низкочастотное), статическое, электрические и магнитные поля, ионизирующие излучения, производственный шум, вибрация (локальная, общая), ультразвук, аэрозоли преимущественно фиброгенного действия (пыли), освещенность (отсутствие естественного освещения, недостаточная освещенность, повышенная ультрафиолетовая радиация);
- химические факторы, в том числе некоторые вещества биологической природы (антибиотики, витамины, гормоны, ферменты);
- биологические факторы: патогенные микроорганизмы, микроорганизмы продуценты, препараты, содержащие живые клетки и споры микроорганизмов, белковые препараты;
- факторы трудового процесса, характеризующие тяжесть физического труда: физическая динамическая нагрузка, масса поднимаемого и перемещаемого груза, стереотипные рабочие движения, статическая нагрузка, рабочая поза, наклоны корпуса, перемещение в пространстве;
- факторы трудового процесса, характеризующие напряженность труда: интеллектуальные, сенсорные, эмоциональные нагрузки, монотонность нагрузок, режим работы.

В помещении лаборатории или кафедры на сотрудника, работающего с вычислительной техникой, могут негативно действовать следующие факторы:

- повышенная и пониженная температура воздуха;
- чрезмерная запыленность и загазованность воздуха;
- повышенная и пониженная влажность воздуха;
- недостаточная освещенность рабочего места;
- превышающий допустимые нормы шум;
- повышенный уровень ионизирующего излучения;
- повышенный уровень электромагнитных полей;
- повышенный уровень статического электричества;

- опасность поражения электрическим током;
- блеклость экрана дисплея;
- длительное пребывание в сидячем положении;
- гиподинамия;
- повышенные интеллектуальные и психо-эмоциональные нагрузки;
- ненормированный рабочий день.

4.1 Требования к вентиляции, отоплению и кондиционированию воздуха

Микроклимат производственных помещений — это климат внутренней среды этих помещений, который определяется действующими на организм человека сочетаниями температуры, влажности и скорости движения воздуха. Допустимые микроклиматические условия — это такие сочетания параметров микроклимата, которые при длительном и систематическом воздействии на человека могут вызвать напряжение реакций терморегуляции и которые не выходят за пределы физиологических приспособительных возможностей. При этом не возникает нарушений в состоянии здоровья, не наблюдаются дискомфортные теплоощущения, ухудшающие самочувствие и понижение работоспособности. Оптимальные параметры микроклимата в производственных помещениях обеспечиваются системами кондиционирования воздуха, а допустимые параметры — обычными системами вентиляции и отопления. Помещение кафедры является помещением категории 1а, то есть выполняются работы с интенсивностью энерготрат $58\text{--}77 \text{ Вт}/\text{м}^3$. Для создания и автоматического поддержания в лаборатории независимо от наружных условий оптимальных значений температуры, влажности, чистоты и скорости движения воздуха, в холодное время года используется водяное отопление, в теплое время года применяется кондиционирование воздуха. Кондиционер представляет собой вентиляционную установку, которая с помощью приборов автоматического регулирования поддерживает в помещении заданные параметры воздушной среды. Также одежда персонала должна соответствовать температурному режиму в помещении. Отопление, вентиляция и кондиционирование должны осуществляться согласно СНиП 2.04.05-91:

1. В холодные периоды года температура воздуха, скорость его движения и относительная влажность воздуха должны соответственно составлять: $22\text{--}24^\circ\text{C}$; $0.1\text{ м}/\text{с}$; $40\text{--}60\%$; температура воздуха может колебаться в пределах от 21 до 25°C .
2. То же в теплые периоды года: $23\text{--}25^\circ\text{C}$; $0.1\text{--}0.2 \text{ м}/\text{с}$; $40\text{--}60\%$; температура

воздуха может колебаться в пределах от 22 до 26°C.

3. Воздух, поступающий в помещения с ЭВМ, должен быть отчищен от загрязнений, в том числе от пыли и микроорганизмов. Запыленность воздуха не должна превышать требований 12.1.005-91.

