



ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ ГРАНУЛИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Вероника Дмитриевна Чепеленкова¹, Вадим Викторович Лисица^{2,✉}

¹Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН,
630090, Новосибирск, просп. Акад. Коптюга, 3, Россия,
ChepelenkovaVD@ipgg.sbras.ru, <https://orcid.org/0009-0007-3442-9891>

²Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. Акад. Коптюга, 4, Россия,
LisitsaVV@ipgg.sbras.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3544-4878>

Аннотация. Приведено описание и программная реализация алгоритма численного моделирования одноосного нагружения пористых сред. Алгоритм основан на методе дискретных элементов со связями, в котором среда представляется в виде набора взаимодействующих частиц. Целью работы является систематическое исследование влияния входных параметров на прочностные характеристики получаемого материала. Приводится серия численных экспериментов для различных комбинаций касательной жесткости, длины связей и коэффициента трения частиц на микроуровне. На основании полученных диаграмм напряжения–деформации вычислены значения модуля Юнга и прочности тела на сжатие. Показано, что предельные нагрузки, выдерживаемые материалом, показывают линейный рост при увеличении длины связей и касательной жесткости и квадратичную зависимость при увеличении коэффициента трения. Для модуля Юнга показано наличие роста при увеличении всех варьируемых параметров, однако характер роста представляется невозможным установить при использованном в работе количестве статистических реализаций.

Ключевые слова: метод дискретных элементов, одноосное нагружение, гранулированные материалы

Финансирование: работа выполнена в рамках проекта ФНИ FWZZ-2022-0022 и при поддержке Российского научного фонда, грант № 21-71-20003.

Для цитирования: Чепеленкова В.Д., Лисица В.В. Численное моделирование разрушения гранулированных материалов методом дискретных элементов // Геофизические технологии. 2024. № 1. С. 92–104. doi:10.18303/2619-1563-2024-1-92.

DISCRETE ELEMENT BASED NUMERICAL SIMULATION OF GRANULAR MATERIAL FRACTURING

V.D. Chepelenkova¹, V.V. Lisitsa^{2,✉}

¹Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics, SB RAS, Koptug Ave., 3, Novosibirsk, 630090, Russia,
ChepelenkovaVD@ipgg.sbras.ru, <https://orcid.org/0009-0007-3442-9891>

²Sobolev Institute of Mathematics SB RAS, Koptug Ave., 4, Novosibirsk, 630090, Russia,
LisitsaVV@ipgg.sbras.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3544-4878>

Abstract. This paper provides a description and software implementation of an algorithm for numerical simulation of uniaxial loading of porous media. The algorithm is based on the method of bonded discrete elements, in which the environment is represented as a set of interacting particles. The purpose of this study is to systematically study the influence of input

parameters on the strength characteristics of the resulting material. A series of numerical experiments is presented for various combinations of tangential stiffness, bond length, and particle friction coefficient at the microlevel. Based on the obtained stress-strain curves, the values of Young's modulus and compressive strength of the body were calculated. It is shown that compressive strength of the material shows a linear increase with increasing bond length and tangential stiffness, and a quadratic dependence with increasing friction coefficient. Young's modulus tends to increase for all varied parameters. However, it seems impossible to establish any specific dependencies using the number of statistical realizations used in the work.

Keywords: discrete element method, uniaxial loading, granular materials

Funding: The study was carried out as part of government assignment to the Russian Academy of Sciences in basic research, Project FWZZ-2022-0022, and supported by the Russian Science Foundation, Project No. 21-71-20003.

For citation: Chepelenkova V.D., Lisitsa V.V. Discrete element based numerical simulation of granular material fracturing // Russian Journal of Geophysical Technologies. 2024. No. 1. P. 92–104. (In Russ.). doi:10.18303/2619-1563-2024-1-92.

