

Развитие подхода к реализации моделей упругости и пластичности в рамках концепции дискретных элементов

С.Г. ПСАХЬЕ

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск

e-mail: sp@ms.tsc.ru

Е.В. ШИЛЬКО

А.Ю. СМОЛИН

С.В. АСТАФУРОВ

Предложен общий подход к реализации моделей упругости и пластичности изотропных сред в рамках численного метода дискретных элементов. В основе подхода лежит построение многочастичных потенциалов/сил межэлементного взаимодействия, обеспечивающих отклик ансамбля элементов, соответствующий отклику моделируемого твердого тела. Развитый формализм делает возможным реализацию различных реологических моделей в рамках метода частиц для изучения процессов деформирования и разрушения твердофазных сред различной природы.

1. Введение

Важным направлением в механике деформируемого твердого тела (МДТТ) является развитие численных методов и их применение к проблемам, связанным с деформированием и разрушением гетерогенных материалов. Перспективным классом численных методов МДТТ, активно развивающимся в настоящее время, являются методы частиц. Следует отметить, что данный термин является собирательным и включает в себя весьма разноплановые численные методы, как относящиеся к «классическим» представителям дискретного подхода в механике, так и бессеточные алгоритмы численного решения уравнений механики сплошных сред (например, метод частиц в ячейках [1], метод сглаженных частиц SPH [2], SPAM [3] и т.д.). Более того, в настоящее время к методам частиц относят и некоторые современные реализации традиционных численных методов, такие как particle-finite element method [4].

В рамках «классических» методов частиц моделируемая среда представляется ансамблем взаимодействующих частиц (элементов) конечного размера и определенной исходной формы. Эволюция ансамбля определяется решением системы уравнений Ньютона-Эйлера, а его реологические свойства – видом и параметрами потенциала/сил межэлементного взаимодействия. Наиболее известными представителями данной группы методов является так называемый метод дискретных элементов (МДЭ). В настоящее время МДЭ широко используется для изучения деформационных процессов в гранулированных (сыпучих) и слабосвязанных средах, в частности, реологических особенностей таких систем, процессов разрушения и перемешивания [5]. В то же время, до последнего времени возможности применения МДЭ для изучения механических явлений в консолидированных средах ограничивались хрупкими пористыми материалами [6, 7], что

связано с недостаточным развитием математических моделей взаимодействия дискретных элементов. В частности, подавляющее число моделей в рамках МДЭ основано на использовании парных (двухчастичных) потенциалов/сил взаимодействия элементов. Данное упрощение может сопровождаться возникновением ряда искусственных проявлений отклика ансамбля частиц, не присущих моделируемой среде. В связи с этим одной из фундаментальных задач в МДЭ является построение потенциалов/сил взаимодействия, обеспечивающих отклик ансамбля элементов, отвечающий отклику консолидированных твердых сред с различной реологией (упруго-пластической, вязко-упругой и т.д.). Очевидно, что такие потенциалы/силы должны быть многочастичными.

2. Обсуждение результатов

Авторами предложен общий подход к построению многочастичных сил взаимодействия дискретных элементов для моделирования деформирования и разрушения консолидированных гетерогенных сред. В основе подхода лежит использование формы записи силы взаимодействия, аналогичной записи межатомных потенциалов погруженного атома. В общем случае сила, действующая на дискретный элемент i , записывается как суперпозиция «парных» составляющих $\mathbf{F}_{ij}^{\text{pair}}$, зависящих от его пространственного положения/перемещения относительно «соседей» j , и объемнозависящей составляющей \mathbf{F}_i^{Ω} , связанной с совместным влиянием окружения:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{R}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^{N_i} \mathbf{F}_{ij}^{\text{pair}} + \mathbf{F}_i^{\Omega}, \quad (1)$$

где m_i – масса элемента i , \mathbf{R}_i – его радиус-вектор, N_i – число «соседей» элемента i . Авторы предлагают следующую общую форму записи объемнозависящей составляющей \mathbf{F}_i^{Ω} , справедливую для локально изотропных сред с различной реологией [8]:

$$\mathbf{F}_i^{\Omega} = - \sum_{j=1}^{N_i} P_i S_{ij} \mathbf{n}_{ij}, \quad (2)$$

