



**České vysoké učení technické v Praze
Stavební fakulta**

Studentská vědecká odborná činnost
Akademický rok 2009/2010

MAKROSKOPICKÉ VLASTNOSTI ČÁSTICOVÝCH MODELŮ

Jméno a příjmení, ročník a obor : Jan Stránský, 1. ročník n.m., K
Konzultant : Prof. Ing. Milan Jirásek, DrSc.
Katedra : Katedra mechaniky

Obsah

Abstrakt	2
1 Úvod	2
2 Zkoumaný model	3
3 Numerické výpočty a periodické okrajové podmínky	4
4 Lineárně pružné vlastnosti	6
4.1 Vztah mikro- a makroskopických parametrů	7
4.2 Získání a vyhodnocení výsledků	9
5 Nepružné chování	10
5.1 Nepružné chování jedné vazby	10
5.2 Vliv periodických okrajových podmínek	11
6 Výsledky	12
6.1 Izotropie pružných vlastností	12
6.2 Vztah mikro- a makroskopických elastických parametrů	14
6.3 Nepružné chování	16
7 Závěr	18
8 Poděkování	18
Literatura	19

Abstrakt

Různé podoby diskretních modelů, např. lattice („mřížových“) nebo částicových modelů, se v poslední době stále častěji využívají k popisu vysoce nelineárních problémů, kdy dochází ke značným změnám původní geometrie.

V tomto příspěvku je zkoumán částicový trojrozměrný model sestávající z tuhých kulových částic vzájemně spojených vazbami, které mohou přenášet normálové a smykové napětí. Jsou vyšetřovány vztahy mezi základními materiálovými parametry určujícími chování jednotlivých vazeb a výslednými makroskopickými vlastnostmi částicového modelu. Podrobně jsou rozebrány lineárně pružné vlastnosti, které byly kalibrovány za pomoci rozměrové analýzy a numerických simulací reprezentativní buňky s periodickými okrajovými podmínkami.

Také je ukázán vliv periodických okrajových podmínek na výsledné makroskopické chování modelu v nepružné oblasti.

Abstract

Various forms of discrete models, such as lattice or particle models, are becoming increasingly popular in applications to highly nonlinear problems with large changes of the initial geometry.

In this contribution, the considered model is three-dimensional, consisting of spherical rigid particles connected by interfaces that can transmit normal and shear stress. The relation between basic material parameters governing the behavior of a single link and the resulting macroscopic properties of the particle model is investigated. The linear elastic properties are analyzed in detail. Their calibration is simplified by dimensional analysis and is based on numerical simulations of a representative cell with periodic boundary conditions.

The influence of the periodic boundary conditions on the resulting macroscopic inelastic behavior of the model is discussed.

1 Úvod

Ačkoli je metoda konečných prvků (MKP) nejrozšířenějším nástrojem pro numerické analýzy a simulace napříč všemi inženýrskými obory, v některých konkrétních případech může být vhodné využití jiných prostředků (například diskretních modelů).

Diskretní modely pro popis mechanické odezvy byly původně vyvinuty pro účely simulací zrnitých materiálů v mechanice zemin [1], kde jednotlivá zrna byla modelována jako částice. Od té doby se objevilo množství modifikací a rozšíření původní metody (např. nosníková lattice metoda [8] nebo metoda diskretních prvků -discrete element method, DEM- [4], [9]) stejně jako jejich použití, ku příkladu v simulacích mechaniky tekutin nebo analýze makroskopicky spojitých „nečásticových“ materiálů jako je beton.

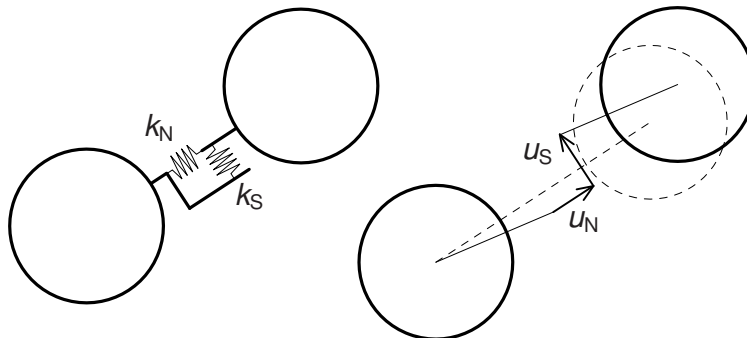
Diskretní modely obecně sestávají ze základních útvarů („diskretních prvků“) spojených deformovatelnými vazbami. Tyto základní útvary mohou mít podobu samostatných bodů (s nebo bez hmotnosti a setrvačnosti) nebo částic konečných rozměrů a určitého tvaru a obvykle jsou uvažovány jako dokonale tuhé. Veškeré deformační procesy jsou potom přenášeny vazbami a závisí na vzájemném posunu (nebo pootočení) spojených útvarů. Použitím vhodného konstitutivního vztahu se určí vnitřní síly přenášené jednotlivými vazbami a v závislosti na typu analýzy se řeší statická rovnováha (při řešení statických nebo

kvazistatických problémů) nebo se určí celkové síly působící na jednotlivé částice a integrují se pohybové rovnice (při řešení dynamických problémů).

Zmíněné konstitutivní vztahy mohou mít mnoho podob, od nejjednodušších popisů lineárního chování až po nelineární popis viskozity, plasticity, poškození atd. Ze své podstaty modelování diskontinua jsou diskrétní modely vhodné a často využívány v problémech, kdy dochází ke značné nespojitosti v materiálu, jako je například drcení, praskání, modelování nárazů atd. (viz například [7] nebo [5]).

Částicové modely jsou podskupinou diskrétních modelů, kde základní útvary představují částice. Podob a modifikací těchto modelů existuje celá řada. V některých pojetích je snaha modelovými částicemi napodobit skutečnou mikrostrukturu materiálu (například zrna kameniva v betonu), jejich poloha i rozdělení velikosti jsou pak diktovány modelovaným materiálem. Částice ale mohou být využity pouze jako myšlená diskretizace spojitého problému, a to bez vazby na skutečnou mikrostrukturu (to je i případ modelu zkoumaného v tomto příspěvku). Velikost částic potom může být zvolena jako jednotná (z důvodů jednoduchosti modelu a výpočetních nároků) či proměnná (tak, aby byl prostor optimálně vyplněn). Také podoba vazeb se může lišit, jednotlivé vazby mohou ku příkladu přenášet jen napětí v normálovém směru nebo se naopak mohou chovat jako nosníky a přenášet mezi částicemi i ohybové momenty.

2 Zkoumaný model



Obrázek 1: 2D znázornění kontaktní tuhosti (vlevo) a kontaktního posunu (vpravo)

Částicový model zkoumaný v tomto příspěvku sestává z tuhých kulových částic jednotného poloměru R spojených vazbami, které mohou přenášet normálové a smykové napětí. Vazby spojují středy částic a můžeme si je představit jako pruty o délce L , v jejichž středu se nachází myšlené rozhraní neboli styčná plocha (na které se odehrávají deformační procesy) o ploše A , která má v našem pojetí jednoduchý tvar

$$A = \pi R^2. \quad (1)$$

O tom, zda dvě částice budou spojeny či nikoliv, rozhoduje tzv. interakční poměr I_R , vyjadřující fakt, že každá dvojice částic, jejichž vzdálenost $L \leq 2I_R R$, bude spojena vazbou. Naopak každá dvojice částic, jejichž vzdálenost $L > 2I_R R$, spojena vazbou nebude. Pro případ $I_R = 1,0$ se spojí pouze právě se dotýkající částice.