ВВЕДЕНИЕ

Гранулированные пористые материалы широко используются в химической технологии как сорбенты CO_2 [Derevshikov et al., 2021] или катализаторы химических реакций [Fedorov, Gulyaeva, 2019]. Эффективность хемосорбционной или каталитической способности таких материалов в основном определяется геометрией порового пространства. Однако чем выше пористость материала, тем ниже его прочностные механические свойства. При этом прочность материала может быть важным свойством катализатора или сорбента, позволяющим использовать его, например, в условиях высокого давления, быстрого изменения давления и температуры и пр. Проектирование гранулированных пористых материалов должно включать не только оптимизацию геометрии порового пространства, но и оценку модуля Юнга и критического напряжения, которое выдерживает материал до разрушения.

В настоящее время проектирование материалов, в основном, выполняется с помощью численного моделирования. В частности, моделируется технологический процесс спекания [Bordia et al., 2017] с последующей оценкой пористости, удельной поверхности порового пространства, проницаемости и т. д. Тем не менее, наблюдается недостаток исследований, посвященных непосредственному изучению механических свойств получаемого материала, несмотря на то что численные методы для подобных исследований широко известны.

Одним из наиболее часто используемых подходов к моделированию механического нагружения сложных конструкций является метод конечных элементов [Guiron et al., 2003], позволяющий работать в области больших деформаций и нарушений сплошности. Однако его реализация подразумевает этап точного построения сетки, требующий много времени и ресурсов, особенно при рассмотрении случайно упакованных зернистых пористых материалов.

В отличие от метода конечных элементов, метод дискретных элементов (DEM) не требует построения сетки, и является более эффективным подходом применительно к гранулированным пористым материалам, поскольку гранулы могут быть естественным образом представлены элементами. Механические свойства гранул, в том числе объемный модуль, модуль сдвига и т. д., необходимые для работы метода, заранее известны. С использованием этих свойств необходимо разработать подходящую модель попарных взаимодействий частиц для соответствия макроскопическим свойствам моделируемого материала.

В данной работе представлена модель, полученная на основе метода дискретных элементов со связями. На программном уровне спекание частиц задается в виде наличия нормальных и тангенциальных связей, инициализирующихся после упаковки и обеспечивающих сопротивление деформациям. Разрыв связи между парой частиц на макроуровне рассматривается как формирование трещины.

Для калибровки модели была проведена серия численных экспериментов при варьируемых входных параметрах, построены диаграммы напряжения–деформаций образцов, на основании которых приведены оценки влияния микропараметров на модуль Юнга и прочность образца на сжатие.

ОПИСАНИЕ МЕТОДА

В основе метода дискретных элементов лежит представление моделируемого объекта в виде набора частиц с заранее заданными свойствами. Поведение всей системы определяется взаимодействиями между частицами в точках контакта, обеспечивающимися набором сил, включающим в себя силу упругого взаимодействия, силы статического и динамического трения, внешние силы и пр.

Моделирование с использованием DEM подразумевает наличие следующих предположений:

- каждая частица является твердым телом сферической формы, имеющим конечные размеры и массу, и обладающим заданным набором упругих характеристик;
- размеры частиц являются случайными величинами с равномерным распределением в заданном диапазоне;
- взаимодействия между частицами происходят в рамках классической механики;
- частицы могут пересекаться, при этом характерный размер области пересечения много меньше радиусов частиц;
- распространение упругих волн за один шаг по времени возможно не дальше, чем на расстояние, равное минимальному из диаметров частиц.

В данной работе для моделирования поведения упругих сред применяется подход, позволяющий представить материал в виде частиц, связанных пружинами заданной жесткости. Разрыв связей происходит в результате превышения установленных значений напряжений и интерпретируется как нарушение сплошности среды в точке контакта пары рассматриваемых частиц.

Движение в поле тяжести $\vec{g}$ частицы радиуса R_i и массы m_i , находящейся в точке пространства $\vec{r}_i$ и имеющей скорость $\vec{v}_i$, происходит по закону

$$\begin{aligned} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} &= m_i \vec{g} + \vec{f}_i - \gamma \vec{v}_i \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} &= \vec{v}_i \end{aligned} \quad (1)$$

где $\vec{f}_{ij}$ – сила, действующая на i -ую частицу со стороны j -ой, γ – коэффициент вязкости, добавленный в систему искусственно для диссипации энергии.