4.2 Требования к уровням шума

Шум — беспорядочное сочетание различных по силе и частоте звуков. Эквивалентный (по энергии) уровень звука (дБА) непостоянного шума - уровень звука постоянного широкополосного шума, который имеет такое же среднеквадратичное звуковое давление, что и данный непостоянный шум в течение определенного интервала времени. Предельно допустимый уровень (ПДУ) шума — это уровень фактора, который при ежедневной (кроме выходных дней) работе, но не более 40 часов в неделю в течение всего рабочего стажа, не должен вызывать заболеваний или отклонений в состоянии здоровья, обнаруживаемых современными методами исследований в процессе работы или в отдаленные сроки жизни настоящего и последующих поколений. Соблюдение ПДУ шума не исключает нарушения здоровья у сверхчувствительных лиц. В нашем помещении источником шумовых помех могут стать вентиляционные установки, кондиционеры и др. Длительное воздействие этих шумов отрицательно сказываются на эмоциональном состоянии персонала. Шум ухудшает условия труда оказывая вредное действие на организм человека. Работающие в условиях длительного шумового воздействия испытывают раздражительность, головные боли, головокружение, снижение памяти, повышенную утомляемость, понижение аппетита, боли в ушах и т. д. Такие нарушения в работе ряда органов и систем организма человека могут вызвать негативные изменения в эмоциональном состоянии человека вплоть до стрессовых. Под воздействием шума снижается концентрация внимания, нарушаются физиологические функции, появляется усталость в связи с повышенными энергетическими затратами и нервно-психическим напряжением, ухудшается речевая коммуникация. Все это снижает работоспособность человека и его производительность, качество и безопасность труда. Длительное воздействие интенсивного шума (выше 80 дБА) на слух человека приводит к его частичной или полной потере. Для того, чтобы добиться допустимого уровня шума рекомендуется применять звукопоглощающее покрытие стен. Защиту от шума следует выполнять в соответствии с СН 2.2.4/2.1.8.562-96.

4.3 Требования к естественному и искусственному освещению для помещений вычислительных комнат

Освещённость — плотность светового потока по поверхности, на которую он падает. Правильно спроектированное и выполненное производственное освещение улучшает условия зрительной работы, снижает утомляемость, способствует повышению производительности труда, благотворно влияет на производственную среду, оказывая положительное психологическое воздействие на работающего, повышает безопасность труда и снижает травматизм. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Существует три вида освещения: естественное, искусственное и совмещенное (естественное и искусственное вместе). Естественное освещение — освещение помещений дневным светом, проникающим через световые проемы в наружных ограждающих конструкциях помещений. Естественное освещение характеризуется тем, что меняется в широких пределах в зависимости от времени дня, времени года, характера области и ряда других факторов. Искусственное освещение применяется при работе в темное время суток и днем, когда не удается обеспечить нормированные значения коэффициента естественного освещения (пасмурная погода, короткий световой день). Освещение, при котором недостаточное по нормам естественное освещение дополняется искусственным, называется совмещенным освещением. Искусственное освещение подразделяется на рабочее, аварийное, эвакуационное, охранное. Рабочее освещение, в свою очередь, может быть общим или комбинированным. Общее — освещение, при котором светильники размещаются в верхней зоне помещения равномерно или применительно к расположению оборудования. Комбинированное — освещение, при котором к общему добавляется местное освещение. Работа, выполняемая с использованием вычислительной техники, имеют следующие недостатки: вероятность появления прямой блесткости, ухудшенная контрастность между изображением и фоном, отражение экрана. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Согласно СНиП 23-05-95 освещение в помещениях, где располагается вычислительная техника, должно быть смешанным: естественным и искусственным. При выполнении зрительной работы категории средней точности к. е. о. должен быть

не ниже 4%. Искусственное освещение в помещениях следует осуществлять в виде комбинированной системы освещения с использованием люминесцентных источников света в светильниках общего назначения. В качестве источников должны использоваться люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ с индексом цветопередачи ($R > 70$). В качестве светильников должны использоваться установки с преимущественно отраженным или рассеянным светораспределением (тип УСП-5-2x40, УСП-35-2x40, ЛВ003-2x40-002). Величина освещенности при искусственном освещении люминесцентными лампами должна быть в горизонтальной плоскости не ниже 300лк — для системы общего освещения и не ниже 750лк — для системы комбинированного освещения, причем с учетом работы категории высокой зрительной точности может быть увеличена до 1000лк. Для исключения бликов отражения на экранах от светильников общего назначения необходимо применять антибликовые сетки, специальные фильтры для экранов, защитные козырьки и т.п.

