Министерство образования и науки Российской Федерации

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Физико-механический институт

Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите

Директор ВШТМиМФ,

д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН

_____ А. М. Кривцов

«___»_____2022 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Сравнение упругих модулей аморфного материала, полученных путем моделирования методом динамики частиц

по направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

профиль

01.03.03_03 Математическое моделирование процессов нефтегазодобычи

Выполнил

студент гр. 5030103/80301 А. А. Алтаева

Руководитель

Доцент ВШТМиМФ, к.т.н И. В. Курта

Санкт-Петербург

2022

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

Физико – механический институт

Высшая школа теоретической механики и математической физики

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А. М. Кривцов

«__»_____20__г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

студенту Алтаевой Аружан Асылбековне, гр. 5030103/80301

1. Тема работы: Сравнение упругих модулей аморфного материала, полученных путем моделирования методом динамики частиц.

2. Срок сдачи студентом законченной работы: 06.06.2022

3. Исходные данные по работе: научные публикации по теме работы.

4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): Реализация математической модели аморфного материала, проведение экспериментов для нахождения упругих модулей, анализ полученных данных.

5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено.

6. Консультанты по работе: А. Д. Ершов.

7. Дата выдачи задания 13.05.2022

Руководитель ВКР _____ И. В. Курта

Задание принял к исполнению 13.05.2022

Студент _____ А. А. Алтаева

РЕФЕРАТ

30 страниц, 11 рисунков, 1 таблица

МЕТОД ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ, УПРУГИЕ МОДУЛИ, АМОРФНЫЕ МАТЕРИАЛЫ, КОМПЬЮТЕРНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ОДНООСНОЕ РАСТЯЖЕНИЕ, ОДНООСНЫЙ ЧИСТЫЙ СДВИГ.

В данной работе была рассмотрена структура аморфного материала, смоделированная с помощью метода динамики частиц, с задаваемыми параметрами, а также была установлена связь между упругими модулями исследуемого материала. Работа состоит из нескольких частей: реализация модели аморфного материала, проведение экспериментов по одноосному растяжению и одноосному чистому сдвигу образца, анализ полученных данных.

THE ABSTRACT

30 pages, 11 pictures, 1 table

PARTICLE DYNAMICS, ELASTIC MODULES, AMORPHIC MATERIALS, COMPUTER MATHEMATIC SIMULATION, UNIAXIAL STRETCHING, UNIAXIAL PURE SHEAR STRETCHING.

In this paper, the structure of an amorphous material, modeled using the particle dynamics method, with specified parameters was considered, and a relationship was established between the elastic moduli of the material under study. The work consists of several parts: implementation of the model of amorphous material, conducting experiments on uniaxial stretching and uniaxial pure shear stretching of the sample, analysis of the dataset.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ 5

ГЛАВА 1. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ 7

ГЛАВА 2. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ 10

2.1. Уравнение движения 10

2.2. Метод Верле 10

2.3. Потенциал взаимодействия между частицами 12

2.4. Структура аморфного материала 14

ГЛАВА 3. ВОСПРОИЗВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ 18

3.1. Одноосное растяжение 18

3.2. Одноосный сдвиг 23

ГЛАВА 4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ 26

ЗАКЛЮЧЕНИЕ 33

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ 35

ВВЕДЕНИЕ

Не смотря на развитие альтернативных источников энергии, добыча полезных ископаемых, до сих пор является одной из важных отраслей получения топливных энергетических запасов. Поэтому развитие нефтегазовой отрасли в наше время все еще остается востребованным и актуальным направлением в науке. Но так как большинство явлений, которые исследуются в нефтегазовой отрасли, являются трудновоспроизводимыми с помощью натурных экспериментов, чаще всего в этой сфере прибегают к использованию математического моделирования. На примере моделирования гидравлического разрыва пласта [15], колебания жидкости в топливном баке при движении, течения промывочной жидкости в проточной части турбобура, а также расчет динамики, прочности и долговечности редукторной секции турбобура. Но, несмотря на это, одной из самых частых задач в нефтегазовой области является моделирование нефтесодержащего пласта. Как правило, он состоит из горных пород, которые являются аморфными материалами[3]. Такие материалы отличаются отсутствием кристаллической решетки, и до сих пор не существует хороших моделей для моделирования аморфного материала, по крайней мере методом динамики частиц, который имеет достаточно обширный спектр применения: начиная от описания процессов на наноуровне, до описания процессов межгалактических масштабов. Недавно этот метод начал довольно часто применятся для описания материалов на крупном масштабном уровне или по-другому мезоуровне [6]. Так как для того чтобы получить желаемые свойства модели, материал которой имеет случайную упаковку, является достаточно нетривиальной задачей, поэтому найти аналитически необходимые зависимости порой является невозможным.

Исходя из этого, мною было проведено исследование модели аморфного материала и встает вопрос о сходстве значений упругих модулей при различных экспериментах.

Формулировка проблемы

До сегодняшнего дня в методе динамики частиц соотношения для упругих характеристик рассматриваемых материалов и их параметров для некоторых двухмерных и трехмерных регулярных решеток, были получены аналитически. Однако, так как у регулярных упаковок присутствует дальний порядок, то есть они имеют определенный порядок частиц, то такие модели не подходят для описания аморфных структур.

Проблемой, решаемой в данной работе, является верификация модели в применимости к разным методам нагружения.

Цель:

Сравнить упругие модули аморфного материала, полученные путем моделирования метода динами частиц при одноосном растяжении и одноосном чистом сдвиге.

Для достижения поставленной цели, были поставлены следующие задачи:

1. Реализовать модель образца аморфного материала методом динамики частиц.
2. Провести серию экспериментов по численному расчету упругих характеристик образца из одноосного растяжения и одноосного чистого сдвига.
3. Проанализировать полученные данные по упругим модулям в разных направлениях.

ГЛАВА 1. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ

В последние годы метод динамики частиц широко применятся в различных областях физики и химии, но применение его для моделирования поведения твердых тел оказалось довольно мало.

