

## **5. Diskrečiųjų elementų metodas**

### **1. Bendrosios žinios**

Pastaruoju metu sparčiai plinta kitoks požiūris į diskrečiąsias struktūras, diskretizavimą ir skaitinį medžiagų modeliavimą. Diskrečiųjų elementų analogas yra natūralūs diskretieji objektai, molekulės, milteliai, smėlio dalelės, granulės ir pan. Taigi diskrečiųjų elementų metodas suprantamas kaip statistinėje fizikoje žinomas dalelių metodas, skirtas dideliame kiekiui dalelių modeliuoti.

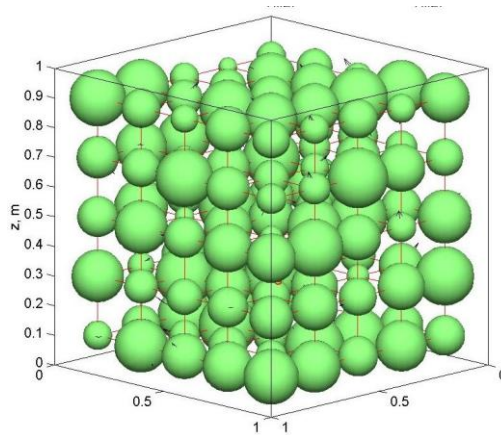
Jis aprašo struktūras skirtingais lygiais ir derinant fenomenologinį ir statistinį požiūrius, kontinuumo mechanikos ir molekulinės dinamikos žinias, kontinualiųjų ir diskrečiųjų struktūrų modeliavimo metodus

Praeito šimtmečio aštuntame dešimtmetyje (1971) dabartinę DEM idėją ir sąvoką suformulavo Cundall. Kitame darbe Cundall ir Strack pritaikė metodą grunto mechanikos problemoms spręsti, taikydami sferines daleles, o vėliau ir daugiakampio formos daleles.

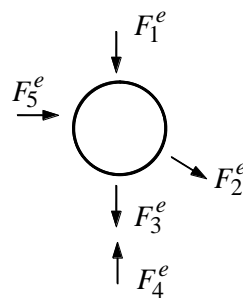
Reiktų pažymėti, kad panašios idėjos, pradėtos Alder & Wainwright, tarp fizikų buvo žinomos ir anksčiau. Jos padėjo pagrindus naujai fizikos šakai – molekulinei dinamikai (MD), kuri nagrinėjo iš nedeformuojamų kietųjų sferų sudarytą substanciją – molekulinės dujas. Molekulinei dinamikai priskirtini ir dalelių judėjimą aprašantys statistiniai metodai. Kita vertus, tam tikros DEM idėjos ir techninės detalės buvo pritaikytos remiantis daugelio kūnų dinamika.

### **2. Metodo idėja**

Diskrečiųjų elementų metodas nagrinėja materialiąsias sistemas, sudarytas iš atskirų dalelių. Šiuo metodu fizinių dalelių visuma aprašoma kaip tam tikros formos diskrečiųjų elementų (1) rinkinys. DEM yra dinaminis metodas, kuris aprašo sistemos būvį, judant dalelėms.



1 pav. Diskrečiųjų elementų rinkinys



2 pav. Diskretusis elementas ir jį veikiančios jėgos

Elemento  $k$  judėjimas apibūdinamas jo padėties vektoriumi  $\mathbf{x}_k$  ir posūkio vektoriumi  $\theta_k$  bei aprašomas antruoju Niutono dėsniumi

$$m_k \frac{d^2 \mathbf{x}_k}{dt^2} = \sum_j \mathbf{F}_{kj}, \quad (1)$$

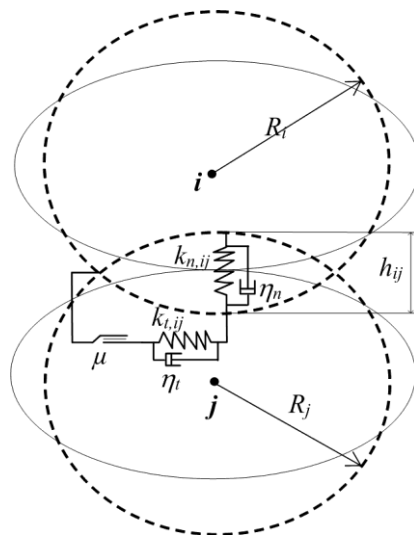
$$I_k \frac{d^2 \theta_k}{dt^2} = \sum_j \mathbf{T}_{kj}. \quad (2)$$

Pirmoji lygtis aprašo slenkamuosius, o antroji – sukamuosius judesius. Čia  $m_k$  yra dalelės masė, o  $I_k$  – masės inercijos momentas. Vektoriai  $\mathbf{F}_{kj}$  ir  $\mathbf{T}_{kj}$  yra elementą veikiančios pridėtos išorinės ir elementų tarpusavio sąveikos jėgos ir momentai, o  $j$  yra dalelę veikiančios skirtingos prigimties jėgų indeksas.