4.4 Пожарная безопасность при работе с вычислительной техникой

Пожарная безопасность — это состояние защищенности личности, имущества, общества и государства от пожаров. Пожар — это неконтролируемое горение, причиняющее материальный ущерб, вред жизни и здоровью граждан, интересам общества и государства. Определение категорий помещений осуществляется на стадии проектирования путем последовательной проверки принадлежности к категориям, установленным нормативными документами (НПБ 105-95). Причинами взрывов и пожаров часто являются электрооборудование и электрические сети. Опасность загорания в ЭВМ связана со значительным количеством плотно расположенных на монтажных платах и блоках: электронных узлов и схем, электрических и коммутационных кабелей, резисторов, конденсаторов, полупроводниковых диодов и транзисторов. Высокая плотность элементов в электронных схемах приводит к значительному повышению температуры отдельных узлов ($80 - 200^{\circ}\text{C}$), что может служить причиной воспламенения изоляционных материалов. В связи с этим в помещениях вычислительного центра должны быть предусмотрены возможные пути эвакуации персонала. Требования к количеству, размерам и размещению эвакуационных выходов, лестниц и лестничных клеток установлены СНиП 2.01.02-85, а именно:

1. Эвакуационные выходы должны располагаться рассредоточено. Минимальное расстояние l между наиболее удаленными один от другого эвакуационными выходами из помещения следует определять по формуле: $l = \sqrt{P}$, где

P — периметр помещения.

2. Ширина путей эвакуации в свету должна быть не менее 1м, дверей- не менее 0.8м.
3. Высота прохода на путях эвакуации должна быть не менее 2м.
4. Не допускается устройство винтовых лестниц, забежных ступеней, раздвижных и подъемных дверей и ворот, а также вращающихся дверей и турникетов.
5. Двери на путях эвакуации должны открываться по направлению выхода из здания.
6. Наружные эвакуационные двери зданий не должны иметь запоров, которые не могут быть открыты изнутри без ключа.

4.5 Требования электробезопасности

Для питания ЭВМ служит трехфазная электросеть с напряжением 380/220В и частотой 50Гц. Помещение, в котором располагался вычислительный центр, относится к помещениям без повышенной опасности (ГОСТ 12.1.013), поэтому защитное заземление не применялось (ГОСТ 12.1.030). При этом обслуживающий персонал должен допускаться до работы только после инструкции по технике безопасности. Изолирующие корпуса терминалов обеспечивают недоступность токоведущих частей, находящихся под напряжением.

4.6 Эргономические требования

Настоящий стандарт ГОСТ Р ИСО 9241-5-2009 устанавливает руководящие принципы, применяемые при формировании требований пользователей, а также при разработке проекта и установке оборудования рабочих станций, предназначенных для проведения офисных работ с применением видеодисплейных терминалов. Общие принципы и требования, установленные в настоящем стандарте, следует учитывать при разработке стандартов, устанавливающих требования к конструкции офисной мебели и оборудования рабочего места оператора. Под рабочим местом понимается зона, оснащенная необходимыми техническими средствами, в которой совершается трудовая деятельность исполнителя или группы исполнителей, совместно выполняющих одну работу или операцию. Конструкция рабочего места должна обеспечивать быстроту, безопасность, простоту и экономичность технического обслуживания в нормальных и аварийных условиях; полностью отвечать

функциональным требованиям и предполагаемым условиям эксплуатации. Конструкция рабочего стола должна обеспечивать оптимальное размещение на рабочей поверхности используемого оборудования с учетом его количества и конструктивных особенностей, характера выполняемой работы. Высота рабочей поверхности стола для взрослых пользователей должна регулироваться в пределах 680-800 мм; при отсутствии такой возможности высота рабочей поверхности стола должна составлять 725 мм. Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы, позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления. Тип рабочего стула (кресла) должен выбираться в зависимости от характера и продолжительности работы с учетом роста пользователя. Поверхность сиденья, спинки и других элементов стула (кресла) должна быть полумягкой, с нескользящим, неэлектризующимся и воздухонепроницаемым покрытием, обеспечивающим легкую очистку от загрязнений. Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращенного к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы.

