Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Физико-механический факультет, кафедра Теоретической Механики

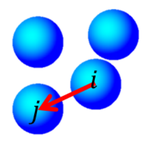
Моделирования деформирования и разрушения хрупких гранулированных материалов методом динамики частиц

Асонов Игорь Евгеньевич, выпуск 2012 года; научный руководитель: к.ф.-м.н. Кузькин Виталий Андреевич

- Представлена технология создания двумерного поликристаллического материала с помощью сжатого сглаженного межчастичного взаимодействия
- Аналитически рассчитаны микро– и макропараметры для монокристалла со сжатым сглаженным взаимодействием
- Рассчитаны свойства модельные материала в тесте на растяжение и на определение скорости продольной волны

$$m\dot{\underline{v}}_i = \sum_{j\neq i} \underline{F}_{ij}$$ поступательное движение

$$\Theta\dot{\underline{\omega}}_i = \sum_{j\neq i} \underline{M}_{ij}$$ вращательное движение



$$\dot{\underline{r}}_i = \underline{v}_i$$ кинематическое уравнение

$$\dot{\underline{n}}_i^k = \underline{\omega}_i \times \underline{n}_i^k$$ уравнение Пуассона

Расчет напряжений и меры скоростей

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{r}_i) = \frac{1}{2V_0}\sum_k \frac{F(r_{ik})}{r_{ik}} \underline{r}_{ik}\underline{r}_{ik}$$ тензор Каппуса, Гамеля, Треффца

$$v_{dev} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\underline{v}_i - \langle \underline{v} \rangle\right)^2}$$ девиация скоростей частиц (СКО от средней скорости)

Численное интегрирование уравнений движения:

$$\underline{v}_i(t+dt) = \underline{v}_i(t) + \underline{a}_i(t)dt$$
$$\underline{r}_i(t+dt) = \underline{r}_i(t+dt) + \underline{v}_i(t)dt$$

Взаимодействие Леннарда-Джонса

$$\Pi_0(r) = D_0\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^6\right]$$ потенциал Леннарда-Джонса (ЛД)

$\underline{F}_0(r) = -\nabla\Pi_0(r)$ сила ЛД

$C_0 = \Pi''(a)$ жесткость связи ЛД вблизи положения равновесия

$b_0 = \sqrt[6]{\frac{13}{7}}a$ расстояние разрыва связи ЛД

$v_{dis_0} = \sqrt{\frac{2D_0}{m}}$ скорость диссоциации ЛД

$f_* = |F_0(b_0)| = \frac{504}{169}\sqrt[6]{\frac{7}{13}}\frac{D_0}{a} \approx 2.7\frac{D_0}{a}$ прочность связи

r межчастичное расстояние

a равновесное расстояние

m масса частицы

D_0 энергия связи ЛД

a_{cut_0} радиус обрезания для ЛД

$T_0 = 2\pi\sqrt{\frac{m}{C_0}}$ период колебаний вблизи положения равновесия

Для идеальной (монокристаллической) двумерной ГПУ решетки:

$v_{long2D_0} = \sqrt{\frac{9C_0}{8m}}a$ скорость распространения продольных волн

$k_{v_0} = \frac{v_{long2D_0}}{v_{dis_0}}$ коэффициент динамичности

$V_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$ элементарный «объем»

Сглаженное взаимодействие

$$F_1(r) = \begin{cases} F_0(r) & 0 < r \le b \\ k(r)F_0(r) & b < r \le a_{cut_0} \\ 0 & a_{cut_0} < r \end{cases}$$

