

УРАХУВАННЯ ПОТЕНЦІАЛУ ВЗАЄМОДІЇ ЧАСТОК В ГЕОМЕТРИЧНОМУ МОДЕЛЮВАННІ ПОВЕРХНІ ПІСЛЯ ДЕФОРМАЦІЇ

Національний технічний університет «ХПИ», м. Харків, Україна

В роботі розглядаються різновиди потенціалів взаємодії часток з ціллю визначення найбільш практичного у використанні в розрахункових роботах

Постановка проблеми. Потенціал взаємодії часток в геометричному моделюванні може відігравати таку ж роль, що і визначальні рівняння у механіці суцільного середовища. Проте структура потенціалу є значно простішою, ніж у визначальних рівнянь, тому що він представляє собою скалярну функцію відстані, і дозволяє моделювати будь-які фізичні властивості матеріалу, що приведе до спрощення розрахунків під час моделювання.

Аналіз попередніх досліджень та публікацій. У статті А.Ю. Ніцина [1] було отримано систему нелінійних рівнянь пружної деформації нити. У статті [2] порівнювалися різні методи чисельного інтегрування рівнянь руху, зокрема, застосовувалися різні елементи методу часток. Було визначено найбільш ефективний метод – метод Верля. У попередніх методах за основу беруться континуальні рівняння суцільного середовища. За своєю суттю ці методи є континуальними, дискретність в них чисто обчислювальна. Метод, що розглядається в даній роботі, відрізняється тим, що в ньому за основу беруться рівняння руху самих, що визначаються балансом кількості руху і потенціалом взаємодії між частками, тобто даний метод є істинно дискретним [3].

Постановка задачі. Для спрощення отриманих рівнянь пружної деформації нити необхідно розглянути та обрати найбільш відповідний до цілей та задач дослідження сплайнний потенціал, що зможе замінити значну кількість використаних коефіцієнтів властивостей матеріалу.

Основна частина. Розглянемо довільний парний потенціал $\Pi(r)$. Сила взаємодії $f(r)$, що відповідає йому визначається як:

$$f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r) \quad (1)$$

Позначимо σ , a та b відстані, на яких потенціал та його перша та друга похідні перетворюються на нуль:

$$\Pi(\sigma) \equiv 0, \quad \Pi'(a) \equiv -f(a) \equiv 0, \quad \Pi''(b) \equiv -f'(b) \equiv 0 \quad (2)$$

Нижче розглянемо тільки потенціали, для яких рівняння (2) мають єдине рішення, причому $\sigma < a < b$. Це виконується для усіх найпростіших потенціалів взаємодії, таких як потенціал Ленарда-Джонса, Мі, Морзе и др. Основна властивість потенціала полягає в тому, що при наближенні ($r < a$) частки відштовхуються, при віддаленні ($r > a$) – притягуються, причому при значному віддаленні ($r > 2a$) потенціал та сила взаємодії наближуються до нуля. Відстань a є рівноважною відстанню між частками, відстань b є критичною, при якій настає розрив міжатомного зв'язку. При врахуванні впливу атомів наступних

координаційних сфер рівноважна та критична відстань змінюються, але для потенціалів, що досить швидко меншають з відстанню, ці зміни є малими порівняно з a та b . Введемо безрозмірний параметр ε_* – відносне подовження міжатомного зв'язку при його розриві:

$$\varepsilon_* \stackrel{\text{def}}{=} \frac{b-a}{a} \quad (3)$$

Важливим характеристиками взаємодії є:

$$D \stackrel{\text{def}}{=} |\Pi(a)|, \quad f_* \stackrel{\text{def}}{=} |f(b)| \quad (4)$$

– енергія зв'язку та міцність зв'язку відповідно.

Часто виникає необхідність змінити ступінь дальності потенціалу, зберігши при цьому його основні властивості. Для цього може використовуватися наступний модифікований потенціал:

$$\tilde{\Pi}(r) \stackrel{\text{def}}{=} \Pi(\kappa(r-a) + a) \quad (5)$$

де Π – деякий довільний потенціал взаємодії. При $\kappa=1$, похідний і модифікований потенціали співпадають, при $\kappa>1$ модифікований потенціал «стиснутий» по осі X порівняно з похідним, при $\kappa<1$ модифікований потенціал «розтягнутий». $\tilde{\Pi}(a) \equiv \Pi(a)$, а відповідно стиснення та розтягування потенціала відбувається відносно точки рівноваги $r=a$. Відповідна сила взаємодії дорівнює $\tilde{f}(r) = -\tilde{\Pi}(r)$, отже:

$$\tilde{f}(r) = \kappa f(\kappa(r-a) + a) \quad (6)$$

Отже, $\tilde{f}(a) \equiv 0$. Наведемо формули, що встановлюють зв'язок параметрів модифікованого потенціала з параметрами вихідного потенціала:

$$\tilde{D} = D, \quad \tilde{f}_* = f_*, \quad \tilde{C} = \kappa^2 C \quad (7)$$

$$\tilde{\varepsilon}_* = \frac{1}{\kappa} \varepsilon_*, \quad \tilde{k}_* = k_*, \quad \tilde{k}_g = \kappa k_g, \quad \tilde{k}_2 = \frac{\Pi(2a)}{\Pi(a+\kappa a)} k_2, \quad \tilde{\Gamma} = \kappa \Gamma \quad (8)$$

Модифікований потенціал, що отриманий з потенціала Морзе, є потенціалом Морзе зі зміненим значенням $\tilde{\alpha}=\kappa\alpha$. Модифікований потенціал, що отриманий з потенціала Ленарда-Джонса при $\kappa=a/b$, еквівалентний щодо потенціала Морзе, який визначається параметром a . Под еквівалентністю тут розуміємо, що вказані потенціали мають однаково значення параметра k_v , відповідно, в них можуть співпадати три найважливіші розмірні параметри: рівноважна відстань a , жорсткість зв'язку C і енергії зв'язку D . Таким чином, використання модифікованого потенціала дозволяє узагальнити взаємодію Ленарда-Джонса, зробивши його трипараметричним, по аналогії з потенціалом Морзе [3].

Для прискорення чисельних розрахунків доводиться обмежувати взаємодію часток деяким радіусом обрізання потенціала. Часто просто приймається, що для $r>a_{cut}$, де a_{cut} – радіус обрізання, потенціал стає нульовим. Однак це призводить до порушення неперервності в точці $r=a_{cut}$ для потенціала та його похідних. Для усунення цієї проблеми використовуються сплайнові потенціали.

Один зі шляхів визначення сплайнового потенціалу [3] наступний:

$$\tilde{\Pi}(r) = \begin{cases} \Pi(r) & 0 < r \leq b; \\ -a_2(a_{cut}^2 - r^2)^2 + a_3(a_{cut}^2 - r^2)^3, & b, r \leq a_{cut}; \\ 0 & a_{cut} < r; \end{cases} \quad (9)$$

де:

$$a_2 = \frac{5b^2 - a_{cut}^2}{8b^3(a_{cut}^2 - b^2)^2} f_*, a_3 = \frac{3b^2 - a_{cut}^2}{12b^3(a_{cut}^2 - b^2)^2} f_*; \quad (10)$$

$$a_{cut}^2 = b^2 \left(5 - \sqrt{16 + \frac{24\Pi(b)}{bf_*}} \right) \quad (11)$$

Тут величини b і f_* є відстанню розриву зв'язку та міцністю зв'язку для потенціала $\Pi(r)$. Відповідна сила взаємодії:

$$\tilde{f}(r) = \begin{cases} f(r) & 0 < r \leq b; \\ 2r(a_{cut}^2 - r^2)^2 (3a_3(a_{cut}^2 - r^2) - 2a_2), & b, r \leq a_{cut}; \\ 0 & r > a_{cut}; \end{cases} \quad (12)$$

Тут якості $\Pi(r)$ обрано потенціал Ленарда-Джонса, що дає $b \approx 1.11$ та $a_{cut} \approx 1.52$. Сплайновий потенціал (9), зберігаючи значення вихідного потенціала взаємодії до точки розриву $r=b$, забезпечує його перетворення в нуль при $r=a_{cut}$, зберігаючи при цьому безперервність до 2-ої похідної в точці $r=b$ і до першої похідної в точці $r=a_{cut}$. Відмітимо, що вимога безперервності $\tilde{\Pi}'(r)$ та $\tilde{\Pi}''(r)$ в точці $r=b$ дає формули для коефіцієнтів a_2 та a_3 (10). Безрозмірні параметри ε_* , k_* , k_v та Γ для сплайнового потенціала $\tilde{\Pi}(r)$ залишаються такими ж, як для вихідного $\Pi(r)$, змінюється тільки коефіцієнт k_2 , приймаючи значення $k_2 = \infty$. Суттєва перевага потенціала (9) полягає в тому, що при моделюванні він не вимагає витягання квадратного кореня при обчисленні сили. Недолік полягає в тому, що він не дозволяє змінювати максимальний радіус взаємодії a_{cut} , так як він жорстко пов'язаний з b (11). В результаті для двумірної ГПУ ґратки даний потенціал забезпечує взаємодію тільки з найближчими сусідами, але для тривимірної ГЦК ґратки в область взаємодії потрапляє і друга координаційна сфера.