Každá částice má šest stupňů volnosti, tři posunutí a tři pootočení. Pro vazbu spojující částice s označením i a j můžeme sestavit sloupcový vektor „uzlových“ posunů

$$\mathbf{d} = \{u_i, v_i, w_i, \phi_{xi}, \phi_{yi}, \phi_{zi}, u_j, v_j, w_j, \phi_{xj}, \phi_{yj}, \phi_{zj}\}^T, \quad (2)$$

kde u_i, v_i a w_i jsou popořadě posuny částice i ve směru souřadnicových os x, y a z a ϕ_{ki} je pootočení částice i kolem osy k . Hodnoty ve vektoru \mathbf{d} jednoznačně určují kontaktní posun (posun středu vazby v lokální souřadné soustavě, viz obr. 1)

$$\mathbf{u}_c = \{u_N, \mathbf{u}_S\}^T = \{u_N, u_{S1}, u_{S2}\}^T \quad (3)$$

a ekvivalentní deformaci vazby

$$\varepsilon = \frac{1}{L} \mathbf{u}_c. \quad (4)$$

Z lokálního souřadného systému $\mathbf{e} = \{\mathbf{e}_N, \mathbf{e}_{S1}, \mathbf{e}_{S2}\}^T$ můžeme jednoznačně určit jen normálový bázev vektor \mathbf{e}_N , který je daný středy spojených částic. Normálový je nazván proto, že je kolmý na myšlenou styčnou plochu, ke které relativní posuny i deformace vztahujeme. \mathbf{e}_{S1} volíme jako libovolný jednotkový vektor kolmý na \mathbf{e}_N a konečně \mathbf{e}_{S2} je již jednoznačně určen pomocí dvou předchozích bázev vektorů.

Vztah mezi posuny dvou částic vazby a posunem kontaktním můžeme maticově zapsat jako

$$\mathbf{u}_c = \mathbf{B} \mathbf{d} \quad (5)$$

kde

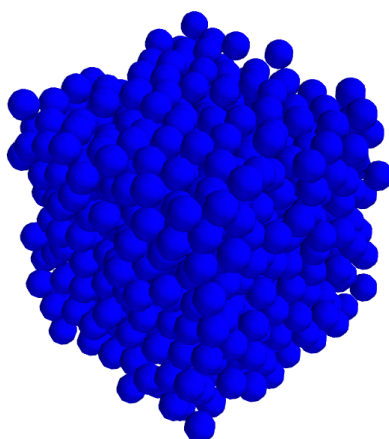
$$\mathbf{B} = \mathbf{e}^T \mathbf{B}_l, \quad \mathbf{B}_l = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & \Delta_z & -\Delta_y & 1 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_z & \Delta_y \\ 0 & -1 & 0 & -\Delta_z & 0 & \Delta_x & 0 & 1 & 0 & \Delta_z & 0 & -\Delta_x \\ 0 & 0 & -1 & \Delta_y & -\Delta_x & 0 & 0 & 0 & 1 & -\Delta_y & \Delta_x & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

je geometrická matice. Δ_k je polovina průmětu vektoru $\vec{c}_i \vec{c}_j$ do osy k .

3 Numerické výpočty a periodické okrajové podmínky

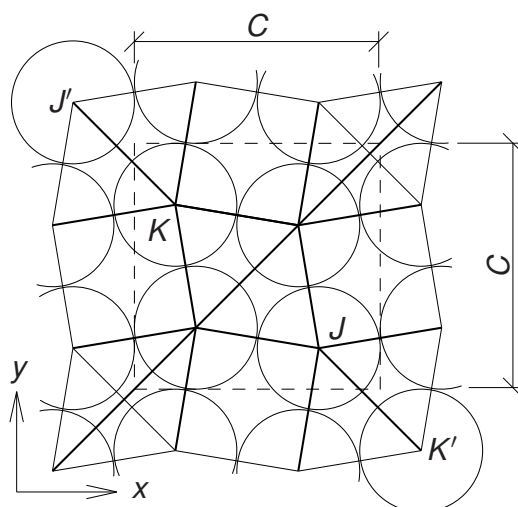
Numerické výpočty byly prováděny na náhodně vygenerovaných periodických soustavách (viz obr. 2). Takovéto soustavy byly vytvořeny procesem simulovaného stlačování v open-source DEM programu YADE [11], [12]. Pro vlastní analýzu byl však použit konečně prvkový řešič OOFEM [6], [13], který umožňuje přímé řešení rovnováhy statických rovnic, což je časově výrazně méně náročné než dynamická diskretně prvková analýza pomocí YADE, kde se vliv vzniklých setrvačných sil snižuje tlumením. Ačkoli je OOFEM nástrojem pro metodu konečných prvků, částicový model může být snadno implementován jako "pseudopříhradová" konstrukce, kde částice a vazby diskretního modelu odpovídají speciálním uzlům a prvkům konečně prvkového modelu. V této souvislosti stojí za zmínku výhoda OOFEMu v podobě objektivě orientované struktury.

Lineárně pružná analýza, které je v tomto příspěvku věnován asi největší prostor, je samozřejmě případem, který pro diskretní prvky není typický, ba ani vhodný, tento krok je ale nezbytný pro kalibraci mikroskopických parametrů, aby výsledky získané při složitějších analýzách (například drcení nebo tříštění materiálu) co nejvíce odpovídaly realitě.



Obrázek 2: Ukázka analyzované částicové soustavy

Dalším specifickým detailem simulací prezentovaných v tomto příspěvku jsou periodické okrajové podmínky. Při numerické homogenizaci (určování efektivních makroskopických vlastností) můžeme na hranici zkoumaného tělesa předepsat posuny odpovídající makroskopické deformaci nebo zatížení odpovídající makroskopickému napětí. V prvním případě obdržíme horní odhad tuhosti, v druhém případě horní odhad poddajnosti. Kompromisem mezi oběma přístupy představuje analýza s periodickými okrajovými podmínkami, což by v ideálním případě znamenalo sledování výseku nekonečně velké analyzované oblasti.



Obrázek 3: 2D znázornění jednoduché periodické buňky

Použití a implementace periodických okrajových podmínek je obdobné jako v [2], tj. vazby (konečné prvky) překračující hranici buňky (spojující částice uvnitř buňky s částicemi některé sousední buňky) jsou vhodně upraveny. Mějme takový prvek, spojující částice J' a K a jeho odpovídající prvek spojující periodické obrazy částic označené jako J a K' (viz obr. 3). Obě vazby jsou skutečné vazby soustavy, ale při sestavování podmínek rovnováhy se uvažuje vždy jen jedna z nich (vazba JK' v naší ukázce). Periodické okrajové podmínky jsou zajištěny soustavou omezujících rovnic obsahujících složky makroskopické deformace $\mathbf{E} = \{E_x, E_y, E_z, E_{yz}, E_{zx}, E_{xy}\}^T$:

$$\begin{aligned}
u_{K'} &= u_K + E_x k_x C + E_{xy} k_y C \\
v_{K'} &= v_K + E_y k_y C + E_{yz} k_z C \\
w_{K'} &= w_K + E_z k_z C + E_{zx} k_x C \\
\phi_{xK'} &= \phi_{xK} \\
\phi_{yK'} &= \phi_{yK} \\
\phi_{zK'} &= \phi_{zK}.
\end{aligned} \tag{7}$$

C je rozměr periodické buňky, konstanty k mají hodnotu -1, 0 nebo 1 dle vztahů mezi polohou částice uvnitř buňky a odpovídající polohou částice vně buňky

$$\begin{aligned}
x_{K'} &= x_K + k_x C \\
y_{K'} &= y_K + k_y C \\
z_{K'} &= z_K + k_z C,
\end{aligned} \tag{8}$$

v naší ukázce tedy $k_x = 1$ a $k_y = -1$. Za předpokladu, že posuny částice J nijak nemodifikujeme, můžeme za pomoci rovnic (7) a (8) zapsat posuny částic J a K' (periodického obrazu částice K) v závislosti na posunech částic J a K a makroskopické deformaci \mathbf{E} jako

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{u}_J \\ \mathbf{u}_{K'} \end{Bmatrix} = \mathbf{T} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_J \\ \mathbf{u}_K \\ \mathbf{E} \end{Bmatrix}, \tag{9}$$

kde \mathbf{T} je transformační matice, jejíž levá část (prvních 12×12 prvků) odpovídá jednotkové matici a jediné nenulové členy zbývající části jsou v řádcích 7-9 a sloupcích 13-18:

$$\mathbf{T}_{(7-9;13-18)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 13 & 14 & 15 & 16 & 17 & 18 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 7 \\ 8 \\ 9 \end{matrix} & \begin{bmatrix} k_x C & 0 & 0 & 0 & 0 & k_y C \\ 0 & k_y C & 0 & k_z C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_z C & 0 & k_x C & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \tag{10}$$

Pomocí transformační matice se upraví matice tuhosti vazeb překračujících hranici periodické buňky (z původní velikosti 12×12 na velikost 18×18) do tvaru

$$\hat{\mathbf{K}} = \mathbf{T}^T \mathbf{K} \mathbf{T}. \tag{11}$$

Složky makroskopické deformace \mathbf{E} jsou tedy uvažovány jako globální stupně volnosti dané soustavy. Odpovídající složky zatížení jsou přímo spojeny s velikostí makroskopického napětí (v případě krychlové buňky se rovnají velikosti napětí násobené objemem buňky).