α коэффициент хрупкости

$k(r)$ сглаживающая функция

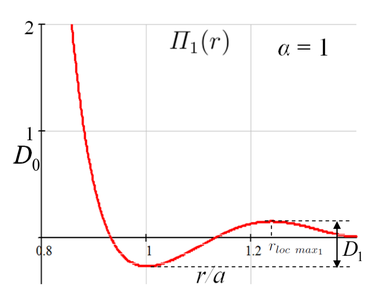
$$k(r) = (1+\alpha)\left(1 - \left(1 + \sqrt{\frac{\alpha}{1+\alpha}}\right)\left(\frac{r^2 - b_0^2}{a_{cut_0}^2 - b_0^2}\right)^2\right)^2 - \alpha$$

$C_1 = C_0$

$T_1 = T_0$

$b_1 = b_0 \quad a_{cut_1} = a_{cut_0}$

$v_{dis_1} = \sqrt{\frac{2D_1}{m}} \quad v_{long2D_1} = v_{long2D_0}$



a_{cut0}	α	$r_{loc\ max1}$	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

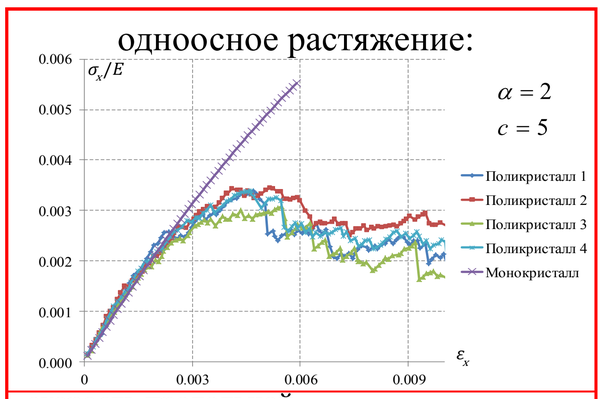
Сжатое взаимодействие

$$\tilde{F}(r) = F_1(c(r-a)+a) \qquad \tilde{b} = \frac{b_0 - a}{c} + a$$

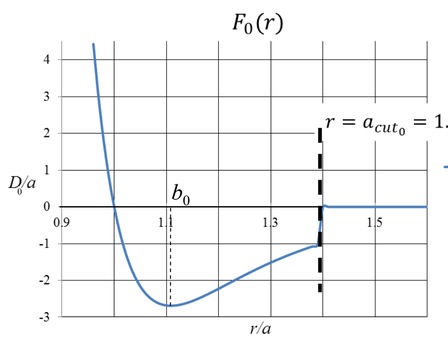
$$\tilde{D} = \frac{D_1}{c} \quad \tilde{C} = cC_0 \quad \tilde{T} = \frac{T_0}{\sqrt{c}} \quad \tilde{a}_{cut} = \frac{a_{cut_0} - a}{c} + a$$

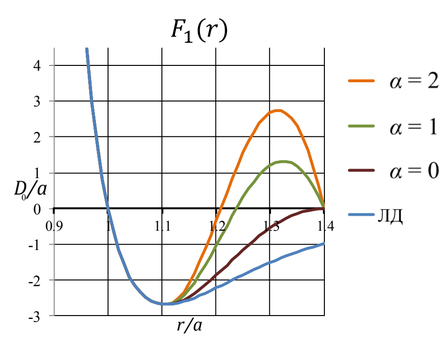
$$\tilde{v}_{dis} = \sqrt{\frac{2\tilde{D}}{m}} \quad \tilde{v}_{long2D} = \sqrt{c}\, v_{long2D_0}$$

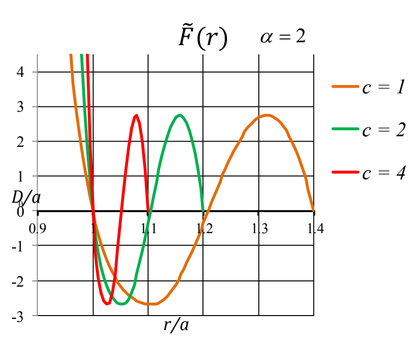
одноосное растяжение:



скорость продольной волны в поликристалле $\tilde{v}_{long\ poly} \cong 0.9\tilde{v}_{long2D}$