где P_i – давление в объеме дискретного элемента i , S_{ij} – площадь поверхности взаимодействия элементов i и j , \mathbf{n}_{ij} – единичный вектор, ориентированный вдоль линии, соединяющей центры масс элементов. В такой постановке правую часть выражения (1) можно свести к сумме сил взаимодействия пар элементов и однозначно разделить их нормальную (\mathbf{F}_{ij}^n) и тангенциальную (\mathbf{F}_{ij}^t) составляющие:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^{N_i} (\mathbf{F}_{ij}^{\text{pair}} - P_i S_{ij} \mathbf{n}_{ij}) = \sum_{j=1}^{N_i} [(F_{ij}^{\text{pair},n} - P_i S_{ij}) \mathbf{n}_{ij} + F_{ij}^{\text{pair},t} \mathbf{t}_{ij}] = \sum_{j=1}^{N_i} (\mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^t). \quad (3)$$

Отметим, что хотя правая часть (3) формально соответствует записи взаимодействия элементов в классических моделях дискретных элементов [5, 6, 7], ее принципиальным отличием является многочастичность.

Применяемый в работе способ расчета давления P_i основан на вычислении средних значений компонентов тензора напряжений в объеме дискретного элемента [7]:

$$\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i = \frac{1}{V_i} \left(\sum_{j=1}^{N_i} q_{ij} S_{ij} \sigma_{ij} \cos \theta_{ij,\alpha} \cos \theta_{ij,\beta} \pm \sum_{j=1}^{N_i} q_{ij} S_{ij} \tau_{ij} \cos \theta_{ij,\alpha} \sin \theta_{ij,\beta} \right), \quad (4)$$

где $\alpha, \beta = x, y, z$; V_i – текущее значение объема элемента i ; q_{ij} – расстояние от центра масс элемента i до центральной точки поверхности взаимодействия с соседом j ; $\Theta_{ij,\alpha}$ – угол между линией, соединяющей центры масс взаимодействующих элементов i и j , и осью α лабораторной системы координат (рис.1); σ_{ij} и τ_{ij} – удельные значения нормальной и тангенциальной сил взаимодействия элементов i и j , определяемые отношением полных значений сил (F_{ij}^n и F_{ij}^t) к площади поверхности взаимодействия S_{ij} . Вычисленные таким образом компоненты тензора напряжений могут использоваться для определения величины давления $P_i = -\bar{\sigma}_{mean}^i = (\bar{\sigma}_{xx}^i + \bar{\sigma}_{yy}^i + \bar{\sigma}_{zz}^i)/3$, а также других инвариантов, например, интенсивности напряжений:

$$\bar{\sigma}_{int}^i = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\bar{\sigma}_{xx}^i - \bar{\sigma}_{yy}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{yy}^i - \bar{\sigma}_{zz}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{zz}^i - \bar{\sigma}_{xx}^i)^2 + 6 \left((\bar{\sigma}_{xy}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{yz}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{xz}^i)^2 \right)} \quad (5)$$

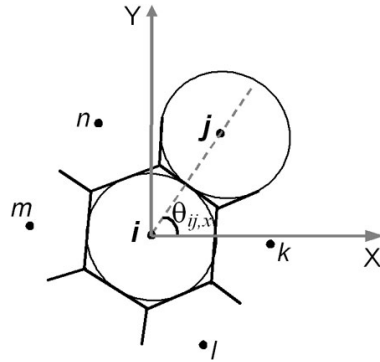


Рис. 1. Пример определения угла $\theta_{ij,\alpha}$ между линией, соединяющей центры масс взаимодействующих элементов i и j , и осью α лабораторной системы координат ($\alpha = x$). Здесь j, k, l, m, n – индексы элементов, взаимодействующих с рассматриваемым элементом i .