Posunu celé soustavy jako tuhého tělesa je zabráněno podepřením jedné částice (předepsáním jejich tří posunů jako nulových).

4 Lineárně pružné vlastnosti

Nejjednodušším mechanickým popisem materiálu (a tudíž i částicového modelu) je lineární pružnost. Vyjádření kontaktního napětí (v lokální souřadné soustavě) $\boldsymbol{\sigma}$ v závislosti na ekvivalentní deformaci je analogické k Hookeovu zákonu. V maticové podobě dostáváme pro lineární konstitutivní zákon výraz

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{12}$$

kde

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} k_N & 0 & 0 \\ 0 & k_S & 0 \\ 0 & 0 & k_S \end{bmatrix} \quad (13)$$

je matice materiálové tuhosti vazby zapsaná pomocí normálové a smykové tuhosti k_N a k_S . Pro názornost viz obr. 1. Užitím výše popsaných výrazů můžeme zapsat vztah mezi silami \mathbf{f} a posuny \mathbf{d} v globální souřadné soustavě jako

$$\mathbf{f} = \mathbf{A}\mathbf{B}^T\boldsymbol{\sigma} = \frac{A}{L}\mathbf{B}^T\mathbf{D}\mathbf{B}\mathbf{d} = \mathbf{K}\mathbf{d}, \quad (14)$$

kde $\mathbf{K} = \frac{A}{L}\mathbf{B}^T\mathbf{D}\mathbf{B}$ je matice tuhosti prvku (vazby).

4.1 Vztah mikro- a makroskopických parametrů

Nyní si představme krychli o straně délky C a objemu $V = C^3$ a v ní náhodně rozmístěné těsně uložené (randomly closely packed) částice s jednotným poloměrem R . Pokud je počet částic N dostatečně vysoký, takováto soustava se makroskopicky chová jako izotropní materiál. Pružné vlastnosti izotropního materiálu jsou jednoznačně určeny dvěma materiálovými charakteristikami, například Youngovým modulem E a Poissonovým součinitelem ν .

V úplně obecném případě můžeme makroskopické elastické vlastnosti částicového modelu zapsat jako funkci všech příslušných modelových parametrů:

$$E = f_E(k_N, k_S, R, l_R, C, N, A), \quad (15)$$

$$\nu = f_\nu(k_N, k_S, R, l_R, C, N, A). \quad (16)$$

Při použití rozměrové analýzy můžeme najít dvě rozměrově nezávislé veličiny (například tuhost k_N a poloměr R) a dvě bezrozměrné (tudíž opět rozměrově nezávislé) veličiny, interakční poměr l_R a počet částic N . Za pomoci Buckinghamova π teorému můžeme rovnice (15) a (16) přepsat pomocí nových bezrozměrných veličin jako

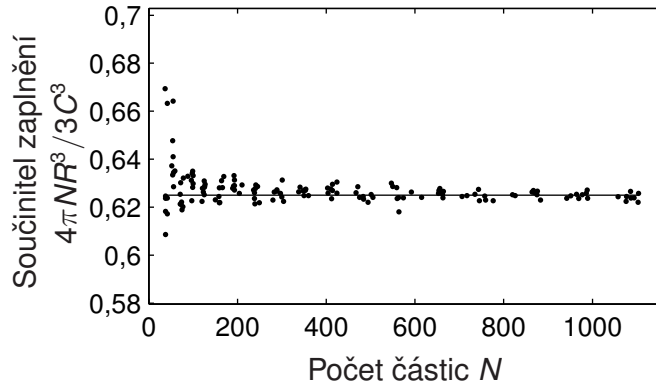
$$\frac{E}{k_N} = \pi_E \left(\frac{k_S}{k_N}, \frac{R^2}{A}, \frac{R}{C}, l_R, N \right), \quad (17)$$

$$\nu = \pi_\nu \left(\frac{k_S}{k_N}, \frac{R^2}{A}, \frac{R}{C}, l_R, N \right). \quad (18)$$

Na základě přijatých fyzikálních předpokladů lze většinu členů z předchozích rovnic eliminovat.

Počet částic N by v podstatě mohl být uvažován jako nezávislý na relativní velikosti částice R/C , avšak oblast našeho zájmu jsou těsně uspořádané (closely packed) soustavy připravené simulovaným stlačováním. Ukazuje se, že pro vysoké hodnoty N je součinitel zaplnění (packing fraction) $4\pi NR^3/3C^3$ konstantní a přibližně roven hodnotě 0,625, což je velice blízko hodnotě 0,64, teoretické maximální hodnotě součinitele zaplnění pro náhodné těsné uložení (random close pack) [10], viz. obr 4. Poměr R/C takovýchto soustav může být tedy určen z počtu částic N a nemusí být uvažován jako nezávislá proměnná.

Pokud bychom navíc počet částic N navyšovali nade všechny meze, makroskopické vlastnosti částicového modelu by se přibližovaly k určité hodnotě představující efektivní



Obrázek 4: Součinitel zaplnění pro různé soustavy s různým počtem částic

vlastnosti ekvivalentního pružného kontinua. Pokud je tedy N zvoleno dostatečně vysoké, odpovídající zkoumaná buňka je reprezentativním objemem (representative volume element, RVE) a její vlastnosti se blíží teoretickým. Tím pádem není nutné uvažovat počet částic N jako veličinu ovlivňující výsledky, pouze musí být zvolen dostatečně vysoký. Viz obr. 9.

Podle rovnice (1) je poměr $R^2/A = 1/\pi$ konstantní pro všechna R .

Po uvážení všech zmíněných předpokladů můžeme vztahy mezi mikro- a makroskopickými materiálovými vlastnostmi přepsat jako

$$\frac{E}{k_N} = \pi E \left(\frac{k_S}{k_N}, l_R \right), \quad (19)$$

$$\nu = \pi \nu \left(\frac{k_S}{k_N}, l_R \right). \quad (20)$$

V [3] je na základě analogie k microplane modelům analyticky odvozen makroskopický tenzor pružné tuhosti ve formě

$$\mathbf{D}_e = \frac{1}{V} \sum_c AL_c (k_N \mathbf{N}_c \otimes \mathbf{N}_c + k_S \mathbf{T}_c^T \cdot \mathbf{T}_c), \quad (21)$$

kde index c označuje jednotlivé vazby, sčítá se přes všechny vazby v objemu buňky. \mathbf{N} a \mathbf{T} jsou projekční tenzory dané vztahy

$$\mathbf{N} = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \quad (22)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{I}_S - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \quad (23)$$

kde $\mathbf{n} \equiv \mathbf{e}_N$ je jednotkový vektor určující směr vazby, \mathbf{I}_S je symetrický jednotkový tenzor čtvrtého řádu ($I_{ijkl}^S = [\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}]/2$), δ_{ij} je Kroneckerovo delta. Za předpokladu, že všechny vazby jsou v prostoru rozprostřeny se stejnou pravděpodobností ve všech možných směrech, může být odvozen následující výraz (pro podrobnosti viz [3]):