Суть метода динамики частиц заключается в том, что тела представляются совокупность взаимодействующих частиц: материальных точек или твердых тел, движения которых описываются классическими уравнениями динамики. В то время, как классическая молекулярная динамика описывает взаимодействия непосредственно атомов и молекул в теле. На данный момент в качестве потенциалов взаимодействия используются различные феноменологические потенциалы – потенциалы, подогнанные под экспериментальные данные. Такие потенциалы имею несложную форму, что приводит к быстроте и точности моделирования. Однако, у различных материалов, имеющих структурные элементы, относящиеся к мезоуровневому масштабу, были открыты новые физические и механические свойства, в связи с этим возрос интерес к моделированию материалов, непосредственно методом динамики частиц.

Для проведения таких расчетов уже тяжело придерживаться концепций молекулярной динамики, так как количество частиц в системе становится слишком большим. Поэтому удобно пользоваться именно динамикой частиц, где «частицами» на самом деле и будут представляться исследуемые элементы материала на мезо- и макроуровнях, к примеру зерна в ферромагнетиках или матрица с включениями в композитных материалах. Такой подход развивается как альтернатива, а скорее даже дополнение, к классическому континуальному описанию сред при сильных деформациях и разрушениях, при изучении сыпучих или гранулированных сред. При этом на мезоуровне выделяют, как правило, две составляющих межчастичного взаимодействия: центральную (продольную) и касательную. Так же отдельному рассмотрению подлежат различные непотенциальные силы, особенно важные при касательном

направлении. Из-за широкой применимости метода выделяют несколько его разновидностей, отличающихся не столько по сути, сколько по области применения: метод дискретных элементов, «крупнозеренная» молекулярная динамика, динамика мезочастиц и другие.

Главным преимуществом такого подхода к описанию материалов, по сравнению с континуальными методами, является то, что метод динамики частиц требует гораздо меньше априорных знаний о материале и его свойствах. Так с использованием только простейшего потенциала межчастичного взаимодействия, например потенциала Леннарда-Джонса, представляется возможным моделирование обширного спектра эффектов, вплоть до самых сложных: разрушение, пластичность, образование трещин, фазовые переходы и даже температурные изменения свойств материала. Для описания таких эффектов континуальными подходами необходима отдельная теория с определяющими уравнениями, в то время как для учета оных в методе динамики частиц эффекты воспроизводятся машинально при интегрировании уравнения движения.

Как уже было сказано все свойства материала в описании механикой сплошных сред определяются выбором определяющих уравнений, которые в свою очередь, могут иметь достаточно сложную структуру, а также трудности при интегрировании теорий друг с другом. В методе динамики частиц в свою очередь все определяется выбором потенциала межчастичного взаимодействия. Вид последнего в разы проще и имеет, как правило меньше варьируемых параметров, и представляется скалярной функцией от расстояния между частицами, тогда как определяющие уравнения представляют собой сложные операторы, которые несут в себе не только различные термодинамические характеристики, но и тензорные величины напряженного состояния и деформирования. Для задания необходимых свойств материалу с помощью феноменологического потенциала, константы в последнем, как правило согласуются так, чтобы удовлетворять

экспериментальным данным, откуда и произошло название – феноменологический.

ГЛАВА 2. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

2.1. Уравнение движения

В данной работе рассматривалась совокупность из взаимодействующих между собой частичек. Уравнения движения для i-ой частицы представлено в виде формулы (1):

$$m\ddot{\underline{r}}_i = \sum_{i \neq j} F_{ij}(\underline{r}_{ij}) - \beta \dot{\underline{r}}_i \qquad (1)$$

Здесь m – масса частицы, $F_{ij}(\underline{r}_{ij})$ – сила, действующая со стороны i-ой на j-ую частицу, $\underline{r}_{ij}$ – радиус-вектор, соединяющий i-ую и j-ую частицы, $\underline{r}_i$ – радиус-вектор i-ой частицы. А также была введена вязкость β для того, чтобы устаканить колебания, которые возникнут в образце.

В уравнении (1) учитываются только парные взаимодействия между частицами. Если смотреть с математической точки зрения, то моделирование методом частиц представляет собой решение задачи Коши уравнения (1). В начальные условия входят координаты каждой частицы и координаты ее скорости.

2.2. Метод Верле

Для интегрирования уравнения под номером (1) есть достаточное разнообразие способов. Надобность в интегрировании большой численности уравнений является одной из характеристик метода молекулярной динамики частиц.

И одним из наиболее часто встречающихся и достаточно легких способов интегрирования можно выделить алгоритм Верле [13], или по-другому метод «leap frog», что в переводе с английского означает «прыжки лягушки», в соответствии которому при помощи настоящего и предыдущего

местоположения, можно вычислить положение самой частицы, не находя скорость.

$$x_{k+1} = 2x_k - x_{k-1} + a\Delta t^2 \tag{2}$$

где $a = \frac{F}{m}$ –ускорение частицы.

Как было сказано выше, что алгоритм довольно прост в своем применении, в котором не учитываются скорости частицы. Что не скажешь о методе центральных разностей, решающийся уравнениями, представленными ниже формулой (3)

$$\begin{gathered} v_{i+\frac{1}{2}} = v_{i-\frac{1}{2}} + a\Delta t \\ x_{i+1} = x_i + v_{i+\frac{1}{2}}\Delta t \end{gathered} \tag{3}$$

Этот метод будет идентичен алгоритму Верле, при исключении из уравнения (3) скорости. В этом случае, появляется необходимость найти помимо координат, скорость частиц при каждом последующем шаге. В то же время скорости частиц определяются на каждом полушаге. В науке существует множество вариантов метода Верле и центральных разностей, но большая часть из них при различной схеме интегрирования дает как раз-таки одинаковые траектории частиц. А для наиболее точного расчета используется, например, метод Нордзика [6], при помощи которого можно добиться довольно высокой точности при малых шагах интегрирования, нежели метод Верле и подобные ему методы. Метод Верле может оказаться в 3, 4 или 5 раз точнее, в отличии метода Норзика, для интегрирования больших шагов, часто применяющихся в методе частиц.

В данной задаче при выполнении условия (4), будет выполнятся сходимость метода:

$$\Delta t < \frac{1}{20}T \tag{4}$$

где T – период колебаний, соответствующей силе F.