Для частиц i и j определим вектор нормали к плоскости контакта как $\vec{n}_{ij} = (\vec{r}_i - \vec{r}_j) / \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$.

В таком случае силу $\vec{f}_{ij}$, действующую на i -ую частицу со стороны j -ой можно разложить на нормальную

и тангенциальную составляющие относительно плоскости контакта (рис. 1) согласно формуле $\vec{f}_{ij} = f_{ij}^n \vec{n}_{ij} + f_{ij}^t \vec{t}_{ij}$, где $\vec{t}_{ij}$ – касательный вектор, выбор направления которого будет определен при задании величины $\vec{f}_{ij}$.

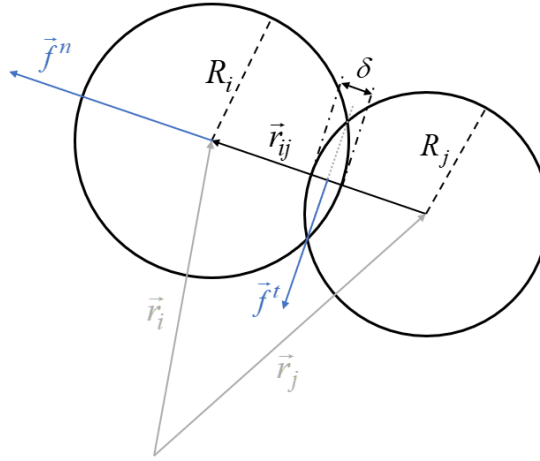


Рис. 1. Разложение силы взаимодействия частиц на нормальную и касательную компоненты.

Кроме того, для каждой пары частиц можно ввести величину δ , определяемую соотношением

$$\delta = R_i + R_j - \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|.$$

В случае, если $\delta \geq 0$, эта величина характеризует размер области пересечения между частицами. Для $\delta < 0$ величина $|\delta|$ определяет расстояние между частицами.

Рассмотрим далее набор сил, используемый в данной работе. Для упрощения записи индекс ij будет опущен, где это возможно.

Для двух частиц, имеющих ещё не разорванную связь, компонента f^n силы действует по правилу [Hardy et al., 2009]

$$f^n = \begin{cases} k_r^n \delta, & \delta > 0, \\ k_a^n \delta, & -d_{crit} \leq \delta \leq 0, \\ 0, & \delta < d_{crit} \end{cases}$$

где k_r^n – жесткость пружины, отвечающая за отталкивание частиц, k_a^n – жесткость пружины, препятствующей отталкиванию, d_{crit} – расстояние между частицами, называемое длиной связи, при превышении которого связь разрывается. Для частиц, не имеющих связи, полагается $d_{crit} = 0$.

Касательная составляющая f^t отвечает за возникающую между частицами силу трения и вычисляется итеративно. Согласно закону Кулона, связь между касательной и нормальной компонентами

силы имеет вид $f^t \leq \mu f^n$, где μ – коэффициент трения. Следовательно, сила f^t возникает между частицами только в случае $\delta \geq 0$ [Luding, 2008].

Определим $\vec{\xi}^{(n)}$ как вектор смещения частиц друг относительно друга в плоскости контакта, вычисляемый итеративно. В момент установления контакта между частицами его величина устанавливается равной нулю.

Затем, после вычисления силы на каждом шаге, смещение частиц обновляется согласно формуле

$$\vec{\xi}^{(n+1)} = \vec{\xi}^{(n)} + \tau \vec{v}^t,$$

где $\vec{v}^t$ – тангенциальная компонента относительной скорости частиц, τ – шаг по времени.