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_e &= \frac{A \sum_c L_c}{4\pi V} \int_{\Omega} (k_N \mathbf{N}_c \otimes \mathbf{N}_c + k_S \mathbf{T}_c^T \cdot \mathbf{T}_c) d\Omega = \\ &= \frac{A \sum_c L_c}{5V} (k_N - k_S) \mathbf{I}_V + \frac{A \sum_c L_c}{15V} (2k_N + 3k_S) \mathbf{I}_S. \end{aligned} \quad (24)$$

\mathbf{I}_V je volumetrický projekční tenzor čtvrtého řádu ($I_{ijkl}^V = \delta_{ij}\delta_{kl}/3$). Porovnáním rovnice (24) s tenzorem tuhosti lineárně pružného izotropního materiálu

$$\mathbf{D}_e = \frac{3E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\mathbf{I}_V + \frac{E}{1+\nu}\mathbf{I}_S \quad (25)$$

můžeme zapsat konečnou podobu teoretických vztahů mezi makroskopickými parametry částicového modelu E a ν a mikroskopickými modelovými parametry k_N a k_S jako

$$\nu = \frac{k_N - k_S}{4k_N + k_S}, \quad (26)$$

$$\frac{E}{k_N} = \frac{A \sum_c L_c}{3V} \frac{2 + 3\frac{k_S}{k_N}}{4 + \frac{k_S}{k_N}}. \quad (27)$$

4.2 Získání a vyhodnocení výsledků

Pro účely stanovení makroskopických materiálových parametrů E a ν bylo analyzováno několik částicových soustav, a to pro různé hodnoty bezrozměrných veličin I_R a k_S/k_N . Pro každou soustavu s danými mikroskopickými parametry se provedlo šest simulací, pokaždé s jednou složkou makroskopické deformace předepsanou jako jednotkovou a ostatními složkami makroskopické deformace nulovými. Výsledné makroskopické napětí potom odpovídá složkám v příslušném sloupci makroskopické matice materiálové tuhosti \mathbf{D}_e .

V první fázi vyhodnocení výsledků je materiál uvažován jako ortotropní s maticí poddajnosti \mathbf{C}_e dle rovnice (28), ze které se materiálové parametry $E_1, E_2, E_3, \nu_{12}, \nu_{21}, \nu_{13}, \nu_{31}, \nu_{23}, \nu_{32}$ snadno získají. V ideálním případě izotropního materiálu jsou jednotlivé Youngovi moduly, stejně jako jednotlivé Poissonovy součinitele, totožné.

$$\mathbf{C}_e = \mathbf{D}_e^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & -\frac{\nu_{21}}{E_2} & -\frac{\nu_{31}}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_1} & \frac{1}{E_2} & -\frac{\nu_{32}}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{13}}{E_1} & -\frac{\nu_{23}}{E_2} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{31}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{bmatrix} \quad (28)$$

Jedním z výstupů výzkumu je ověření izotropního chování modelu na makroskopické úrovni, proto se zavádí různé „relativní anizotropie“. Grafy závislostí těchto hodnot na počtu částic N pro různé hodnoty interakčního poměru I_R , jakož i interpretace výsledků a jejich diskuze, nacházejí se v kapitole 6.1. Sledované veličiny jsou:

- Relativní anizotropie Youngova modulu E

$$\Delta E/E = \frac{\max_i \{|E_i - E_{\text{avg}}|\}}{E_{\text{avg}}}, \quad (29)$$

E_i značí i -tý spočtený modul a E_{avg} jejich průměrnou hodnotu.

- Relativní anizotropie Poissonova součinitele ν

$$\Delta \nu/\nu = \frac{\max_{ij} \{|\nu_{ij} - \nu_{\text{avg}}|\}}{\nu_{\text{avg}}}, \quad (30)$$

význam indexů obdobný jako v případě Youngova modulu.

- Relativní odchylka hodnoty smykového modulu G od teoretické hodnoty $E/2(1 + \nu)$

$$\Delta G/G = \frac{\max_i \{|G_i - E_{\text{avg}}/2(1 + \nu_{\text{avg}})|\}}{E_{\text{avg}}/2(1 + \nu_{\text{avg}})}. \quad (31)$$

- V matici tuhosti/poddajnosti ideálně izotropního materiálu je také několik nulových členů. Ve výsledku numerické simulace ale tyto členy jsou nenulové, poslední sledovaná veličina je tedy „nenulovost“ těchto členů

$$\Delta/E = \frac{\max_{ij} \{D_{ij}\}}{E_{\text{avg}}}, \quad (32)$$

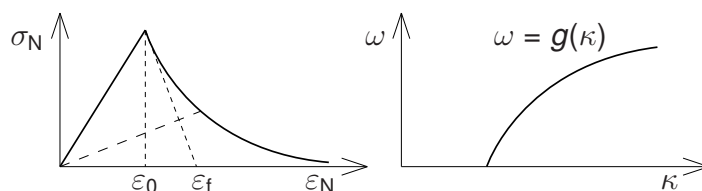
kde D_{ij} jsou členy matice tuhosti/poddajnosti nulové pro ideálně izotropní materiál.

5 Nepružné chování

Existuje mnoho způsobů popisu nelineárního a nepružného chování materiálů (plasticita, poškození, viskozita atd.) a nepřeborné množství jejich možných kombinací. Také možných použití a implementací v diskrétních částicových modelech lze najít celou řadu (obvykle jsou ale inspirovány materiálovými zákony navrženými pro jedno- až trojrozměrné kontinuum), v tomto příspěvku se však omezíme jen na nejjednodušší z nich a na specifický způsob nepružné analýzy za použití periodických okrajových podmínek.

5.1 Nepružné chování jedné vazby

Stejně jako byly lineárně pružné vlastnosti definovány na jednotlivých vazbách, i v případě nepružných vlastností budeme postupovat stejně. Materiálové nelinearity rozdělíme na část normálovou a část smykovou (samozřejmě lze uvažovat i obě dohromady nebo je různě kombinovat a získat tak různé výsledné chování). Normálová část napětí se bude řídit jednoduchými zákony poškození, smyková část napětí se zase bude řídit plasticitou.



Obrázek 5: Pracovní diagram pro tahové poškození

Pro popis napětí v normálovém směru použijeme jednoduchý 1D model poškození

$$\sigma_N = [1 - \omega H(\epsilon_N)] k_N \epsilon_N, \quad (33)$$

kde k_N je normálová tuhost vazby a $\omega \in \langle 0, 1 \rangle$ je parametr poškození. Heavisideova funkce $H(\epsilon_N)$ způsobí zrušení vlivu poškození v tlaku, což odpovídá zavření trhlin. Parametr poškození je vypočten dle funkce vývoje poškození

$$\omega = g(\kappa) = 1 - \frac{\epsilon_f}{\kappa} \exp\left(-\frac{\kappa - \epsilon_0}{\epsilon_f}\right), \quad (34)$$

kde κ je maximální dosažená tahová deformace vazby, ε_0 je mezní pružné přetvoření vazby a ε_f určuje sklon sestupné větve pracovního diagramu. Viz obr 5.