2.3. Потенциал взаимодействия между частицами

В науке применяется довольно большое количество потенциалов взаимодействия. И основное его свойство заключается в том, что частицы при приближении друг к другу будут отталкиваться $(r < a)$, а при удалении друг от друга, они начнут притягиваться $(r > a)$, при этом если частицы будут находиться друг от друга на значительном расстояние $(r > 2a)$, тогда сила и потенциал взаимодействия будут стремиться к нулю. Где a является равновесным расстоянием между частицами. Написанное выше строго относится к двухатомной молекуле и двухатомному кристаллу, в котором учитывается взаимодействие частиц, находящихся на достаточно близком друг от друга расстоянии. Что касается потенциала Леннарда-Джонса, рассматриваемого в данной работе, то его потенциал (формула 5) и сила (формула 6) взаимодействия выглядят следующим образом:

$$\Pi(r) = D\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right] \tag{5}$$

$$f(r) = \frac{12D}{a}\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{13} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^{7}\right] \tag{6}$$

где D –энергия связи, a –длина связи, то есть расстояние, на котором сила взаимодействия обращается в ноль. Эти параметры являются размерными величинами.

Ниже на рисунках 1 и 2 представлены графики потенциала и силы взаимодействия Леннарда-Джонса.

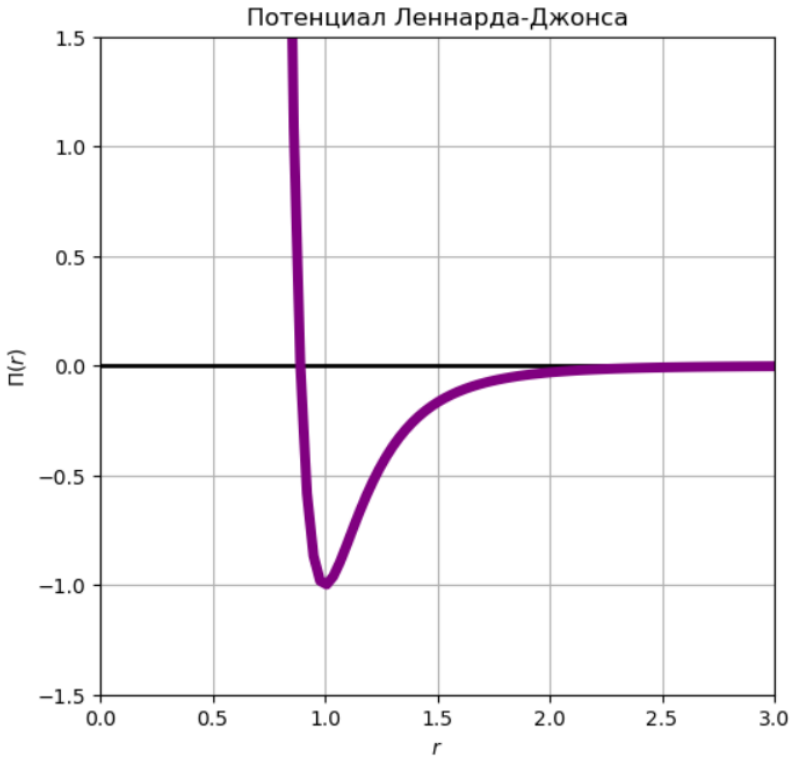

Рис.1. График потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса.

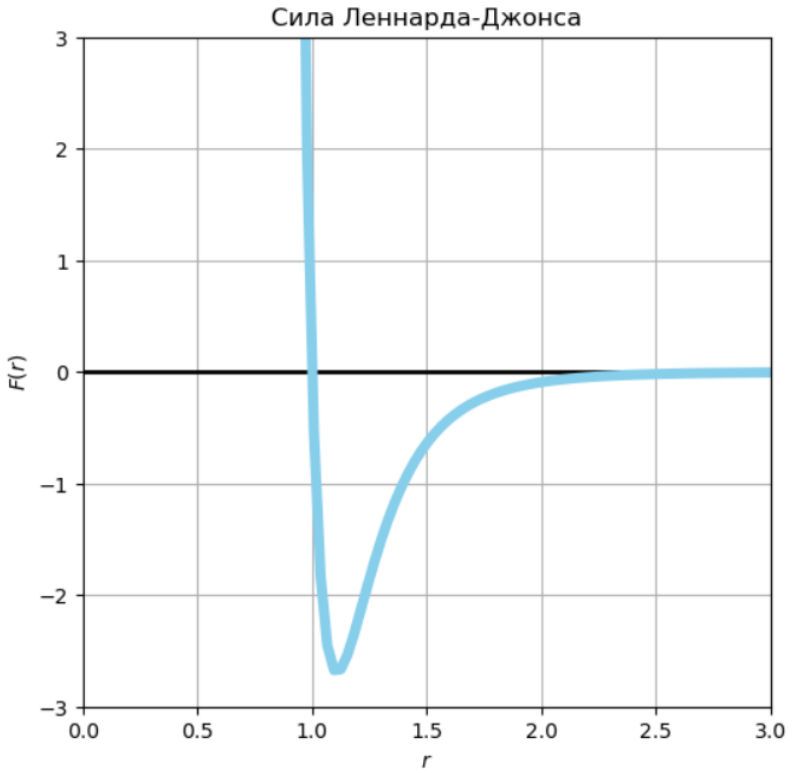

Рис.2. График силы взаимодействия Леннарда-Джонса.

Жесткость связи C, частота колебаний ω и период колебаний T для этого потенциала соответственно будут равны:

$$C = \frac{72D}{a^2} \tag{7}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{m}} = \sqrt{\frac{72D}{ma^2}} \tag{8}$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\sqrt{\frac{ma^2}{72D}} \tag{9}$$

Потенциал Леннарда-Джонса, по сути, допускает удовлетворению значения только одного макроскопического параметра, например, если рассматривать статику, то это предел прочности и модуль упругости, если же речь идет о динамике, то это скорость распространения продольных волн. Однако с помощью этого потенциала взаимодействия можно описать силы взаимодействия Ван-дер-Ваальса, причем с довольно высокой точностью. Эти силы взаимодействия в твердых телах играют довольно важную роль. Помимо этого, одним из главных достоинств потенциала Леннарда-Джонса является его простота в вычислениях. Его также часто применяют в виде классического модельного потенциала, особенно в работах, где основной задачей является исследование общих физических законов, а не получение точных количественных и качественных результатов.