Šia prasme DEM gali būti priskiriamas prie molekulinės dinamikos metodų. Vis tik yra ir esminis skirtumas. Diskrečiųjų elementų metodu individualios dalelės yra modeliuojamos kaip kontaktuojantys deformuojami kūnai, o didžiausią poveikį daro kontaktinės sąveikos jėgos su kaimyninėmis dalelėmis. Trimačiuose uždaviniuose kiekvienas elementas turi 6 laisvės laipsnius (tris poslinkius ir tris posūkius). Analogiškai lygčiai **Error! Reference source not found.**, sukamasis judėjimas aprašomas momentų pusiausvyros lygtimis.

Siekiant supaprastinti skaičiavimus, dalelių kontaktinis uždavinys sprendžiamas kaip galima paprastesnėmis priklausomybėmis. Tuo tikslu realūs deformuojami paviršiai neskaičiuojami, o sąveikos jėgų skaičiavimui taikomas persidengiančių dalelių modelis. Kontaktinių jėgų dydį lemia persidengimo gylis  $h_{ij}$  (**Error! Reference source not found.** pav.).

Patogumo dėlei, kontaktinės jėgos ir momentai išskaidomi į normalią ir tangentinę dedamąsias. Dalelių kontakto fizinis modelis pavaizduotas **Error! Reference source not found.** paveiksle. Abiem kryptimis vertinamos tampriosios deformacijos ir slopinimo įtaka. Tampri sąveika vaizduojama spyruoklėmis, o slopinimo – slopintuvais. Tamprumo jėgos nustatomos taikant Herco teorijos kontaktinį modelį arba tiesinį modelį. Tangentine kryptimi dar atsižvelgiama į trintį, dažniausiai aprašomą Kulono dėsnio. Jeigu tangentinė jėga pasiekia trinties ribą, leidžiamas praslydimas.



3 pav. Dalelių kontakto fizinis modelis

Kiekvieno diskrečiojo elemento judėjimo parametrai (padėtis, posūkio kampai, greičiai ir pagreičiai) apskaičiuojami sprendžiant judesio lygtis. Sprendiniai randami taikant skaitinio integravimo metodus, dažniausia išreikštine forma. Žinant diskrečiojo elemento kinematinis parametrus fiksuotu laiko momentu, apskaičiuojamos veikiančios jėgos.

Skaičiavimas diskrečiųjų elementų metodu apima keletą metodui būdingų standartinių veiksmų. Tuo aspektu galima išskirti dvi sąlygiškai svarbiausias ir skaičiavimams imliausias veiksmų kategorijas: skaitinio judėjimo lygčių integravimo ir kontaktuojančių elementų paieškos metodus.

Kintanti sistemos topologija yra būdingas DEM bruožas. Judant dalelėms, jų padėtis kinta, kartu keičiasi ir kontaktuojančių dalelių sąrašai. Taigi sistemos kintamumas yra esminis

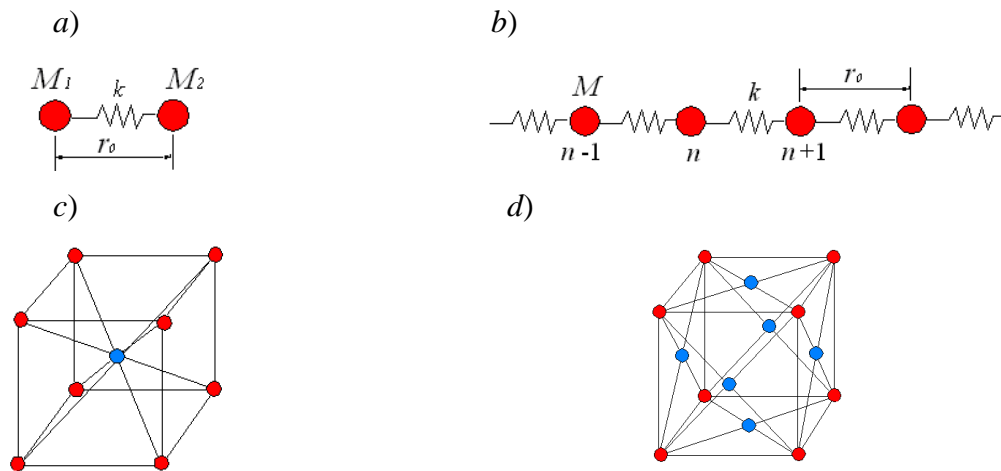
DEM bruožas ir privalumas, lyginant jį su kitais metodais. Kita vertus, būtent kontakto paieška yra imliausias skaičiavimams etapas, kuris gali užimti iki 60 % skaičiavimo sąnaudų.