Как следует из (3)-(4), центральной проблемой в рамках предлагаемого подхода к описанию взаимодействия дискретных элементов, является определение выражений для σ_{ij} и τ_{ij} , обеспечивающих требуемые характеристики механического отклика ансамбля элементов. С учетом (4) эти выражения могут быть непосредственно переформулированы из реологических соотношений моделируемой среды.

Так, для случая локально изотропной линейно-упругой среды авторами предложены выражения для нормальной (σ_{ij}) и тангенциальной (τ_{ij}) составляющих силы реакции дискретного элемента i на воздействие со стороны «соседа» j . Вид этих соотношений аналогичен соотношениям закона Гука для диагональной и недиагональной компонент тензора напряжений. В гипоупругой форме они имеют вид:

$$\begin{cases} \Delta\sigma_{ij} = 2G_i\Delta\varepsilon_{i(j)} + \left(1 - \frac{2G_i}{K_i}\right)\Delta\bar{\sigma}_{mean}^i \\ \Delta\tau_{ij} = 2G_i\Delta\gamma_{i(j)} \end{cases} \quad (6)$$

где G_i и K_i – модули сдвига и всестороннего сжатия материала элемента i ; $\Delta\varepsilon_{ij}$ и $\Delta\gamma_{ij}$ – нормальная и тангенциальная составляющие вектора относительного перемещения элементов i и j за шаг по времени Δt , отнесенные к размеру элемента. Подстановкой

соотношений (6) в (4) легко показать, что предложенные выражения для сил межэлементного взаимодействия автоматически обеспечивают выполнение закона Гука для средних значений компонентов тензоров напряжений ($\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i$) и деформаций ($\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}^i$) в объеме элемента i . Отметим, что $\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}^i$ определяются по аналогии с (4) с использованием компонентов ε_{ij} и γ_{ij} вектора относительного перемещения элементов в парах i - j .

С учетом необходимости выполнения третьего закона Ньютона для взаимодействующих пар дискретных элементов ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ и $\tau_{ij} = \tau_{ji}$) выражения для вычисления нормальной и тангенциальной сил взаимодействия принимают вид:

$$\begin{cases} \Delta\sigma_{ij} = \Delta\sigma_{ji} = 2G_i\Delta\varepsilon_{i(j)} + \left(1 - \frac{2G_i}{K_i}\right)\Delta\bar{\sigma}_{mean}^i = 2G_j\Delta\varepsilon_{j(i)} + \left(1 - \frac{2G_j}{K_j}\right)\Delta\bar{\sigma}_{mean}^j \\ \Delta\varepsilon_{i(j)}d_i/2 + \Delta\varepsilon_{j(i)}d_j/2 = \Delta r_{ij}, \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} \Delta\tau_{ij} = \Delta\tau_{ji} = 2G_i\Delta\gamma_{i(j)} = 2G_j\Delta\gamma_{j(i)} \\ \Delta\gamma_{i(j)}d_i/2 + \Delta\gamma_{j(i)}d_j/2 = V_{shear}^{ij}\Delta t, \end{cases} \quad (8)$$

где d_i и d_j – размеры элементов i и j ; Δr_{ij} – изменение расстояния между центрами масс элементов за шаг по времени Δt ; V_{shear}^{ij} – скорость относительного тангенциального перемещения элементов, вычисляемая с учетом их вращения [7, 8].

Результаты тестирования развитой модели (в том числе сравнение с результатами, полученными с использованием коммерческого пакета ANSYS/LS-DYNA) свидетельствуют, что ансамбль дискретных элементов, взаимодействующих согласно (3), (4), (7), (8), демонстрирует макроскопически изотропный отклик даже при использовании регулярной упаковки элементов одного размера, что является принципиальной проблемой в традиционных моделях МДЭ.