Також може використовуватися наступний сплайновий потенціал:

$$\tilde{\Pi}(r) = \Pi(r)K(r) \quad (13)$$

де:

$$K(r) = \begin{cases} 1 & 0 < r \leq b \\ \left(1 - \left(\frac{r-b}{a_{cut}-b} \right)^2 \right)^2, & b < r \leq a_{cut} \\ 0 & r > a_{cut} \end{cases} \quad (14)$$

Відповідна сила взаємодії має вид:

$$\tilde{f}(r) = \begin{cases} f(r) & 0 < r \leq b \\ M(r) \left(f(r)M(r) + 4 \frac{r-b}{(a_{cut}-b)^2} \Pi(r) \right) & b < r \leq a_{cut} \\ 0 & r > a_{cut} \end{cases} \quad (15)$$

$$M(r) = 1 - \left(\frac{r-b}{a_{cut}-b} \right)^2 \quad (16)$$

Перевагою даного потенціала, порівняно з попереднім, є незалежність величин b і a_{cut} . Недоліком є відсутність безперервності другої похідної при $r=b$. Крім того, даний потенціал потребує більш довготривалого чисельного розрахунку: необхідно обчислення квадратного кореня, а також функції $P(r)$ при $b < r < a_{cut}$. Обчислювальні проблеми можуть бути видалені шляхом табуляції сили взаємодії. Як і в попередньому випадку, безрозмірні параметри ε_* , k_* , k_v та G для даного сплайнового потенціалу $\tilde{P}(r)$ залишаються такими ж, як і для $P(r)$, змінюється тільки коефіцієнт k_2 , приймаючи значення $k_2 = \infty$ при $a_{cut} \leq 2$.

Практичним використанням даної роботи є об'ємне листове штампування, матеріал якого – сталь, матеріал з кристалічною решіткою ГЦК, тому в якості $P(r)$ можемо застосовувати більш простий в обчисленні потенціал Ленарда-Джонса, що дає $b \approx 1.11$ та $a_{cut} \approx 1.52$.

Розглянемо сукупність однакових часток, що взаємодіють за допомогою розглянутого потенціалу взаємодії. Для визначення всіх параметрів моделі достатньо вибрати три основні розмірні величини – базові значення маси, відстані та часу. Решта розмірних величин можуть бути визначені через них та безрозмірні коефіцієнти. Подальше уточнення моделі може бути таким чином виконане вибором потенціалу взаємодії таким чином, щоб безрозмірні параметри, що описують його, дозволяли добитися потрібних значень безрозмірних макроскопічних параметрів моделюємого матеріалу, наприклад, таких як відношення модуля Юнга до межі міцності і др. Вказаний вибір в найбільш простих випадках може виконуватися аналітично, в більш складних він потребує проведення тестових комп'ютерних експериментів.

Висновок. В роботі розглянуто та порівняно між собою різновиди потенціалів взаємодії часток, обрано для подальших розрахунків потенціал Ленарда-Джонса та отримано величини радіусу обрізання a_{cut} та критичної відстані, при якій настає розрив міжатомного зв'язку, b . Вказано напрямок подальшої роботи.

Література

1. Ніцин О.Ю. Приведення рівняння пружної деформації нитки до системи нелінійних рівнянь / О.Ю. Ніцин // Прикладна геометрія та графіка/Праці Таврійського ДАТУ - Мел.: 2011 - т. 50, вип. 4 - с. 77-82
2. Ніцин О.Ю. Використання методу часток в геометричному моделюванні поверхні після деформації / О.Ю. Ніцин, О.В. Охотська, О.Є. Мацулевич // Прикладна геометрія та графіка / Праці Таврійського ДАТУ - Мел.: 2011 - т. 51, вип. 4 - с. 209-214
3. А.М. Кривцов./ Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой.- М.: Физматлит, 2007. - 304 с.

**УЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ В
ГЕОМЕТРИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПОВЕРХНОСТИ
ПОСЛЕ ДЕФОРМАЦИИ**

Е. В. Охотская

В работе рассматриваются разновидности потенциалов взаимодействия частиц с целью определения наиболее практически применимого в расчетных работах

**ACCOUNT OF POTENTIAL OF CO-OPERATION OF PARTS IN
GEOMETRICAL DESIGN OF SURFACE AFTER DEFORMATION**

E. V. Ohotskaya

The varieties of potentials of co-operation of parts are in-process examined in a geometrical design with the purpose of determination most practical using in calculation works