Pagrindinis skirtumas tarp DEM ir kitų metodų daugiausia pasireiškia algoritmo realizavimo prasme. Baigtinių elementų metodu kiekvienu laiko momentu nagrinėjamas visas elementų rinkinys, o DEM nagrinėja pavienių nesujungtų dalelių judėjimą.

Esminis DEM trūkumas – reikia daug kompiuterinių išteklių. Dalelių judėjimui ir jų sąveikai aprašyti reikia naudoti mažą laiko integravimo žingsnį, dėl to didėja skaičiavimo laikas. Be to, dauguma šiuo metu sprendžiamų uždavinių apsiriboja 1 000–20 000 elementų, tuo tarpu trimačių struktūrų detalesniems modeliams reiktų apie 1 000 000 elementų.

Nanomechanika yra mokslas, nagrinėjantis mechanines nanostruktūrų savybes. Nanostruktūros yra diskrečiosios prigimties struktūros – joms negalioja vientisumo prielaida. Būdinga, kad daugelio medžiagų fizikines savybes artėjant jų matmenims prie nano-skalės iš esmės pakinta.

Būdingu nanostruktūrų pavyzdžiu yra iš atomų sudarytos struktūros. Nanostruktūros mechaninis modelis yra tartum spyruoklėmis turinčioms standį  $k$  sujungtų masių  $M$  sistema. Elementarūs tokių struktūrų modeliai yra dviejų atomų struktūra (*a*), atomų grandinė (*b*), kristalinės struktūros (*c*, *d*).



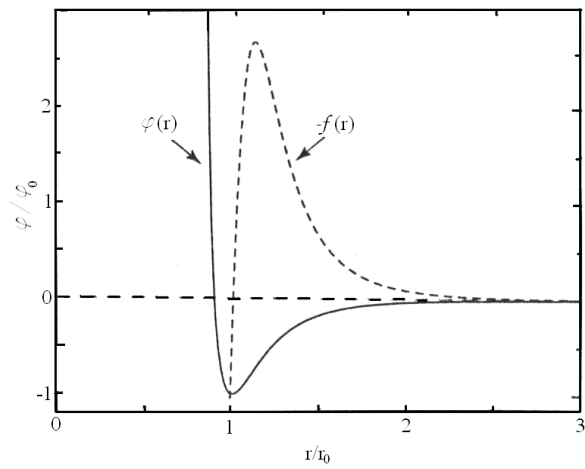
Veikiant potencialo jėgoms atomai yra dinaminėje pusiausvyroje. Binarinės atomų sąveikos jėgos  $f$  priklauso nuo atstumo tarp jų  $r$  ir yra potencialinės energijos  $\varphi$  funkcija

$$f = -d\varphi/dr \quad (3)$$

Taikant Lenard-Jones potencialo modelį, šios priklausomybės pavaizduotos 2 paveiksle. Iš jo galima matyti, kad, pasiekus kritinį atstumą  $r_0$ , pritraukiančios jėgos padeda atomus atstumti.

Nanostruktūros gali būti aprašomos molekulinės dinamikos metodais, o jau aptartas diskrečiųjų elementų metodas yra suprantamas kaip viena iš molekulinės dinamikos versijų. Čia dalelių sąveika aprašoma išraiška (1).

Nors lyginant su mikro- ar makrostruktūromis nanostruktūrų fizika yra sudėtingesnė, tačiau matematiniai modeliai turi ir daug panašumų.



2 pav. Lenard-Jones potencinė energija  $\varphi(r)$  ir sąveikos jėga  $f(r)$