Стоит отметить, что плоскость контакта на n -ом шаге по времени могла быть повернута относительно предыдущего шага, поэтому вектор $\vec{\xi}^{(n)}$ должен быть повернут соответствующим образом. Это может быть сделано, например, с помощью преобразования

$$\begin{aligned}\vec{\xi}'^{(n)} &\leftarrow \vec{\xi}^{(n)} - \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{\xi}^{(n)}), \\ \vec{\xi}^{(n)} &\leftarrow \frac{\|\vec{\xi}^{(n)}\|}{\|\vec{\xi}'^{(n)}\|} \vec{\xi}'^{(n)}.\end{aligned}$$

После поворота вектора относительного смещения вычисляется тестовая сила $\vec{f}_0^t = -k^t \vec{\xi}^{(n)}$

с коэффициентом касательной жесткости k^t , соответствующая случаю статического трения. В таком случае для частиц со связью имеем

$$\vec{f}^t = \begin{cases} \vec{f}_0^t, & \|\vec{\xi}\| < d_{crit}, \\ \mu f^n \frac{\vec{f}_0^t}{\|\vec{f}_0^t\|}, & \|\vec{\xi}\| \geq d_{crit}, \end{cases}$$

причем при переходе трения в динамический режим связь разрушается, и далее частицы взаимодействуют с классическим кулоновским трением

$$\vec{f}^t = \begin{cases} \vec{f}_0^t, & f^t \leq \mu f^n, \\ \mu f^n \frac{\vec{f}_0^t}{\|\vec{f}_0^t\|}, & f^t > \mu f^n. \end{cases}$$

ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

Интегрирование уравнений (1) в работе производится с помощью схемы Верле в предположении, что итоговая сила не зависит в явном виде от времени

$$\begin{aligned}\vec{r}_i^{n+1} &= \vec{r}_i^n + \tau \vec{v}_i^n + \frac{\tau^2}{2} \frac{\vec{f}_i(\vec{r}^n, \vec{v}^n)}{m_i}, \\ \vec{v}_i^{n+\frac{1}{2}} &= \vec{v}_i^n + \frac{\tau}{2} \frac{\vec{f}_i(\vec{r}^n, \vec{v}^n)}{m_i}, \\ \vec{v}_i^{n+1} &= \vec{v}_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{2} \frac{\vec{f}_i(\vec{r}^{n+1}, \vec{v}^{n+\frac{1}{2}})}{m_i}.\end{aligned}\tag{2}$$

Согласно [Hardy et al., 2009] устойчивость схемы Верле определяется соотношением

$$\tau \leq 0.2 \frac{D_{min}}{v_p},\tag{3}$$

где v_p – скорость распространения p -волн в твердом теле, D_{min} – минимальный из диаметров частиц.

Неравенство (3) имеет смысл одного из основных предположений метода: возмущение, переданное частице, распространяется за один шаг по времени не далее, чем на 1/5 диаметра частиц.

С учетом условия $\delta \ll \min\{a_i, a_j\}$ взаимодействие пары частиц может быть рассмотрено как одномерный случай, тогда скорость распространения p -волн для тела с плотностью ρ и модулем Юнга

E дается формулой $v_p = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$.

ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

В течение всего времени моделирования частицы расположены в ограниченной прямоугольной области, что предотвращает возможность их бесконечного падения. Границы, образующие эту область, предполагаются жесткими и неподвижными. Это позволяет задавать их как набор частиц, последовательно расположенных вдоль прямых $x = \text{const}$ и $y = \text{const}$. Эти частицы рассматриваются как взаимодействующие с частицами материала, но, в силу их неподвижности, для них нет необходимости обновлять положения и скорости согласно (2).

Тем не менее, на этапе одноосного сжатия верхняя граница движется с постоянной скоростью $\dot{\varepsilon} = \text{const}$, поэтому в этом случае движение необходимо учитывать, обновляя положение частиц, формирующих границу, следующим образом: $\vec{r}^{n+1, \text{top}} = \vec{r}^{n, \text{top}} + \tau \dot{\varepsilon} \cdot \vec{n}^y$, $\vec{n}^y = [0, -1]^T$ соответствует направлению движения.

ПОИСК СОСЕДЕЙ

Реализация алгоритма, использующего метод дискретных элементов, подразумевает расчет всех попарных взаимодействий частиц, что требует $O(N^2)$ операций.

В целях оптимизации принято предполагать наличие у каждой частицы i некоторой области влияния J_i , определяющей количество $N_i = \text{card}(J_i) \ll N$ частиц, которые могут с ней взаимодействовать. В таком случае вычислительная сложность алгоритма может быть оценена как $O(N\langle N_i \rangle)$, где $\langle N_i \rangle$ – среднее количество соседей для частицы.