4.7 Напряженность трудового процесса

Тяжесть трудового процесса в ходе работы над диссертацией можно отнести к оптимальному классу условий труда (легкая физическая нагрузка), основная нагрузка интеллектуальная, присутствует возможность гибкого графика работы, изменения рабочей позы. Классифицировать по степени напряженности выполняемую работу можно следующим образом: интеллектуальные нагрузки предполагают решение сложных задач с выбором по известным алгоритмам (напряженный труд 1-ой степени), а также эвристическую, творческую деятельность, требующую решения сложных задач при отсутствии алгоритма (напряженный труд 2-ой степени); большую часть времени работа проходит установленному графику с возможной его коррекцией по ходу деятельности (напряженный труд 1-ой степени); часто присутствует работа в условиях дефицита времени (напряженный труд 2-ой степени); сенсорные нагрузки (работа за экраном компьютера) присутствуют более четырех часов за рабочий день (напряженный труд 2-ой степени); фактическая продолжительность рабочего дня 8-9 часов (напряженность труда средней степени).

5 Приложение В. Обозначения для безмоментного взаимодействия

N — число частиц

m — масса частицы (для простоты массы всех частиц считаются одинаковыми)

f_* — прочность связи (максимальная сила притяжения между частицами)

V_0 — элементарный объем ячейки периодичности двумерной ГПУ решетки

V_Σ — площадь расчетной области

r — расстояние между двумя взаимодействующими частицами

a — равновесное расстояние, т.е. межчастичное расстояние на котором сила взаимодействия обращается в ноль

t — модельное время в задаче

τ — шаг численного интегрирования

$'$ — операция дифференцирования по r

\cdot — операция дифференцирования на t

$\Pi(r)$ — потенциал межчастичного взаимодействия

$F(r)$ — сила межчастичного взаимодействия (проекция на ось, соединяющую две взаимодействующие частицы)

\bar{v} — скорость центра масс модельного объекта

$\mathbf{r}_k(t)$ — радиус-вектор k -ой частицы в момент времени t

$\mathbf{v}_k(t)$ — скорость k -ой частицы в момент времени t

$\mathbf{w}_k(t)$ — ускорение k -ой частицы в момент времени t

$\mathbf{F}_k^{\text{ex}}(\mathbf{r}_k, \dot{\mathbf{r}}_k)$ — суммарная внешняя сила, действующая на k -ую частицу

b_{fric}, B — коэффициент линейного вязкого трения

$\Pi_0(r)$ — потенциал Леннарда-Джонса

$F_0(r)$ — сила взаимодействия Леннарда-Джонса

a_{cut_0} — радиус обрезания для несжатого несглаженного взаимодействия

b_0 — расстояние разрыва связи Леннарда-Джонса (расстояние на котором производная от силы взаимодействия обращается в ноль)

C_0 — жесткость межчастичной связи Леннарда-Джонса вблизи положения равновесия

T_0 — период малых колебаний частицы вблизи положения равновесия в неподвижном потенциальном поле Леннарда-Джонса

B_0 — критический коэффициент линейного вязкого трения для частицы при котором она перестает совершать колебательные движения вблизи положения равновесия для взаимодействия Леннарда-Джонса

v_{dis_0} — скорость диссоциации для взаимодействия Леннарда-Джонса (минимальная скорость, которую надо сообщить неподвижной частице, находящейся в положении равновесия, чтобы она улетела на бесконечность)

v_{long2D_0} — скорость продольной волны в двумерной гексагональной плотноупакованной решетке (ГПУ-решетка, в двумерном случае называется также треугольной) при межчастичном взаимодействии Леннарда-Джонса

k_{v_0} — коэффициент динамичности для двумерного материала Леннарда-Джонса
нижний индекс 1 — аналогичные обозначения для сглаженного взаимодействия Леннарда-Джонса

$k(r)$ — сглаживающая функция

α — коэффициент хрупкости, задаваемый в $k(r)$

$r_{loc\ max_1}$ — точка локального максимума потенциальной энергии сглаженного взаимодействия