Важным преимуществом предложенного подхода к построению потенциалов/сил взаимодействия дискретных элементов является возможность реализации в рамках МДЭ различных моделей упругости и пластичности. В частности, для случая изотропных упругопластических сред реализована модель пластического течения с критерием Мизеса. Для этой цели проведена адаптация алгоритма Уилкинса [9] к методу частиц. В рамках адаптированного алгоритма для каждого дискретного элемента i после вычисления согласно (7)-(8) текущих значений удельных сил его взаимодействия с «соседями» j определяется соответствующая величина интенсивности напряжений $\bar{\sigma}_{int}^i$ и при необходимости корректируются σ_{ij} и τ_{ij} :

$$\begin{cases} \sigma'_{ij} = (\sigma_{ij} - \bar{\sigma}_{mean}^i)M_i + \bar{\sigma}_{mean}^i \\ \tau'_{ij} = \tau_{ij}M_i, \end{cases} \quad (9)$$

где $M_i = \sigma_{pl}^i/\bar{\sigma}_{int}^i$, σ_{pl}^i – текущий радиус предельной поверхности. Подстановкой (9) в (4) легко получить, что соотношения (9) автоматически обеспечивают приведение компонентов тензора напряжений в объеме дискретного элемента i к кругу текучести.

Следует отметить, что «исправленные» значения удельных сил (σ'_{ij} и τ'_{ij}) для элемента i в общем случае могут отличаться от тех же (σ'_{ji} и τ'_{ji}) для элемента j . Ввиду необходимости выполнения третьего закона Ньютона для пары i - j после корректировки согласно (9) сил реакции этих элементов производится их согласование. В качестве «критерия согласования» предлагается величина коэффициента $M_k = \min\{M_i, M_j\}$:

$$\begin{cases} \sigma'_{ij} = \sigma'_{ji} = (\sigma_{ij} - \sigma_{mean}^k)M_k + \sigma_{mean}^k \\ \tau'_{ij} = \tau'_{ji} = \tau_{ij}M_k, \end{cases} \quad (10)$$

В результате такого «индивидуального» подхода к корректировке сил взаимодействия элемента i с различными соседями необходимые условия алгоритма Уилкинса [9] могут выполняться не строго. Однако, как показывают результаты тестирования, отклонения от выполнения этих условия являются достаточно небольшими даже для разнородных пар элементов, упругие константы которых (G и K) значительно различаются. Отметим также, что авторами проведена модификация алгоритма Уилкинса для двумерной постановки задачи в приближениях плосконапряженного и плоскодеформированного состояний.

Как показали результаты тестирования, предложенная модель упругопластического отклика дискретных элементов обеспечивает хорошее согласие распределения напряжений и деформаций в ансамбле клеточных автоматов, моделирующих упругопластическую среду, с соответствующими аналитическими решениями и результатами численного моделирования коммерческим пакетом ANSYS/LS-DYNA.

Принципиальным преимуществом МДЭ является способность непосредственного моделирования явлений разрушения материала (в том числе множественного) и связывания (сцепления) фрагментов, что реализуется через изменение состояния пары дискретных элементов (связанная пара \leftrightarrow несвязанная пара). Возможности развитого подхода к описанию взаимодействия дискретных элементов позволяют применять различные многопараметрические «силовые» критерии разрушения (Губера-Мизеса, Друкера-Прагера и т.д.) в качестве критериев разрыва межэлементных связей. Авторами предложен способ вычисления этих критериев для пар связанных дискретных элементов. Он основан на том, что в соответствии с (4) в локальной системе координат взаимодействующей пары i - j некоторые компоненты тензора усредненных напряжений соответствуют удельным силам взаимодействия этих элементов, то есть являются «общими» для обоих элементов. В то же время другие компоненты тензора являются различными для элементов i и j . Это приводит к вычислению в локальной системе координат пары i - j двух значений применяемого критерия разрушения, соответствующих элементам i и j . При достижении одним из них порогового значения, определенного для данной пары, осуществляется разрыв межэлементной связи (пара становится несвязанной).