Для определения области влияния J_i используется метод, описанный в [Lisitsa et al., 2019].

Согласно ранее введенным соотношениям для сил взаимодействия, частицы могут повлиять друг на друга только будучи в непосредственном контакте, или при наличии между ними связи, что дает ограничение

$$\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| \leq R_i + R_j + d_{crit}.$$

То есть область влияния каждой частицы не превосходит расстояния $2R_{max} + d_{crit}$. Кроме того, смещение частиц за один шаг по времени предполагается величиной, много меньшей радиусов частиц.

Предположения выше позволяют построить прямоугольную сетку с шагом $h_1 = h_2 = h = 2R_{max} + d_{crit}$ и определить ячейки этой сетки как $C_{kl} = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid kh \leq x_1 \leq (k+1)h, lh \leq x_2 \leq (l+1)h\}$. Будем говорить, что частица i принадлежит ячейке C_{kl} , если центр этой частицы содержится в C_{kl} .

В силу выбора размеров сетки, соседи частицы, принадлежащей C_{kl} , могут принадлежать только C_{kl} или соседним с ней ячейкам $C_{k'l'}$, где $k' \in \{k+1, k, k-1\}$, $l' \in \{l+1, l, l-1\}$, что и определяет требуемую область влияния.

Таким образом, на подготовительном этапе работы алгоритма для каждой частицы определяется ячейка, которой она принадлежит, и для каждой ячейки задается список входящих в нее частиц.

В ходе работы алгоритма частица может переходить в другую ячейку, и, кроме того, может меняться список ее соседей, что влечет за собой необходимость обновления этих данных на каждом шаге по времени.

Стоит отметить, что первичное распределение частиц по ячейкам не может быть выполнено с использованием параллельных вычислений, т. к. в противном случае это привело бы к конфликтам типа data race, тогда как обновление этих данных в работе выполняется параллельно.

ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Во время работы алгоритма на основании вычисляемых средних напряжений в образце выполняется построение диаграммы напряжения–деформации. Модуль Юнга E может быть получен как угол наклона ее линейной части, а прочность тела σ_{max} на сжатие – как максимальное напряжение на графике. Далее приводится метод вычисления средних напряжений в образце, описанный в [Potyondy, Cundall, 2004].

Для любого тензора s_{ij} справедливо соотношение

$$s_{ij} = \delta_{ik} s_{kj} = \frac{\partial x_i}{\partial x_k} s_{kj} = \frac{\partial (x_i s_{kj})}{\partial x_k} - x_i \frac{\partial s_{kj}}{\partial x_k}.$$

С учетом этого среднее напряжение в объеме V^p может быть получено с помощью

$$\langle \sigma_{ij}^p \rangle = \frac{1}{V^p} \iiint_{V^p} \sigma_{ij}^p dV = \frac{1}{V^p} \iiint_{V^p} \left(\frac{\partial (x_i \sigma_{kj}^p)}{\partial x_k} - x_i \frac{\partial \sigma_{kj}^p}{\partial x_k} \right) dV.$$

С использованием теоремы Гаусса–Остроградского и в предположении, что частицы находятся в

состоянии равновесия, т. е. $\frac{\partial \sigma_{kj}^p}{\partial x_k} = 0$, может быть получено следующее равенство:

$$\langle \sigma_{ij}^p \rangle = \frac{1}{V^p} \iint_{\partial V^p} x_i \sigma_{kj}^p n_k dS = \frac{1}{V^p} \iint_{\partial V^p} x_i \sigma_j^p dS = \frac{1}{V^p} \iint_{\partial V^p} x_i dF_j^p,$$

где $\sigma_j^p = \sigma_{kj}^p n_k$ соответствует напряжению, действующему в направлении вектора n_k , являющегося внешней единичной нормалью к поверхности частицы.