верхнее подчеркивание $\tilde{\cdot}$ — аналогичные обозначения для сжатого сглаженного взаимодействия Леннарда-Джонса

c — коэффициент сжатия, используемый при сжатии взаимодействия $F_1(r)$

$\tilde{\alpha}lpha$ — используемый в модельном материале коэффициент хрупкости

\tilde{c} — используемый в модельном материале коэффициент сжатия

x, y — горизонтальная и вертикальная координатные оси соответственно

v_{rand} — начальное значение девиации скоростей частиц

v_{dev} — девиация скоростей частиц (СКО от \bar{v})

v_{dev}^* — предельное значения девиации скоростей частиц

σ — тензор напряжений Гамеля, Каппуса, Треффтца

σ_x и σ_y — компоненты xx и yy тензора напряжений σ соответственно

σ_* — единица измерения напряжений

σ_{int} — интенсивность напряжения σ

σ_{int}^* — предельное значения интенсивности напряжений

σ_x^0, σ_y^0 — напряжения в исходной (недеформированной) конфигурации

k_σ — безразмерный коэффициент, определяющий инерционность баростата

κ_σ — баростатический коэффициент [31]

Δc — изменение коэффициента сжатия силы за итерацию

\tilde{P}_* — единица измерения сжимающего давления (такое растягивающее напряжение, которое надо приложить к одной паре противоположных граней идеального монокристалла со сжатым сглаженным взаимодействием, чтобы он разрушился (ненагруженные грани — свободные))

P — текущее сжимающее образец давление

P_{max} — максимальное сжимающее образец давление

ΔP — изменение сжимающего образец давление за итерацию

v_{imp} — скорость верхнего слоя частиц в тесте на определение скорости продольной волны в поликристаллическом образце

ε_x — деформация вдоль горизонтальной оси x

ε_y — деформация вдоль вертикальной оси y

ε_{cr} — критическая деформация на растяжение

$\Delta\varepsilon$ — изменение деформации за итерацию теста на растяжение

t_0 — минимальное время расчета итерации теста на растяжение

δ_v — предельная девиация скоростей частиц на единицу растягивающей деформации

E — модуль Юнга

ν — коэффициент Пуассона

W_* — характерный размер исследуемого образца (высота или ширина в зависимости от теста)

F_* — сила, которую надо приложить, чтобы разорвать образец в тесте на растяжение

T_* — время, за которое продольная волна деформации (звуковая волна в образце) пройдет характерный размер образца

k — отношение большей стороны образца к меньшей (соотношение высоты к ширине в тесте на определение скорости продольной волны в поликристалле)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] H.J.Herrmann and S.Luding. *Review article: Modeling Granular Media on the Computer.* 1998
- [2] Y. Wang, F. Tonon. *Calibration of a discrete element model for intact rock up to its peak strength.* // Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, Vol. **34** (2010), pp. 447-469
- [3] P. A. Cundall, O. D. L. Strack. *A discrete numerical model for granular assemblies.* // Geotechnique, Vol. **29**, No. 1. (1979), pp. 47-65 Key: citeulike:9245301
- [4] R. M. Holt, T. Brandshaug, P. A. Cundall. *Discrete particle and laboratory modelling of core mechanics.* // In 4th North American rock mechanics symposium (2000)
- [5] U. Groh, H. Konietzky, K. Walter, M. Herbst. *Damage simulation of brittle heterogeneous materials at the grain size level.* // Theor. and Appl. Fracture Mech. **55** (2011) pp. 31–38
- [6] E. Saether. *A Multiscale Method for Simulating Fracture in Polycrystalline Metals.* // Dissertation at the Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University, 2008
- [7] H. Ogawa, F. Wakai and Y. Waseda. Molecular Dynamics Simulation of the Model Grain Boundary Structure of Polycrystalline Materials. // Molecular Simulation, Vol. **18**, Issue 3, 1996, pp.179-192
- [8] A.Krivtsov. *Molecular Dynamics Simulation of Impact Fracture in Polycrystalline Materials.* // Meccanica **38**, 2003, pp.61–70
- [9] L. Jing. *A review of techniques, advances and outstanding issues in numerical modeling for rock mechanics and rock engineering.* // International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, vol. 40, Apr. 2003, pp. 283–353.
- [10] P.A.Lindqvist, H.H. Lai, O. Alm. *Indentation fracture development in rock continuously observed with a scanning electron microscope.* // Int. J. of Rock.Mech.and Mining Sci.&Geomech.Abstracts, vol.**21**, 1984, pp.165-182
- [11] R.Ahmadov. *Microtextural, Elastic and Transport Properties of Source Rocks.* // Dissertation at the Departament of Geophys. of Stanford University, 2011