Pro smykové napětí budeme předpokládat plastický zákon

$$\sigma_S = k_S(\varepsilon_S - \varepsilon_{Sp}), \quad (35)$$

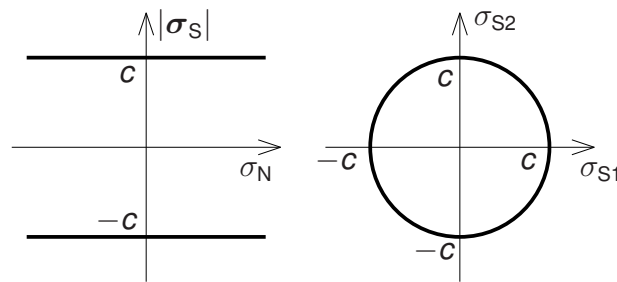
kde ε_{Sp} je plastická část smykové deformace. Hodnota smykového napětí je omezena funkcí plasticity f , která obecně může mít podobu například inspirovanou Mohr-Coulombovou podmínkou plasticity, zahrnující i vliv normálového napětí. Zde budeme pro jednoduchost předpokládat obdobu Trescovy podmínky, totiž že k plastickému přetváření dojde, pokud smykové napětí dosáhne kritické hodnoty:

$$f(\sigma_S) = |\sigma_S| - c, \quad c = c_0(1 - \omega), \quad (36)$$

kde c_0 je počáteční soudržnost (mez kluzu ve smyku) a c je aktuální soudržnost se zahrnutím vlivu poškození, viz obr 6. Pro směr přírůstku plastické deformace aplikujeme zákon plastického tečení

$$\dot{\varepsilon}_{Sp} = \dot{\lambda} \frac{\sigma_S}{|\sigma_S|}, \quad (37)$$

$\dot{\lambda}$ je plastický násobitel.

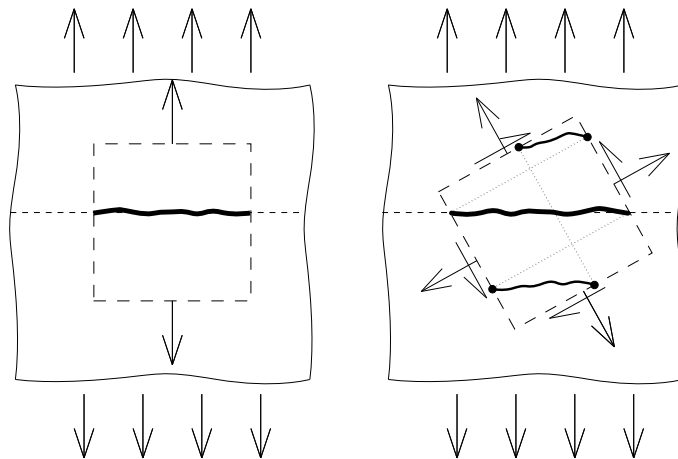


Obrázek 6: Uvažovaná podmínka plasticity

5.2 Vliv periodických okrajových podmínek

Popsané a používané periodické okrajové podmínky mají mnoho výhod (nedochází ke koncentraci napětí v blízkosti okrajů buňky apod.), při nedostatečném uvážení všech jejich vlivů mohou však mít i efekt naprosto opačný. Míněno je různé chování buňky při různém natočení v prostoru. Jako příklad uveďme namáhání v jednoosém tahu.

Na obrázku 7 je znázorněn výsek materiálu a směr předpokládané plochy porušení (vodorovná čárkovaná čára), tedy plochy lokalizace deformace. Periodická buňka se může "roztrhnout" jen v plochách rovnoběžných se stěnami buňky nebo v ploše rovnoběžné s rovinou určenou dvěma protějšími hranami („úhlopříčně“). Pokud by k lokalizaci začalo docházet v jiné rovině než ve výše jmenovaných (např. nejtučnější čára v pravé části obrázku 7), vlivem vynucených periodických okrajových podmínek by se trhlinka musela začít šířit též v periodických obrazech okrajů původní trhliny v jiných částech hranice (vyznačeno tučnými body v pravé části obrázku). Z těchto druhotných bodů by se vytvořila jedna nebo více (v závislosti na natočení buňky a zatížení) nových trhlín (v pravé části obrázku vyznačeny středně tučně) a potřebná energie k porušení vzorku by tudíž byla vyšší než v ideálním případě trhliny rovnoběžné s některou stěnou buňky.



Obrázek 7: Vliv periodických okrajových podmínek při různém natočení periodické buňky

Při analýze periodické buňky je tedy nejdříve nutné určit úhel natočení, při kterém vznikne právě jedna lokalizační plocha. Tato poloha buňky nás bude nejvíce zajímat, protože nelineární chování pro takto natočenou buňku je nejkřehčí a odpovídá skutečnému porušení materiálu. Negativní vliv periodických okrajových podmínek v podobě zvýšení duktility konstrukce vymizí a naopak zbude jejich pozitivní vliv, totiž redukce koncentrace napětí poblíž okrajů buňky.

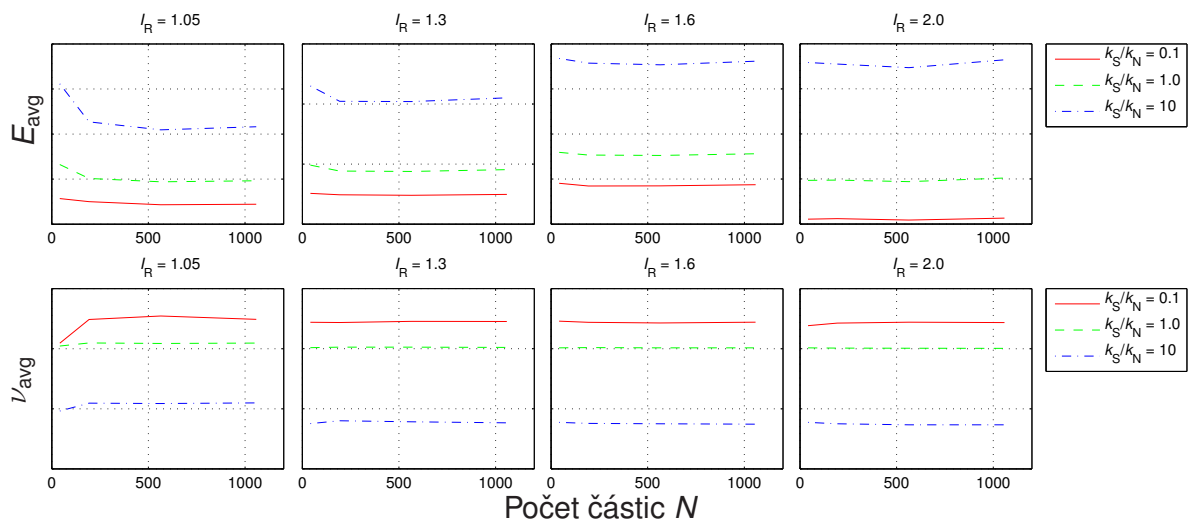
Při analýze soustavy by měla být odezva v pružné oblasti chování (téměř) shodná po všechna natočení buňky (a to díky již zmíněné izotropii pružných vlastností), na druhou stranu po lokalizaci deformace by naopak chování pro každé natočení mělo být odlišné. Právě takové výsledky jsou ukázány v kapitole 6.3.

6 Výsledky

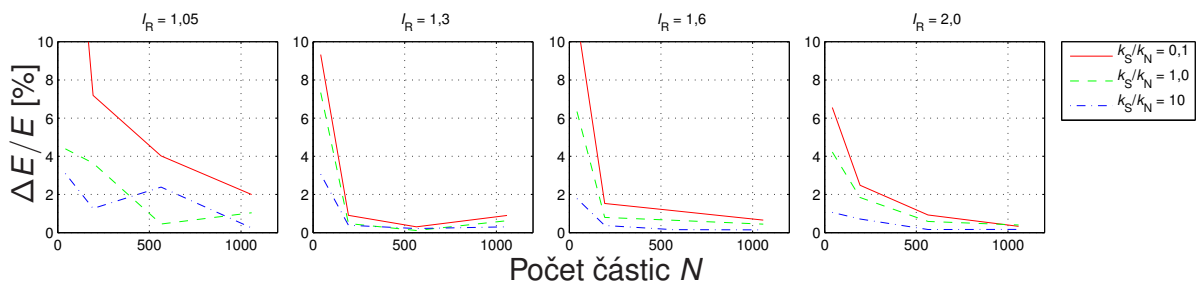
6.1 Izotropie pružných vlastností

Zprvce byla na částicovém modelu sledována izotropie jeho pružných makroskopických vlastností a stabilita získaných výsledků v závislosti na počtu částic N . Izotropie byla vyhodnocena dle rovnic (29) až (32). Získané poznatky mohou být shrnuty takto:

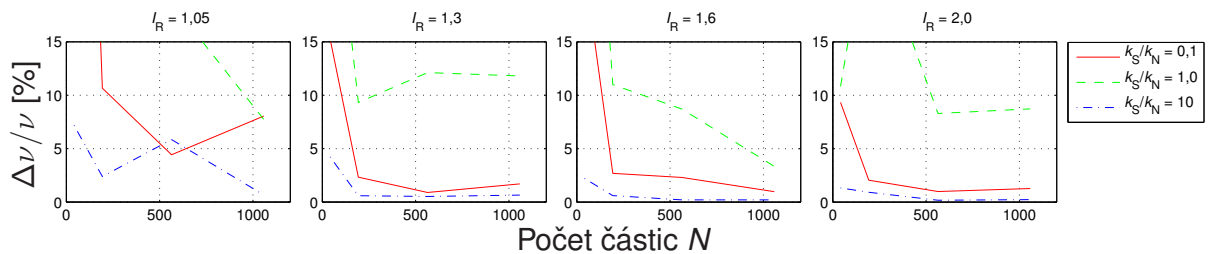
- Průměry materiálových parametrů (ve smyslu rovnic (29) až (32)) téměř nezávisí na hodnotě počtu částic, dokonce i pro N menší než 100. Pro více než 200 částic jsou průměrné hodnoty materiálových parametrů (téměř) neměnné pro všechny typy simulací, tj. pro jakýkoliv poměr k_S/k_N a interakční poměr I_R . Viz obr. 8.
- Relativní anizotropie Youngova modulu klesá se vzrůstajícím počtem částic. Konvergence je rychlejší pro vyšší I_R a vyšší poměr k_S/k_N . Viz obr. 9.
- Relativní anizotropie Poissonova součinitele ν se chová obdobně, totiž klesá pro zvětšující se počet částic. Na rozdíl od Youngova modulu je nejpomalejší (nebo dokonce téměř žádné) konvergence dosaženo pro poměr k_S/k_N blízký hodnotě 1. To je způsobeno skutečností, že pro $k_S/k_N = 1$ má Poissonův součinitel ν teoretickou hodnotu 0. I když skutečná hodnota není přesně nula, její velikost je malá a relativní chyba tím pádem vysoká. Viz obr. 10.



Obrázek 8: Stabilita průměrných hodnot Youngova modulu E a Poissonova součinitele ν pro různý počet částic N

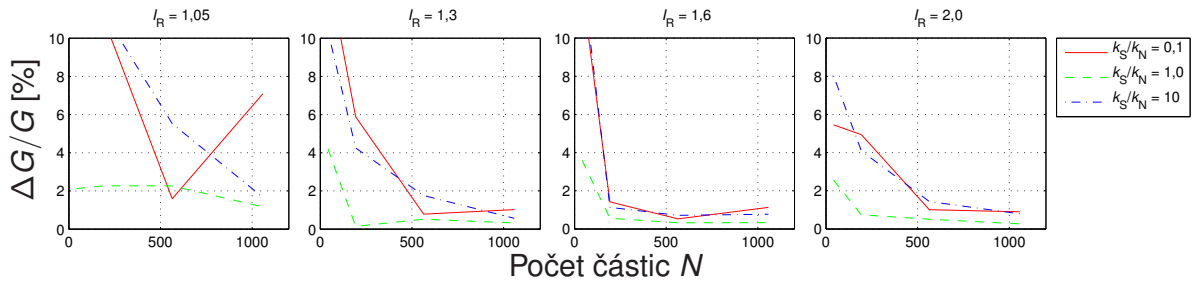


Obrázek 9: Relativní anizotropie Youngova modulu $\Delta E/E$ (viz rovnici (29)) pro různé N



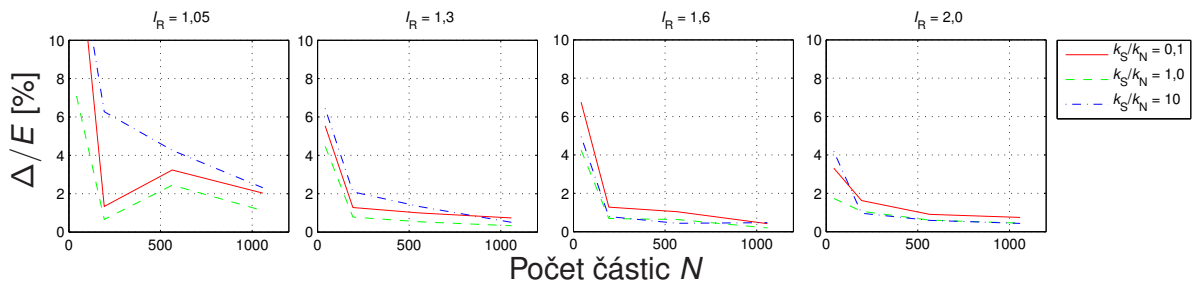
Obrázek 10: Relativní anizotropie Poissonova součinitele $\Delta \nu / \nu$ (viz rovnici (30)) pro různé N

- Relativní odchylka průměrné hodnoty smykového modulu G od teoretické hodnoty $E/2(1 + \nu)$ se zmenšuje se zvyšujícím se počtem částic. Konvergence je rychlejší pro k_S/k_N blíže k 1. Viz obr. 11.



Obrázek 11: Relativní odchylka průměrné hodnoty smykového modulu $\Delta G/G$ (viz rovnici (31)) pro různé N

- Teoreticky nulové členy matice tuhosti jsou skutečně téměř nulové. Jejich „nenulovost“ se opět snižuje pro zvyšující se počet částic, rychlejší konvergence je dosaženo pro větší interakční poměr I_R a pro k_S/k_N blíže k 1. Viz obr. 12.



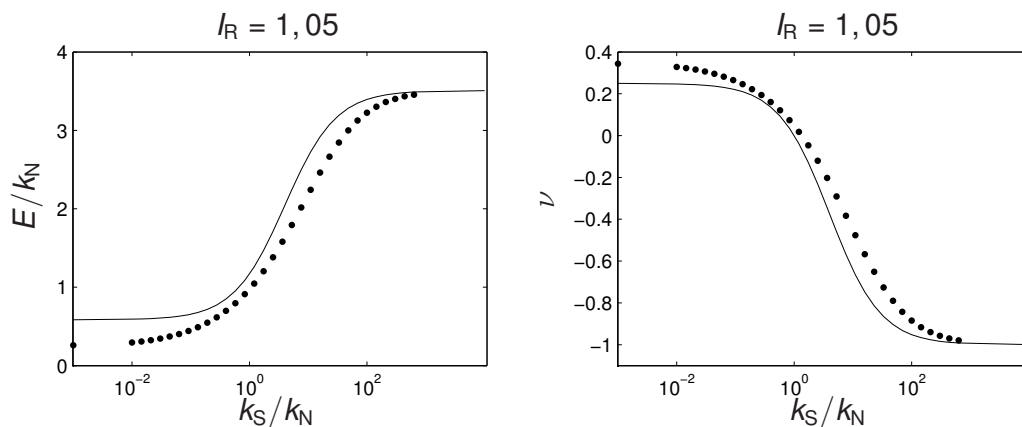
Obrázek 12: Relativní odchylka „nulových“ členů matice tuhosti Δ/E (viz rovnici (32)) pro různé N

- Všechny výše jmenované sledované závislosti obecně splňují naše předpoklady.