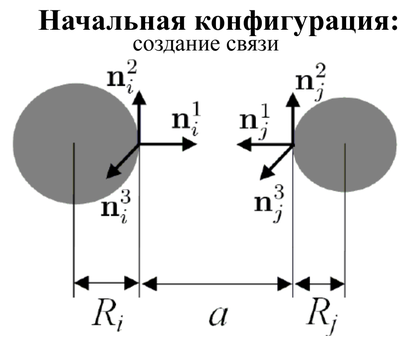




Таким образом, использование межчастичного сжатого сглаженного взаимодействия позволяет достичь малых критических деформаций модельного материала в тесте на одноосное растяжение: порядка 0.1-1%, что соответствует характеристикам реальных хрупких материалов, в первую очередь — горных пород.
Критическую деформацию на растяжение можно варьировать изменяя коэффициент c: чем c больше, тем критическая деформация на растяжение — меньше.

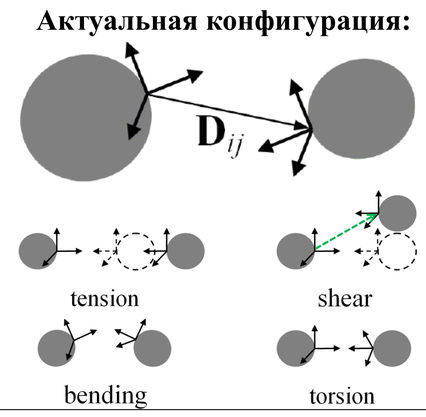
- Разработана модель для упругих связей в твердых телах
- Предложен конкретный вид потенциала взаимодействия
- Для предложенного потенциала взаимодействия рассчитаны жесткости связи
- Представлены калибровочные модели для расчета жесткостей связи (для длинных связей с помощью теории стержней Бернулли-Эйлера и Тимошенко, для коротких — с использованием приближений теории упругости)

Начальная конфигурация:
создание связи



$\mathbf{n}_i^1 = -\mathbf{n}_j^1 = \mathbf{e}_{ij} \quad \mathbf{n}_i^2 = \mathbf{n}_j^2 \quad \mathbf{n}_i^3 = \mathbf{n}_j^3$

Актуальная конфигурация:



a начальная длина связи

$\mathbf{n}_i^1, \mathbf{n}_i^2, \mathbf{n}_i^3$ вектора, жестко связанные с частицей I

$R_i\ R_j$ расстояния от центров масс частиц, до точек соединения связью

$$\mathbf{D}_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r}_{ij} + R_j\mathbf{n}_j^1 - R_i\mathbf{n}_i^1$$

Общая формула для потенциала взаимодействия твердых тел

$$\Pi = \Pi_L(D_{ij}) + \Pi_B(\mathbf{n}_i^1\cdot\mathbf{n}_j^1, \mathbf{d}_{ij}\cdot\mathbf{n}_i^1, \mathbf{d}_{ji}\cdot\mathbf{n}_j^1) + \Pi_T\left(\{\mathbf{n}_i^k\cdot\mathbf{n}_j^k, \mathbf{d}_{ij}\cdot\mathbf{n}_i^k, \mathbf{d}_{ji}\cdot\mathbf{n}_j^k\}_{k=2,3}\right)$$

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

$$\mathbf{F}_{ij} = -\mathbf{F}_{ji} = \frac{\partial\Pi}{\partial\mathbf{r}_{ij}}, \quad \mathbf{M}_{ij} = \sum_{k\in\Lambda_i}\frac{\partial\Pi}{\partial\mathbf{n}_i^k}\times\mathbf{n}_i^k$$

$$\mathbf{M}_{ji} = \sum_{m\in\Lambda_j}\frac{\partial\Pi}{\partial\mathbf{n}_j^m}\times\mathbf{n}_j^m.$$