- [12] B.K.Atkinson and V.Avdis. *Fracture mechanics parameters of some rock-forming minerals determined using an indentation technique.* // Int. J. of Rock. Mech. Sci.&Geomech. Abstracts, vol.17, 1980, pp.383-386
- [13] P. Eloranta. *Rock Mechanics: A Challenge for Society.* // Proceedings of the ISRM Regional Symposium Eurock 2001, Finland
- [14] S.Wang, F.Bingjun, Z.K.Li. *Frontiers of Rock Mechanics and Sustainable Development in the 21st Century.* // Proceedings of 2nd Asian Rock Mechanics Symposium 2001
- [15] S.Gstalder and J.Raynal. *Measurement of some mechanical properties of rock and their relationship to rock drillability.* // J. of Petroleum Technology, vol. 18, 1966, p.991-996
- [16] X.L.Zhao and J.C.Roegiers. *A fracture mechanics approach to rock drilling .* // The 35th U.S. Symposium on Rock Mechanics (USRMS), 1995
- [17] Wiercigroch M., Krivtsov A.M., Wojewoda J. *Dynamics of Ultrasonic Drilling of Hard materials.* In Wiercigroch M. and de Kraker A. eds. // Applied Non-linear Dynamics and Chaos of Mechanical Systems with Discontinuities. World Scientific. 2000. 403-444.
- [18] Г.П. Черепанов. *Механика хрупкого разрушения.* // М.: Наука, 1974.
- [19] Н.М. Беляев. *Сопротивление материалов.* // М.: Наука, 1965.
- [20] Heinrich M. Jaeger and Sidney R. Nagel. *Granular solids, liquids, and gases.*// Rev. Mod. Phys., Vol. 68, No. 4, October 1996
- [21] Клейн Г.К.. *Строительная механика сыпучих тел.* // Изд.2-е, перераб. и доп., 256 стр., М., Стройиздат: 1977
- [22] Jacques Duran. *Sands, Powders, and Grains: An Introduction to the Physics of Granular Materials (Partially Ordered Systems).* // Springer, 1 edition, 1999, 245 pages
- [23] Alberto Di Renzo, Francesco Paolo Di Maio. *Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes.* // Chemical Engineering Science, 59,(2004) pp. 525–541,
- [24] G. William Baxter and R.P. Behringer. *Cellular automata models for the flow of granular materials.* //Physica D 51, 1991, pp.465-471

- [25] Stefan Luding. *Introduction to Discrete Element Method. Basics of Contact Force Models and how to perform the Micro-Macro Transition to Continuum Theory.* //EJECE, Discrete modelling of geomaterials, 12/2008, pp.785-826
- [26] Hairer, Ernst, Lubich, Christian, Wanner, Gerhard. *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations.* // Series: Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 31, 2006
- [27] Н.И. Амелькин. *Кинематика и динамика твердого тела.* // М.: Учебное пособие МФТИ, 2000
- [28] I.S. Pavlov, A.I. Potapov, G.A. Maugin. *A 2D granular medium with rotating particles.* // Int. J. Solids and Structures, 2006, vol.43, p.6194-6207
- [29] А.И. Лурье. *Нелинейная теория упругости.* // М.: Наука, 1980, 512 стр.
- [30] М.А.Калмыкова. *Потенциалы взаимодействия и потенциальная энергия простых кристаллических решеток.* // Диссертация на соискание академической степени магистра, 2011
- [31] А.М. Кривцов. *Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой.*// М.: Физматлит. 2007. 304 с.
- [32] Anton M. Krivtsov, Ekaterina E. Pavlovskaia, Marian Wiercigroch. *Impact fracture of rock materials due to percussive drilling action.* // Proceedings XXI ICTAM, 15–21 August 2004, Warsaw, Poland.
- [33] J.B.Walsh. *The Effect of Cracks on the Compressibility of Rock.* //J. of Geophysical Research, vol.70, No.2, 1965, pp.381-389
- [34] Z. Fan, Y. Wu, X. Zhao, Y. Lu. *Simulation of polycrystalline structure with Voronoi diagram in Laguerre geometry based on random closed packing of spheres.* // Computational Materials Science, vol. **29**, 2004 pp. 301–308
- [35] J. Ing, E. Pavlovskaia, M. Wiercigroch, I. Asonov, I. Berinskiy. *Particle Dynamics to Model Brittle Rocks.* // Proceedings of Summer School-Conference "Advanced Problems in Mechanics", St. Petersburg, 2010
- [36] H.Gao, Y.Huang , F.Abraham. *Continuum and atomistic studies of intersonic crack propagation.* // J. of Mech. and Phys. of Solids, **49**, 2001, pp.2113 – 2132
- [37] Vitaly A. Kuzkin, Igor E. Asonov. *Vector-based model of elastic bonds for DEM simulation of solids.* // Sent to Phys.Rev.E, February 15, 2012