В частности, при использовании критерия разрушения Губера-Мизеса условие разрыва межэлементной связи в паре i - j может быть записано в виде:

$$\begin{cases} \sigma_{int}^{ij} > \sigma_c^{ij} \\ \text{или} \\ \sigma_{int}^{ji} > \sigma_c^{ij}, \end{cases} \quad (11)$$

где σ_c^{ij} – соответствующее пороговое значение для рассматриваемой пары (прочность химической связи), σ_{int}^{ij} вычисляется в локальной системе координат пары i - j :

$$\sigma_{int}^{ij} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\bar{\sigma}_{xx}^i - \sigma_{ij})^2 + (\sigma_{ij} - \bar{\sigma}_{zz}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{zz}^i - \bar{\sigma}_{xx}^i)^2 + 6\tau_{ij}^2}. \quad (12)$$

Здесь $\bar{\sigma}_{xx}^i$ и $\bar{\sigma}_{zz}^i$ рассчитываются по аналогии с (4) в локальной системе координат пары i - j (полагается, что ось Y локальной системы координат ориентирована по линии, соединяющей центры масс элементов). Параметр σ_{int}^{ji} вычисляется аналогично.

Отличительными особенностями взаимодействия «несвязанных» (то есть контактирующих) элементов i и j являются, в частности, отсутствие сопротивления растяжению ($\sigma_{ij} \leq 0$) и наличие ограничения на величину силы тангенциального взаимодействия,

определяемое применяемой моделью трения поверхностей элементов (закона Амонтона, модели Дитериха [10] и т.д.).

Авторами также предложены некоторые базовые критерии образования связанных пар дискретных элементов в результате контактного взаимодействия (сжатия + трения) несвязанных элементов.

В заключение доклада обсуждаются преимущества развитого подхода при моделировании явлений и процессов, исследование которых традиционными численными методами механики сплошных сред является затруднительным. К задачам такого типа относится, например, изучение физико-механических процессов, протекающих в пятнах контакта фрикционных пар различной природы [11].

Работа выполнена в рамках проекта VII.64.1.8 Программы фундаментальных исследований СО РАН, а также при поддержке проекта программы Президиума РАН 23.2, гранта РФФИ №09-05-00968-а и гранта Президента РФ МК-130.2010.5.

Список литературы

- [1] EVANS M.W., HARLOW F.H. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations. Los Alamos, 1957 (Los Alamos Scientific Laboratory Report No. LA-2139).
- [2] MONAGHAN J.J. Smoothed particle hydrodynamics // Reports on progress in physics. 2005. Vol. 68, N 8. P. 1703-1759.
- [3] HOOVER W.G., HOOVER C.G. Computational physics with particles // American Journal of Physics. 2008. Vol. 76, N 4-5. P. 481-492.
- [4] ONATE E., IDELSON S.R., DEL PIN F. AND AUBRY R. The particle finite element method. An overview // Int. J. Computational Methods. 2004. Vol. 1, N 2. P. 267-307.
- [5] SIBILLE L., NICOT F., DONZE F.V. AND DARVE F. Material instability in granular assemblies from fundamentally different models // Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics. 2007. Vol. 31, N 3. P. 457-481.
- [6] JING L., STEPHANSSON O. Fundamentals of discrete element method for rock engineering: theory and applications. Elsevier, 2007.
- [7] POTYONDY D.O., CUNDALL P.A. A bonded-particle model for rock // Int. J. of Rock Mechanics and Mining Sciences. 2004. Vol. 41, N 8. P. 1329-1364.
- [8] PSAKHIE S.G., HORIE Y., OSTERMEYER G.-P. ETC. Movable cellular automata method for simulating materials with mesostructure // Theoretical and Applied Fracture Mechanics. 2001. Vol 37, N 1-3. P. 311-334.
- [9] WILKINS M.L. Computer simulation of dynamic phenomena. Springer-Verlag, 1999.
- [10] MARONE C. MLaboratory-derived friction laws and their application to seismic faulting // Annual Review of Earth and Planetary Sciences. 1998. Vol. 26. P. 643-696.
- [11] ПСАХЬЕ С.Г., ПОПОВ В.Л., ШИЛЬКО Е.В. и др. Изучение поведения и диагностика свойств поверхностного слоя твердого тела на основе спектрального анализа. Нанотрибоспектроскопия // Физическая Мезомеханика. 2009. Т. 12, № 4. С. 27-42.