2.4. Структура аморфного материала

Аморфные вещества — это те вещества, у которых по всему объему отсутствует определенный порядок расположения атомов или молекул. То есть такие материалы не имеют кристаллической решетки, у них в

расположении молекул присутствует только ближний порядок. К таким веществам можно отнести: стекло, жевательная резинка, воск, пластилин, смола и др. На рисунке 3, представленном ниже, изображена плоская схема расположения молекул кварца (а) и кварцевого стекла (б), который представляет собой аморфное тело.

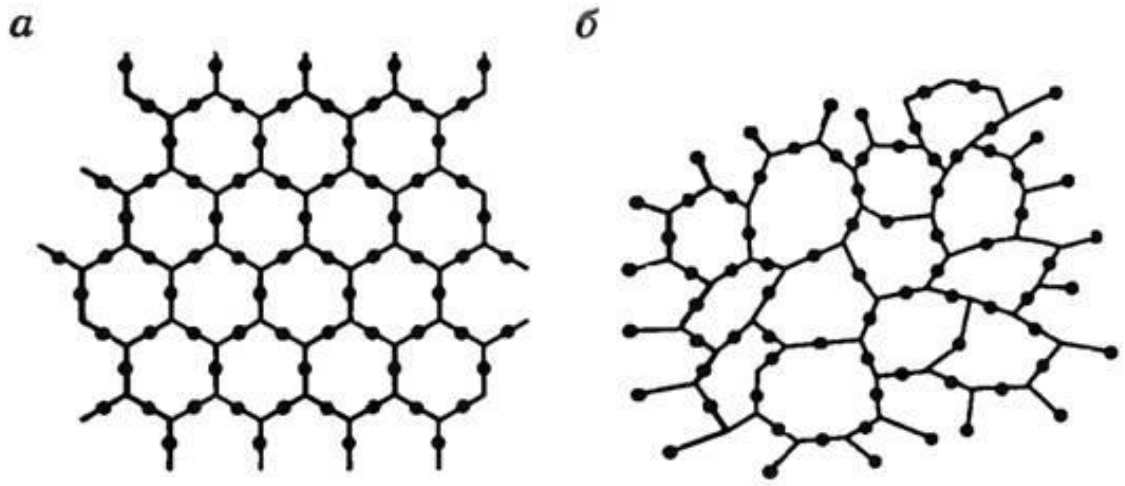

Рис.3. Плоская схема расположения молекул кварца (а) и кварцевого стекла (б).

Для получения модели аморфного материала, нужно добиться смещения частиц из положения в кубической решетке, а это, в свою очередь, надо для того, чтобы обеспечить случайность упаковки частиц и нарушение дальнего порядка, как представлено на рисунке 4.

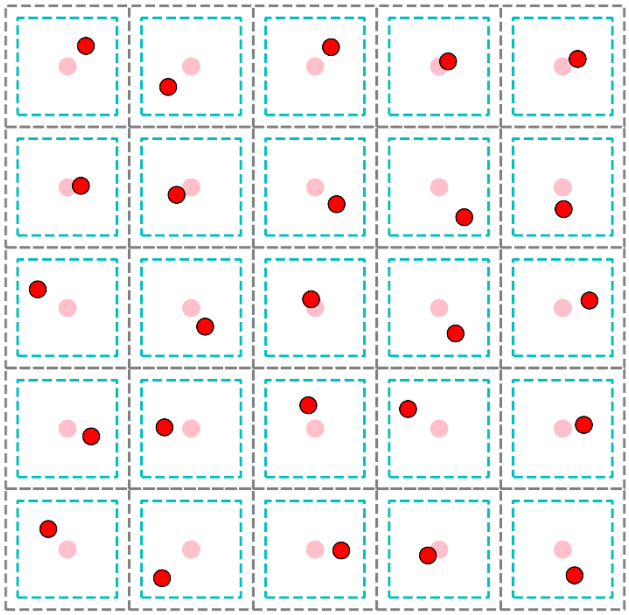

Рис.4. Структура моделируемого материала.

При расчетах методом динамики частиц значительная часть компьютерного времени требуется для вычисления сил взаимодействия между частицами. Для этого в начальной конфигурации задается наличие связи между частицами, если расстояние между ними не превышает радиус обрезания r_{cut}, изображенном на рисунке 5.

$$r_{cut} = \alpha L \tag{10}$$

где L –характеристический размер образца, α – коэффициент пропорциональности между радиусом обрезания и характеристическим размером образца.

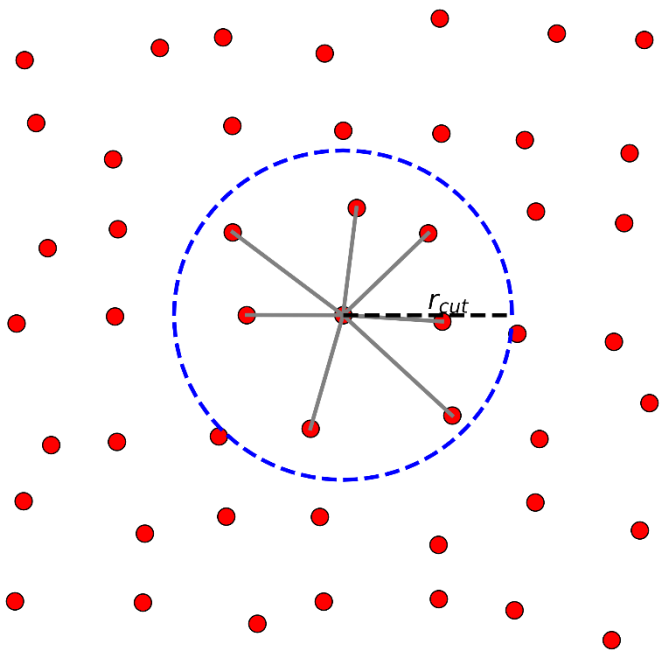

Рис.5. Установление наличия связи между частицами.

В потенциале для данной пары частиц равновесное расстояние a будет принято как расстояние между ними в начальной конфигурации. В результате, получаем в начальный момент времени ненапряженное состояние образца. Для корректировки наименьшей длины связи между частицами, а также шага по времени для численного интегрирования, требуется ограничить перемещение частиц.