Предлагаемый вид потенциала взаимодействия

$$\Pi_L(s) = \frac{B_1}{2}(s-a)^2 \qquad \Pi_B(s_1,s_2,s_3) = -\frac{B_2}{2}s_1^2 - \frac{B_3}{2}(s_2^2+s_3^2)$$

$$\Pi_T(\{s_{1k},s_{2k},s_{3k}\}_{k=2,3}) = -\frac{B_4}{4}\sum_{k=2,3}(s_{1k}+s_{2k}s_{3k})^2(1+s_{2k}^2)(1+s_{3k}^2)$$

$$\mathbf{F}_{ij} = B_1(D_{ij}-a)\mathbf{d}_{ij} - \frac{B_3}{D_{ij}}\mathbf{d}_{ij}\cdot(\mathbf{n}_i^1\tilde{\mathbf{n}}_i^1 + \mathbf{n}_j^1\tilde{\mathbf{n}}_j^1) + \frac{1}{D_{ij}}\sum_{k=2,3}\left(\frac{\partial\Pi_T}{\partial s_{2k}}\tilde{\mathbf{n}}_i^k - \frac{\partial\Pi_T}{\partial s_{3k}}\tilde{\mathbf{n}}_j^k\right)$$

$$\mathbf{M}_{ij} = R_i\mathbf{n}_i^1\times\mathbf{F}_{ij} - \mathbf{n}_i^1\cdot[B_2\mathbf{n}_j^1\mathbf{n}_j^1 + B_3\mathbf{d}_{ij}\mathbf{d}_{ij}]\times\mathbf{n}_i^1 + \sum_{k=2,3}\left(\frac{\partial\Pi_T}{\partial s_{1k}}\mathbf{n}_j^k + \frac{\partial\Pi_T}{\partial s_{2k}}\mathbf{d}_{ij}\right)\times\mathbf{n}_i^k$$

Калибровочные модели / Жесткости	Модель балки Бернулли-Эйлера	Модель балки Тимошенко	Приближения теории упругости
продольная c_A	$\frac{EA}{a}$	$\frac{EA}{a}$	$\frac{(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}\frac{EA}{a}$
сдвиговая c_D	$\frac{12EJ}{a^3}$	$\frac{12kAEJ}{a(kAa^2+24J(1+\nu))}$	$\frac{GA}{a}$
изгибная c_B	$\frac{EJ}{a}$	$\frac{EJ}{a}$	$\frac{(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}\frac{EJ}{a}$
крутильная c_T	$\frac{GJ_p}{a}$	$\frac{GJ_p}{a}$	$\frac{GJ_p}{a}$

E модуль Юнга связующего вещества

G модуль сдвига связующего вещества

A площадь поперечного сечения связи

J момент инерции поперечного сечения связи

J_p полярный момент инерции поперечного сечения связи

$$\frac{\partial\Pi}{\partial s_{1k}} = -\frac{B_4}{2}(s_{1k}+s_{2k}s_{3k})(1+s_{2k}^2)(1+s_{3k}^2), \qquad \tilde{\mathbf{n}}_i^k \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{n}_i^k - \mathbf{d}_{ij}\mathbf{d}_{ij}\cdot\mathbf{n}_i^k$$

$$\frac{\partial\Pi}{\partial s_{2k}} = -\frac{B_4}{2}(s_{1k}+s_{2k}s_{3k})(1+s_{3k}^2)(s_{3k}+s_{1k}s_{2k}+2s_{3k}s_{2k}^2),$$

$$\frac{\partial\Pi}{\partial s_{3k}} = -\frac{B_4}{2}(s_{1k}+s_{2k}s_{3k})(1+s_{2k}^2)(s_{2k}+s_{1k}s_{3k}+2s_{2k}s_{3k}^2), \quad k=2,3$$

B_1, B_2, B_3, B_4 параметры модели взаимодействия, которые однозначно пересчитываются в жесткости связи:

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

продольная сдвиговая изгибная крутильная