В методе дискретных элементов силы попарного взаимодействия частиц возникают в точках их контактов, что дает возможность заменить интеграл выше на сумму по всем частицам, находящимся в непосредственном контакте с данной, т. е.

$$\langle \sigma_{ij}^p \rangle = \frac{1}{V^p} \sum_{q \in J_p} x_i^{c,pq} F_j^{pq},$$

где $x_i^{c,pq} = x_i^p - n_i^{pq} \left(R^p + \frac{\delta^{pq}}{2} \right)$ – точка контакта для частиц p и q .

Для обеспечения симметричности тензора напряжений выполняется замена

$$x_i^{c,pq} F_j^{pq} \rightarrow \frac{1}{2} (x_i^{c,pq} F_j^{pq} + x_j^{c,pq} F_i^{pq}).$$

Окончательно имеем суммарное среднее напряжение в объеме V , содержащем N частиц, вычисляемое как

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = - \frac{1}{2 \sum_{N} V^p} \sum_N \sum_{J_p} (x_i^{c,pq} F_j^{pq} + x_j^{c,pq} F_i^{pq}).$$

Для выделения линейной части диаграммы напряжения–деформации использовался следующий подход. Промежуток значений $[0, \sigma_{max}]$ сужался на четверть с каждой стороны, после чего для множества

$S = \{(\varepsilon, \sigma) \mid \frac{\sigma_{max}}{4} < \sigma(\varepsilon) < \frac{3\sigma_{max}}{4}\}$ методом наименьших квадратов осуществлялся поиск прямой, аппроксимирующей полученный набор данных.

Угол наклона этой прямой принимался равным модулю Юнга E , т. к. согласно определению

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon}.$$

ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

В работе представлены результаты численного моделирования процесса одноосного сжатия на образцах, содержащих N частиц каждый. Частицы представляют собой сферические тела, радиусы которых являются случайными величинами с равномерным распределением $U[R_{min}, R_{max}]$. Набор из N частиц располагается в прямоугольной области пространства с линейными размерами $w \times h$.

Среди входных параметров, влияющих на итоговые характеристики материала, можно выделить минимальный R_{min} и максимальный R_{max} радиусы частиц, жесткости пружин на растяжение k_r^n и на сжатие k_a^n , жесткость k^t пружины, расположенной в касательном направлении, длину связи d_{crit} и коэффициент трения μ . Согласно [Potyondy, Cundall, 2004] размеры частиц полагаются не оказывающими влияние на характеристики, исследуемые в данной работе.

Значения входных параметров, используемых при моделировании, приведены в табл. 1.

Таблица 1

Входные параметры

Характеристика	Значение	Характеристика	Значение
N	4000	$k^t, 10^9$ Н/м	$0.1 - 1 k_r^n$
R_{min} , м	10	d_{crit} , м	$0.01 - 0.07 R_{max}$
R_{max} , м	15	μ	$0.0 - 0.5$
ρ , кг/м ³	2630	$w \times h$, м	1260×2520
$k_r^n, 10^9$ Н/м	128	γ	0.7
$k_a^n, 10^9$ Н/м	128		

Для исследования влияния на модуль Юнга и предельные нагрузки материала величины d_{crit} , k^t , и μ были рассмотрены в диапазонах

$$d_{crit} \in \{0.01R_{max}, 0.03R_{max}, 0.05R_{max}, 0.07R_{max}\},$$

$$k^t \in \{0.1k^n, 0.3k^n, 0.5k^n, 0.7k^n, k^n\},$$

$$\mu \in \{0, 0.1, 0.3, 0.5\}.$$

Для всех возможных комбинаций параметров было сгенерировано по пять образцов с различными статистическими реализациями радиусов частиц, для каждого из которых в результате работы алгоритма была получена диаграмма напряжения–деформации. Всего в работе было проведено 400 численных экспериментов. Вид образца на различных этапах нагружения приведен на рис. 2.