Таким образом, в данной работе была получена математическая структура аморфного материала. В качестве положительных свойств данной модели представляется возможным выделение таких качеств как простота задания образца материала.

ГЛАВА 3. ВОСПРОИЗВЕДЕНИЕ ЭКПЕРИМЕНТОВ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ

3.1. Одноосное растяжение

Одним из методов нахождения механических характеристик материала и видов деформации является одноосное растяжение. Модули упругости – величины, характеризующие упругие свойства материала. В рассмотрении малых деформаций, модули упругости представляются в виде коэффициента пропорциональности между напряжениями и деформациями, которые имеют линейную зависимость друг с другом, в силу справедливости закона Гука. Модуль упругости, расположенный вдоль длины, или, по-другому, модуль Юнга E соответствует в направлении растяжения одностороннему нормальному напряжению σ, который возникает при простом из видов деформирования, а именно растяжении или сжатии. Модуль Юнга можно посчитать, как отношение нормального напряжения σ к относительному удлинению ε, которое вызывается этим напряжением в направлении его действия, и определяет способность материала сопротивляться растяжению.

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} \tag{11}$$

Также к упругим характеристикам материала можно отнести постоянную величину, называемую коэффициентом Пуассона ν. Он равен отношению относительного поперечного сжатия сечения ε' к относительному продольному удлинению ε, взятым с противоположным знаком.

$$\nu = -\frac{|\varepsilon'|}{\varepsilon} \tag{12}$$

Если исследуемый материал является изотропным, то есть его физические свойства не зависят от выбора направления в материале, тогда, соответственно, и упругие модули будут равны между собой по всем направлениям. Далее будет проводиться расчет упругих характеристик при растяжении образца вдоль каждой из трех осей. Это один из распространенных способов механических опытов. Также, используя этот метод, можно довольно просто получить диаграмму, описывающую растяжение, изображенной на рисунке 6.

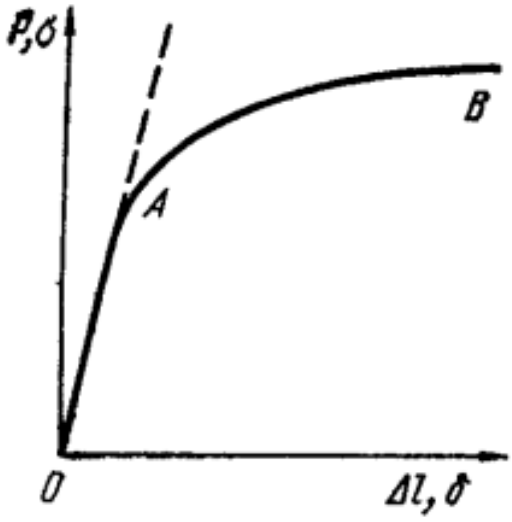

Рис. 6. Диаграмма, описывающая растяжение.

Если посмотреть на диаграмму, то можно заметить, что ОА является прямолинейным участком данной диаграммы, то есть на нем отношение удлинения к напряжению будет иметь постоянную величину, а также этот участок описывает упругую деформацию. Величина модуля Юнга, а именно соотношения, которое соответствует формуле 11, и определяет, так сказать, жесткость материала. Исходя из того, что диаграмма берет свое начало из точки нуль, и что участок ОА является прямолинейным, то для того, чтобы

восстановить модуль Юнга необходима всего одна точка. В данной работе рассматривается только упругие деформации.

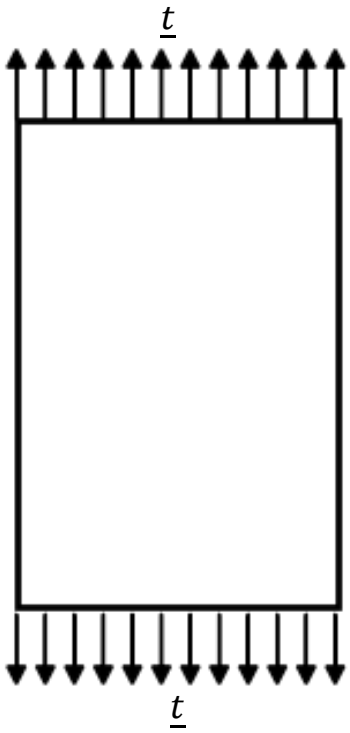

Рис.7. Схема одноосного растяжения.

Математическая постановка задачи:

На рисунке 7 показано, что равномерная нагрузка по каждой из трех осей прикладывается к горизонтальным поверхностям полученного образца. А вертикальные поверхности, в свою очередь, остаются свободными от нагрузки, то есть на них не действует никакая нагрузка. Далее перейдем к математической модели образца, для этого рассмотрим систему уравнений.

Уравнение равновесия записываются в виде:

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \tag{13}$$

Так как в работе рассматривается линейно-упругий материал, то обобщенный закон Гука для него будет иметь вид:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{{}^{4}C}} \cdot\cdot \underline{\underline{\varepsilon}} \tag{14}$$

где $\underline{\underline{\varepsilon}}$ −тензор деформаций, $\underline{\underline{{}^{4}C}}$ −тензор модуля упругости четвертого ранга.

Тогда граничные условия примут вид:

$$\underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}}|_{y=\pm L} = \underline{t} \tag{15}$$

где $\underline{n}$ − вектор нормали, а $\underline{t}$ −вектор напряжений.

Определение модуля Юнга:

В данной работе рассматривались напряжения, возникающие и влияющие на частицы только в серединном слое. Поэтому модуль Юнга при растяжении по оси X равен отношению напряжений к относительной деформации, как показано на рисунке 8.

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon_x} \tag{16}$$

$$\sigma = \frac{\sum_i F_{xi}}{S} \tag{17}$$

где F_{xi} −сила взаимодействия между частицами, S −площадь слоя.