- [38] P.A. Cundall and O.D.L. Strack. *A bonded-particle model for rocks.* // *Geotechnique* **29** 47 (1979).
- [39] W.G. Hoover, *Molecular dynamics.* // Lecture Notes in Physics, Vol. 258, (Springer, Berlin, 1986), p. 138.
- [40] M.P. Allen and D.J. Tildesley, *Computer simulation of liquids.* // Clarendon Press, Oxford, 1987, p. 385.
- [41] D.O. Potyondy and P.A. Cundall. // *Int. J. of Rock Mech. & Min. Sc.* **41** 1329 (2004).
- [42] Y. Wang. // *Acta Geotechnica* **4** 117 (2009).
- [43] S. Cole and D. Curry. // *Proceedings of WCPT6*, Nuremberg, 2010.
- [44] M.F.H. Wolff, V. Salikov, S. Antonyuk, S. Heinrich, V.A. Kuzkin and G.A. Schneider. // *Proceedings of Summer School-Conference "Advanced Problems in Mechanics"*, St. Petersburg, 2011.
- [45] M. Khanal, W. Schubert and J. Tomas.// *Granular Matter* **7** 83 (2005).
- [46] A. Refahi, J.A. Mohandes and B. Rezai. // *J. of The Southern African Institute of Mining and Metallurgy* **109** 709 (2009).
- [47] S. Deng, R. Podgorney and H. Huang. // *Proceedings of 36 Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*, Stanford, 2011.
- [48] S. Antonyuk, S. Palis and S. Heinrich. // *Powder Technology* **206** 88 (2011).
- [49] S.L. Price, A.J. Stone and M. Alderton. // *Mol. Phys* **52** 987 (1984).
- [50] E.A. Ivanova, A.M. Krivtsov, N.F. Morozov and A.D. Firsova. // *Mechanics of Solids* **38** 101 (2003).
- [51] E.A. Ivanova, A.M. Krivtsov and N.F. Morozov. // *J. App. Math. and Mech.* **71** 543 (2007).
- [52] I.E. Berinskii, E.A. Ivanova, A.M. Krivtsov and N.F. Morozov. // *Mechanics of Solids* **42** 663 (2007).
- [53] A.P. Byzov and E.A. Ivanova, *Mathematical modeling of moment interactions between particles with rotational degrees of freedom.* // NTV SPbSTU, No. 2, 2007, p.260 [in Russian].

- [54] V.A. Kuzkin and A.M. Krivtsov. // Doklady Physics **56** 527 (2011).
- [55] P.A. Zhilin, *Theoretical mechanics. Fundamental laws of mechanics.* // SPb.: SPbSTU, 2003, p.353 [in Russian].
- [56] I.E. Berinsky, *Rod model for graphene crystal lattice.* // NTV SPbSTU, No. 3, 2010, p.12 [in Russian].
- [57] P.A. Zhilin, *Applied mechanics. Theory of thin elastic rods.* . // SPb: SPbSTU, 2006, p.98 [in Russian]
- [58] J.R. Hutchinson. // J. Appl. Mech. **68** 87 (2001).