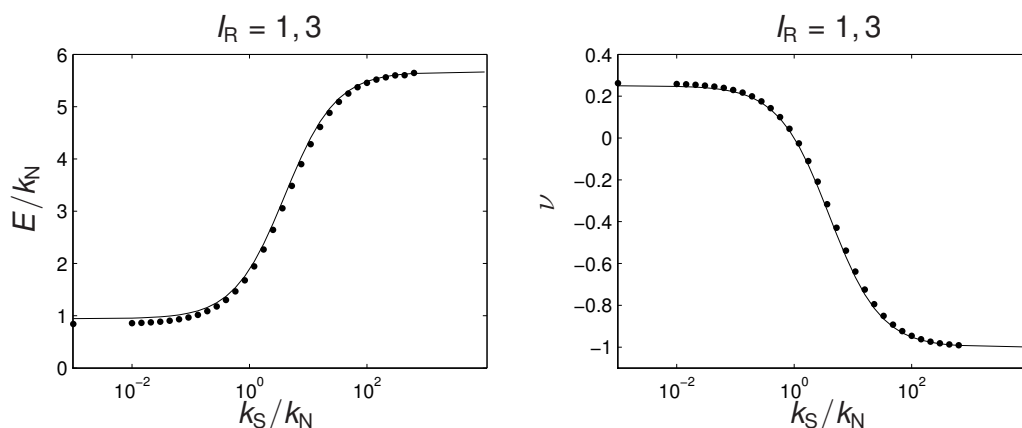
6.2 Vztah mikro- a makroskopických elastických parametrů

Zadruhé byl zkoumán vztah mezi mikroskopickými a makroskopickými elastickými materiálovými parametry. Pro tento účel bylo analyzováno několik částicových soustav a jako numerický výsledek byla uvažována vždy průměrná hodnota parametrů. Počet částic analyzovaných soustav byl zvolen jako kompromis mezi přesností (ve smyslu anizotropie vzorků) a časovou náročností výpočtů, a sice v rozmezí 700 až 800 kusů. Numerické výsledky pro různé hodnoty interakčního poměru I_R byly porovnány s analytickými odhady. Přehledné zobrazení výsledků je v následujících grafech. Body představují numerické výsledky, čáry pak analytické hodnoty.

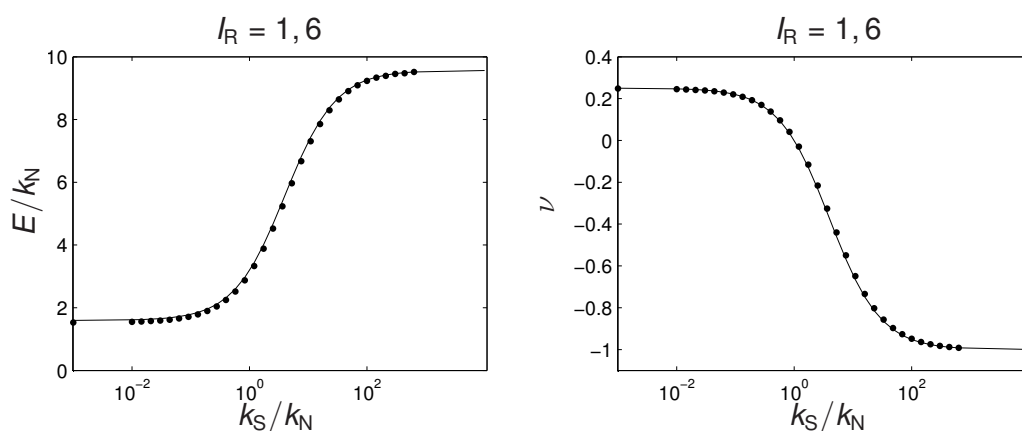
Jak je z grafů patrné, shoda mezi analytickými a numerickými výsledky je výborná pro vyšší interakční poměr I_R . Na druhou stranu analytické vzorce dle [3] nezanedbatelně nadhodnocují skutečnou (numericky zjištěnou) hodnotu Youngova modulu (tento fakt je důsledkem způsobu odvození vzorců a byl předpokládán) a podhodnocují skutečnou hodnotu Poissonova součinitele ν pro $I_R < 1,3$.



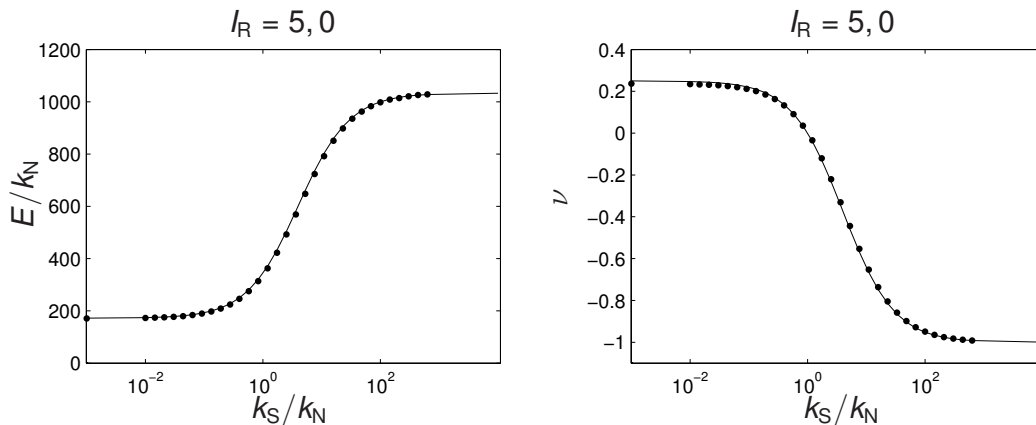
Obrázek 13: Vztah mezi mikro- a makroskopickými pružnými parametry pro $l_R = 1,05$ (v logaritmickém měřítku)



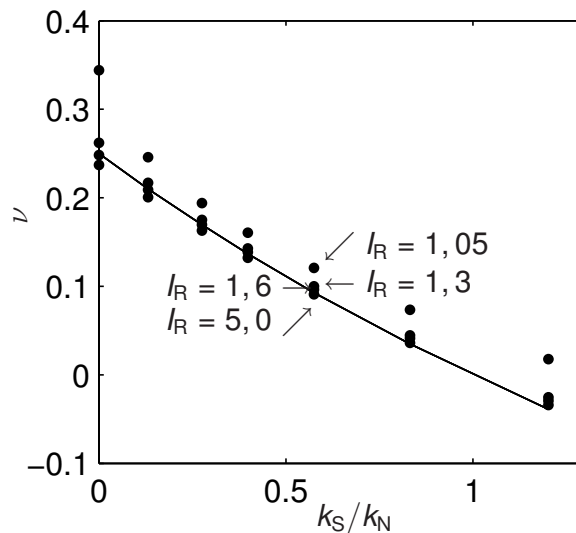
Obrázek 14: Vztah mezi mikro- a makroskopickými pružnými parametry pro $l_R = 1,3$ (v logaritmickém měřítku)



Obrázek 15: Vztah mezi mikro- a makroskopickými pružnými parametry pro $l_R = 1,6$ (v logaritmickém měřítku)



Obrázek 16: Vztah mezi mikro- a makroskopickými pružnými parametry pro $l_R = 5,0$ (v logaritmickém měřítku)



Obrázek 17: Závislost ν na mikroskopických pružných parametrech

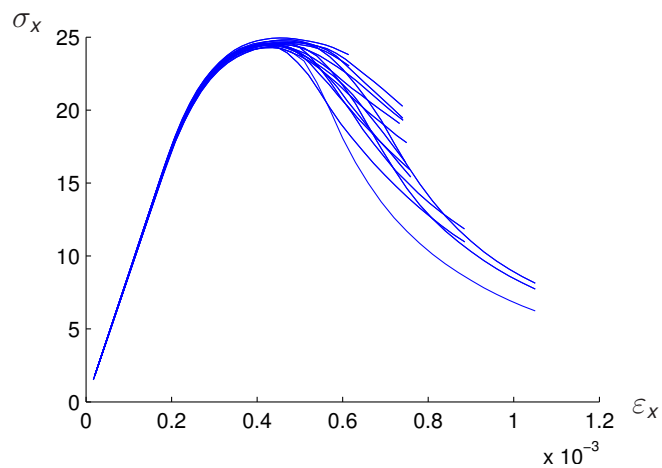
Pro všechny hodnoty l_R je v limitním případě $k_S/k_N \rightarrow \infty$ hodnota Poissonova součinitele rovna -1 (extrémní teoretická hodnota Poissonova součinitele), zatímco maximální dosažitelná hodnota (v souladu s rovnicí (26)) je $1/4$ pro vyšší l_R . Vyšší hodnoty Poissonova součinitele, až $0,343$, lze dosáhnout pro $l_R = 1,05$.