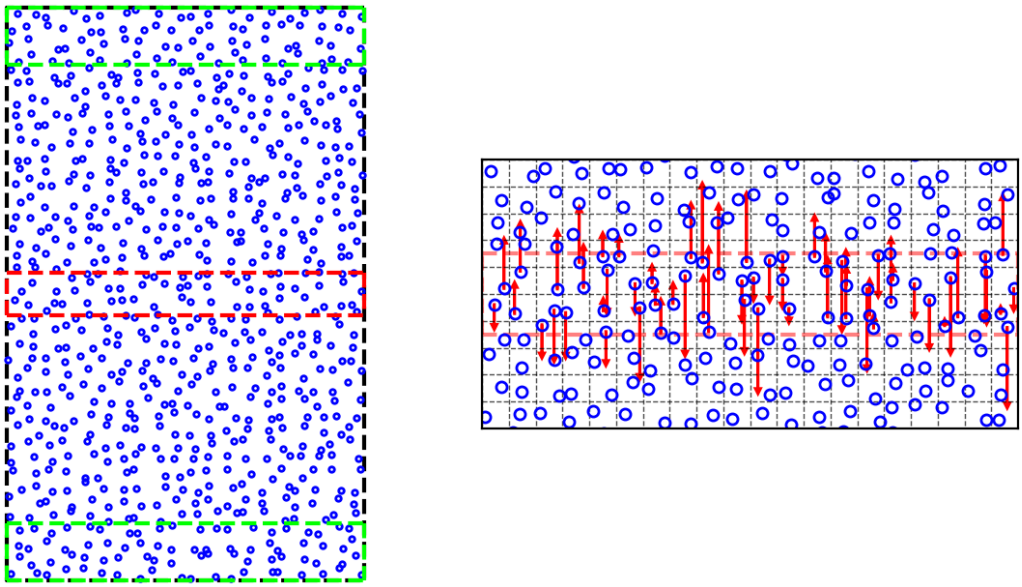

Рис.8. Силы, влияющие на частицы в серединном слое.

Нахождение коэффициента Пуассона:

Что касается коэффициента Пуассона, то при растяжении образца вдоль оси X, он равен отношению относительной деформации по осям Y, Z к относительному удлинению по оси X, с противоположным знаком.

$$\nu_y = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x} \tag{18}$$

$$\nu_z = -\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_x} \tag{19}$$

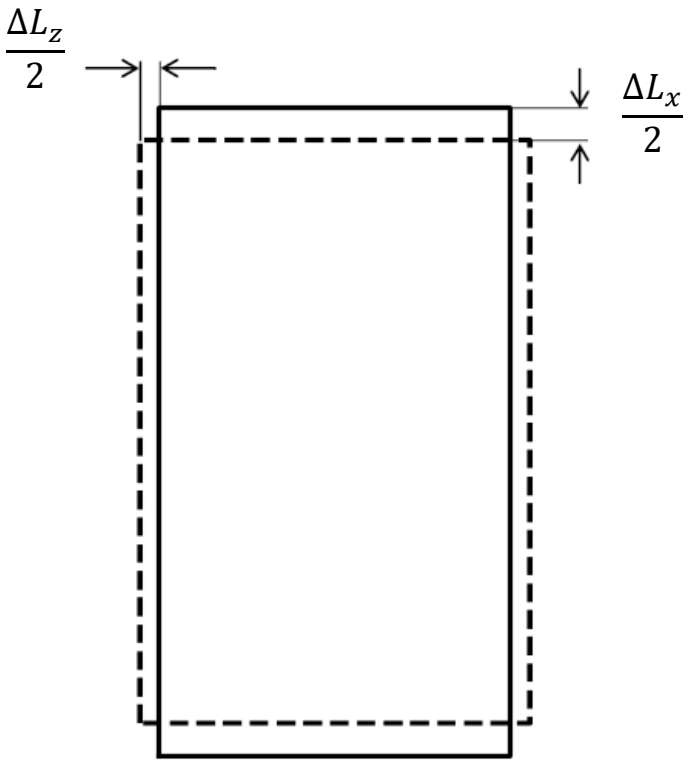

Рис.9. Определение коэффициента Пуассона.

3.2 Одноосный чистый сдвиг

Вторым методом определения механических характеристик материала рассматривался одноосный чистый сдвиг. Напряженному состоянию чистого сдвига, при котором по двум взаимно перпендикулярным площадкам действует только касательные напряжения, соответствует модуль сдвига G. Он вычисляется как отношение касательного напряжения t к величине угла сдвига γ, который определяет искажение прямого угла между плоскостями, по которым, в свою очередь, действуют касательные напряжения.

$$G = \frac{t}{\gamma} \tag{20}$$

$$t = \frac{F}{A} \tag{21}$$

где F −сила, приложенная к грани, A −площадь поверхности грани.

Также с помощью модуля сдвига можно определить, способен ли материал сопротивляться изменению формы при сохранении объема. При таком методе деформирования удлинение сторон образца отсутствует. Главные напряжения — растягивающие и сжимающие при чистом сдвиге будут равны между собой, а также равны экспериментальным величинам касательных напряжений.

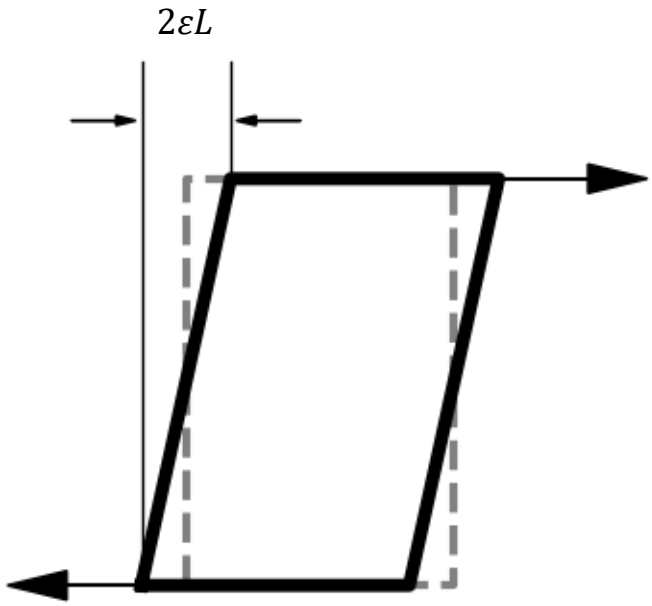

Рис.10. Схема одноосного чистого сдвига.

При действии напряжения t происходит сдвиг на угол γ. Исходя из геометрии можем рассчитать:

$$tg\gamma = 2\varepsilon \tag{22}$$

Учитывая малость деформаций, можем сделать предельный переход, а именно:

$$\gamma = 2\varepsilon \tag{23}$$

Далее подставляя выражение (22) в уравнение (20), получим искомое уравнение для нахождения модуля сдвига:

$$G = \frac{t}{2\varepsilon} \tag{24}$$

В общем и целом, математическая постановка задачи для одноосного чистого сдвига не отличается от математической постановки задачи для одноосного растяжения, за исключением граничных условий.

Граничные условия:

$$\underline{\tau} \cdot \underline{\underline{\sigma}}|_{y=\pm L} = \underline{t} \tag{25}$$

где $\underline{\tau}$ −вектор касательной к плоскости, $\underline{\underline{\sigma}}$ − тензор напряжений.

ГЛАВА 4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Упругие свойства изотропного тела определяются двумя упругими постоянными, которые в свою очередь являются независимыми величинами. А если исследуемый материал является анизотропным, то упругие модуля такие как модуль Юнга E, модуль сдвига G и коэффициент Пуассона ν будут принимать в различных направлениях различные значения, а их величины могут принимать значения в довольно широком диапазоне значений. Структура анизотропного материала влияет на количество независимых упругих модулей. Если у анизотропного тела в упругих свойствах отсутствует симметрия, то такое тело будет иметь двадцать один упругий модуль. Однако в виду присутствия симметрии в материале число независимых модулей упругости будет сокращается [10].

В ходе данной работы была реализована модель аморфного материала, которая в дальнейшем использовалась для расчетов и получения экспериментальных значений.

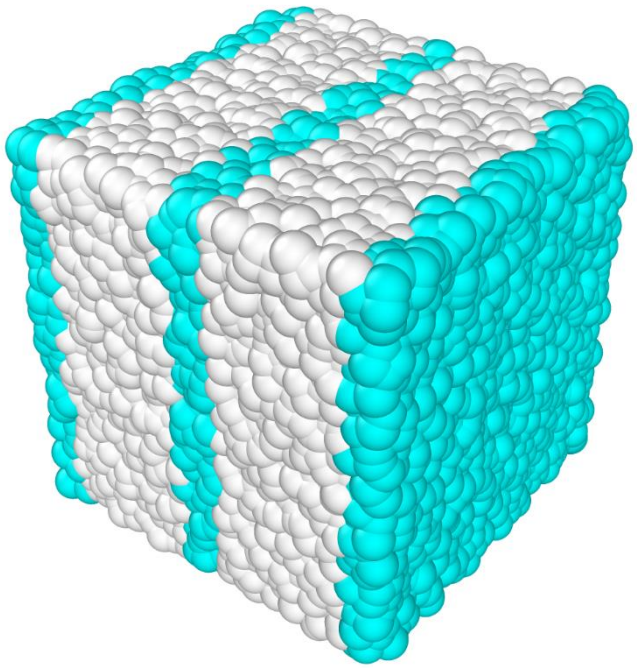

Рис.11. Структурная модель аморфного материала.

На рисунке 11 изображена модель исследуемого аморфного материала, на котором синим цветом выделены области, к которым приложены граничные условия и выделен серединный слой, по состоянию которого вычисляются значения упругих модулей. Выбор серединного слоя обусловлен принципом Сен—Венана, так как в нем меньшее влияние оказывают граничные условия. Он гласит о том, что напряженное состояние, находящееся на довольно удаленном расстоянии от места, куда прикладывается нагрузка, не будет зависеть от того, какой характер имеет приложенная нагрузка, но будет зависеть от выбора главного вектора и главного момента нагрузки. То есть с помощью принципа Сен—Венана допускается замена одних граничных условий на другие, которые удобны для статичных расчетов. Выполнить замену можно в том случае, когда равнодействующая сила и главный момент предложенной системы сил должны сохранить свои значения.

После проведения первых экспериментов были получены значения упругих модулей, а именно модуля Юнга E, модуля сдвига G и коэффициента Пуассона ν, которые, во-первых, должны были быть одинаковыми по всем трем направлениям, во-вторых, они должны соответствовать соотношению, указанному в формуле, описывающую зависимость модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига:

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \tag{26}$$

После проведения первой серии расчетов оказалось, что полученные упругие модули из различных экспериментов не совпадают, как по разным направлениям, так и по формуле (26), несмотря на идентичную структуру исследуемого образца. Так различия в модулях Юнга по разным направлениям достигало до x%, по коэффициентам Пуассона до y%, по модулям Сдвига до z%. Следовательно, можно сделать вывод о том, что в каждой отдельной

реализации получаемый образец является полностью анизотропным, без какой-либо симметрии.

Далее была выдвинута гипотеза: при усреднении по реализациям, полученные упругие модули могут удовлетворять поставленным требованиям.

Что было и сделано, после проведения большой серии экспериментов были получены значения упругих модулей, далее усреднив их значения по реализациям и подставив их в формулу (26), описывающую зависимость модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля сдвига, было получено соотношение с точностью до одного процента.

Затем для анализа полученных данных рассчитывались отклонения экспериментальных значений от осредненных по трем направлениям. В итоге получилось, что модуль Юнга имеет максимальное отклонение равное одному проценту, коэффициент Пуассона имеет максимальное отклонение равное трем процентам, а у модуля сдвига максимальное отклонение получилось равным двум процентам. Исходя из этого, можно сделать вывод, что полученная структура аморфного материала является изотропной.