6.3 Nepružné chování

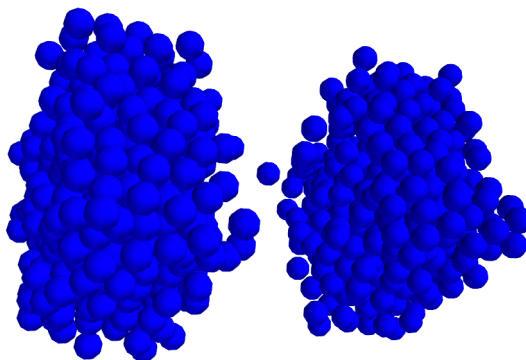
V rámci nepružného chování byla analyzována periodická buňka pro jednoduchá namáhání a pro proměnnou polohu buňky vůči zatížení tak, aby se určil úhel natočení buňky, při kterém je chování soustavy nejkřehčí (dochází k lokalizaci pouze v jedné ploše).

Prvním jednoduchým zatěžováním byl jednoosý tah. Dle očekávání bylo nejmenší pevnosti (nejkřehčího chování) dosaženo pro buňku natočenou tak, že směr tahového napětí byl kolmý na jednu ze stěn buňky.

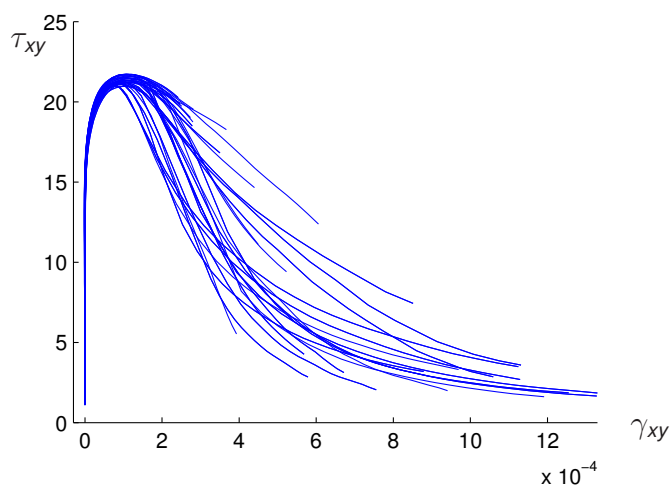
Dalším zkoumaným způsobem zatěžování byl čistý smyk.



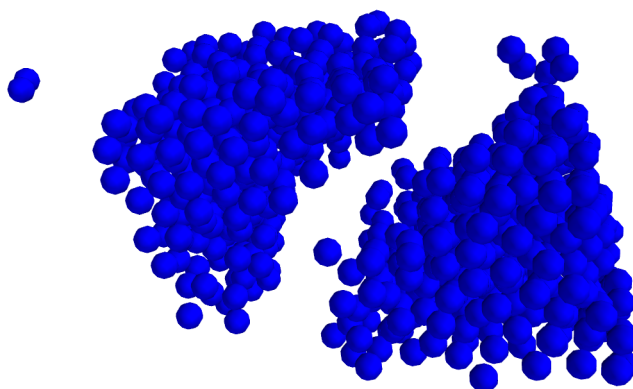
Obrázek 18: Tahový pracovní diagram soustavy pro různé natočení buňky



Obrázek 19: Porušení vzorku při tahové zkoušce



Obrázek 20: Smykový pracovní diagram soustavy pro různé natočení buňky



Obrázek 21: Porušení vzorku při smykové zkoušce

Z grafů je patrné splnění předpokladů ve smyslu shodného chování v pružné oblasti pro všechna natočení buňky a naopak naprosto rozdílného chování v oblasti nepružné.

7 Závěr

V tomto příspěvku byl zkoumán částicový model sestávající z náhodně rozmístěných těsně uložených (randomly closely packed) tuhých kulových částic spojených deformovatelnými vazbami schopnými přenášet normálová a smyková napětí. Bylo ukázáno, že takováto soustava se makroskopicky chová izotropně a odchylky od izotropie klesají se vzrůstajícím počtem částic v soustavě. Konvergence je rychlejší pro větší interakční poměr.

Byl vyšetřován vztah mezi mikroskopickými pružnými vlastnostmi na úrovni jednotlivé vazby a efektivními elastickými vlastnostmi makroskopického materiálu, a to analyticky i numericky. Pro interakční poměr větší než 1,3 je shoda analytických a numerických výsledků velmi dobrá, ale pro $I_R < 1,3$ analytické vzorce podhodnocují Poissonův součinitel a nadhodnocují Youngův modul pružnosti.

Také byly diskutovány výhody a nevýhody používání periodických okrajových podmínek při nepružné analýze a na jednoduchých zatěžovacích stavech ukázány výsledky pro různé pootočení periodické buňky vůči působícímu zatížení.

8 Poděkování

Tímto bych chtěl poděkovat Ing. Mgr. Václavu Šmilauerovi za rady a konzultace ohledně programu YADE a programovacího jazyka Python, Doc. Dr. Ing. Bořku Patzákovi za rady a konzultaci ohledně programu OOFEM a Prof. Ing. Milanu Jiráskovi, DrSc. za podněty při tvorbě příspěvku, rady a konzultace ohledně OOFEMu, částicových modelů a mechaniky všeobecně. Dále bych rád poděkoval za finanční podporu grantem GAČR 106/08/1508.

Literatura

- [1] Cundall, P., Strack, O. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 1979, vol. **29**, pp. 47–65.
- [2] Grassl, P., Jirásek, M. Meso-scale approach to modelling the fracture process zone of concrete subjected to uniaxial tension. *International Journal of Solids and Structures*, 2010, vol. **47**, pp. 957–968.
- [3] Kuhl, E., D’Addetta, G. A., Leukart, M., et al.: Microplane modelling and particle modelling of cohesive-frictional materials. In *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive-Frictional Materials*, ed P. A. Veemer et al. Springer, Berlin, 2001, pp. 31–46.
- [4] Kun, F., Herrmann, J. A study of fragmentation processes using a discrete element method. *Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1979, vol. **38**, pp. 3–18.
- [5] Liu, K., Gao, L., Tanimura, S. Application of Discrete Element Method in Impact Problems. *Japan Society Mechanical Engineering*, 2004, vol. **47**, pp. 138–145.
- [6] Patzák, B., Bittnar, Z. Design of object oriented finite element code. *Advances of Engineering Software*, 2001, vol. **32**, pp. 759–767.
- [7] Sawamoto, Y., Tsubota, H. Analytical studies on local damage to reinforced concrete structures under impact loading by discrete element method. *Nuclear engineering and Design*, 1998, vol. **179**, pp. 157–177.
- [8] Schlangen, E., Garboczi, E. J. New method for simulating fracture using an elastically uniform random geometry lattice. *International Journal of Engineering Science*, 1996, vol. **34**, pp. 1131–1144.
- [9] Tavarez, F. A., Plesha, M. E. Discrete element method for modelling solid and particulate materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2007, vol. **70**, pp. 379–404.
- [10] Torquato, S., Truskett, T. M., Debenedetti, P. G. Is random close packing of spheres well defined? *Physical Review Letters*, 2000, vol. **84**, pp. 2064–2067.
- [11] Šmilauer, V. Yade: past, present, future. 2010, <https://yade-dem.org/images/5/59/Eudoxos2010-yade-past-present-future.pdf>.
- [12] <https://yade-dem.org>, <http://www.launchpad.net/yade>.
- [13] <http://www.oofem.org>.