Пример расчета погрешности:

Рассмотрим средние значения модуля Юнга по направлениям

$$< E_x >= 1173{,}77$$

$$< E_y >= 1196{,}68$$

$$< E_z >= 1185{,}07$$

Далее рассчитывается среднее значение по осредненным реализациям, оно равно отношению суммы осредненных значений по реализациям к количеству осредненных значений:

$$< E >= \frac{\sum < E_i >}{3}$$

Подставляем известные значения и получаем:

$$< E >= \frac{\sum < E_i >}{3} = \frac{1173{,}77 + 1196{,}68 + 1185{,}07}{3}$$

$$< E >= 1185{,}18$$

Затем считаем отклонения среднего значения от осредненных по реализациям значений:

$$\Delta < E_x >= \frac{|< E_x > - < E >|}{< E >} * 100\%$$

$$\Delta < E_y >= \frac{|< E_y > - < E >|}{< E >} * 100\%$$

$$\Delta < E_z >= \frac{|< E_z > - < E >|}{< E >} * 100\%$$

Подставляя полученные нами значения, получим:

$$\Delta < E_x >= \frac{|1173{,}77 - 1185{,}18|}{1185{,}18} * 100\%$$

$$\Delta < E_y >= \frac{|1196{,}68 - 1185{,}18|}{1185{,}18} * 100\%$$

$$\Delta < E_z >= \frac{|1185{,}07 - 1185{,}18|}{1185{,}18} * 100\%$$

Получаем:

$$\Delta < E_x >= 0{,}96195$$

$$\Delta < E_y >= 0{,}97046$$

$$\Delta < E_z >= 0{,}00851$$

Анализируя полученные результаты, видно, что самое большее отклонение от осредненных по реализациям значений равно 0,97046, то есть по направлению оси Y.

Аналогично рассчитывались погрешности и для остальных упругих модулей по их реализациям.

Ниже представлена таблица погрешностей со средними значениями по направлениям:

	$\Delta< E_i >$	$\Delta< \nu_x >$	$\Delta< \nu_y >$	$\Delta< \nu_z >$	$\Delta< G_x >$	$\Delta< G_y >$	$\Delta< G_z >$
X	0,961955		3,23678	1,675445		0,242266	0,442742
Y	0,970461	1,96541		1,338139	2,410692		1,019024
Z	0,008507	0,896029	0,038034		0,612098	0,094562	

Таблица 1. Значения погрешностей осредненных значений по направлениям.

Также были получены средние экспериментальные значения модуля сдвига и рассчитаны теоретические значения модуля сдвига по формуле (26).

$$< G_{exp} >= 471{,}132$$

$$< G_{teor} >= 466{,}093$$

Погрешность рассчитывается по формуле:

$$\Delta< G >= \frac{|< G_{exp} > -< G_{teor} >|}{< G_{teor} >} * 100\%$$

В итоге погрешность получилась равной:

$$\Delta < G >= 1{,}08094$$

Это говорит о том, что отклонение составляет 1%, то есть полученное экспериментальным путем, значение мало отличается от полученного теоретически.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе данной работы с помощью языкового пакета программирования Python была получена реализация модели аморфного материала. С помощью проведения численных экспериментов по одноосному растяжению и одноосному чистому сдвигу по всем трем направлениям были найдены упругие модуля, такие как модуль Юнга E, коэффициента Пуассона ν при таком виде деформации, как одноосное растяжение и модуля сдвига G при одноосном чистом сдвиге для различных структур модели аморфного материала.

Далее была предложена гипотеза, которая гласит, что при проведении серии расчетов и усреднении значений по реализациям, подставив которых в формулу зависимости модуля сдвига, модуля Юнга и коэффициента Пуассона, будет получена зависимость и сходимость результатов. Затем были посчитаны и получены погрешности в отклонениях от одного до трех процентов. Усредненные по реализациям упругие модули, полученные на разных экспериментах, прошли верификацию по формуле (26), что позволяет сделать вывод о применимости модели в различных задачах.

Коэффициенты Пуассона были получены в адекватном диапазоне значений от 0 до 0.5, которые не противоречат линейной теории упругости. Если сравнивать средние значения коэффициентов Пуассона со значением, полученном теоретически [5], то полученные равны 0.26605—0.28017 и они не сильно отличаются от теоретического значения.

Одним из плюсов данной модели можно считать ее простоту в задании структуры, что не скажешь о модели, описанной в [5], в которой структура модели формировалась с помощью охлаждения нагретого образца, имеющего кристаллическую решетку. Исследуемая модель проста тем, что для того чтобы построить ее, не надо учитывать тепловые эффекты. Также было учтено исследование плотности упаковки, оказывающую влияние на упругие модули.

То есть чем больше плотность упаковки, тем точнее связи между частицами, отсюда и точнее сходимость значений.

В дальнейшем планируется улучшить модель для учета в ней тепловых процессов, не только линейных колебаний, но и нелинейных. Исследовать поведения коэффициента объемного сжатия, сравнить с только что полученными результатами. А также провести численные эксперименты по кручению, изгибу.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Воробьев С.А. Определение эффективных механических характеристик материалов со случайной упаковкой. — 2017
2. Вьюгин В.В. «Математические основы теории машинного обучения и прогнозирования» М.: 2013. – 387 с.
3. Капитонов, А. М. К20 Физические свойства горных пород западной части Сибирской платформы : монография / А. М. Капитонов, В. Г. Васильев. – Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2011. – 424 с. ISBN 978-5-7638-2142-0
4. Кривцов А.М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов : учебное пособие. — СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. — 126 с.
5. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. — М.: ФИЗМАЛИТ, 2007. — 304 с. — ISBN 978-5-9221-0803-4.
6. Кривцов А. М., Кривцова Н. В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела — Дальневосточный математический журнал. 2002. Т. 3. № 2. С. 254–276.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика, т.VII. Теория упругости. — Наука, 1987.
8. Лившиц В.Я., Теннисон Д.Г., Гукасян С.Б., Костанян А.К. — ФХС. 1982. Т. 8. № 6. С. 688−696
9. Фейнман Р., Лейтон. Р, Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 1. М: Мир, 1967.
10. Фридман Я. Б., Механические свойства металлов, 2 изд., М., 1952.
11. Ercolessi F.A Molecular dynamics primer. Spring College in Computational Physics. ICTP. June 1997.
12. Hoover.Wm. G. Molecular Dynamics. Springer-Verlag Berlin Heideiberg 1986.

13. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. Phys. Rev. 1967. V. 159. P. 98
14. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions. Phys. Rev. 1967. V. 165. P. 201.
15. Компьютерное моделирование физических процессов в нефтегазовой промышленности. URL: https://multiphysics.ru/stati/blog/kompjuternoe-modelirovanie-fizicheskih-protsessov-v-neftegazovoj-promyshlennosti.htm (Дата обращения:15.06.2020).