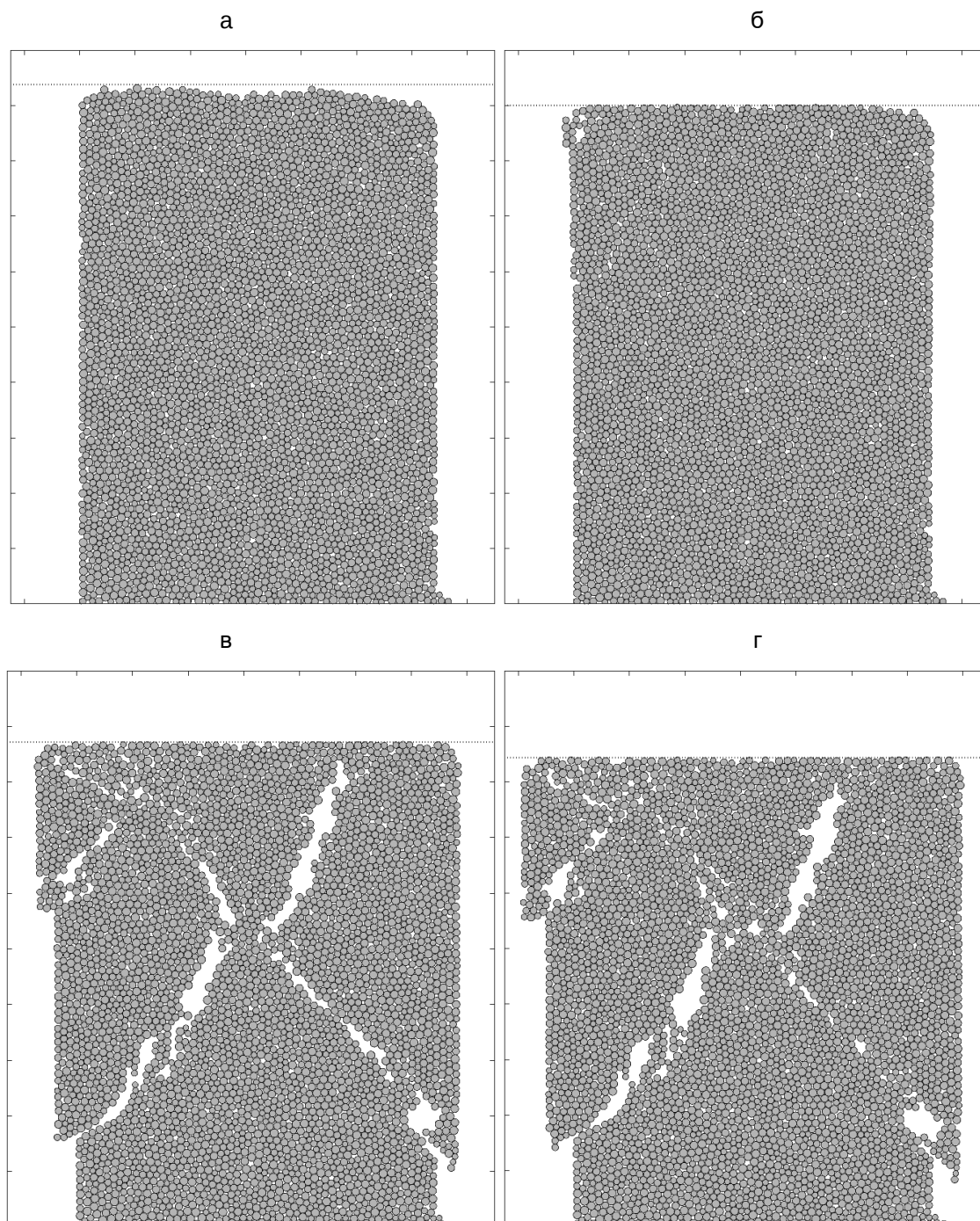


Рис. 2. Образец с параметрами $k^t = k^n$, $d_{crit} = 0.05R_{max}$, $\mu = 0.1$ и (а) $\varepsilon = 0$, (б) $\varepsilon = 0.04$, (в) $\varepsilon = 0.07$, (г) $\varepsilon = 0.1$.

Диаграммы, полученные для двух фиксированных параметров при варьируемом третьем, приведены на рис. 3. Тонкими линиями на графиках обозначены диаграммы, полученные для каждой

конкретной статистической реализации, жирными – усредненные значения напряжений. Точки соответствуют средним предельным нагрузкам.

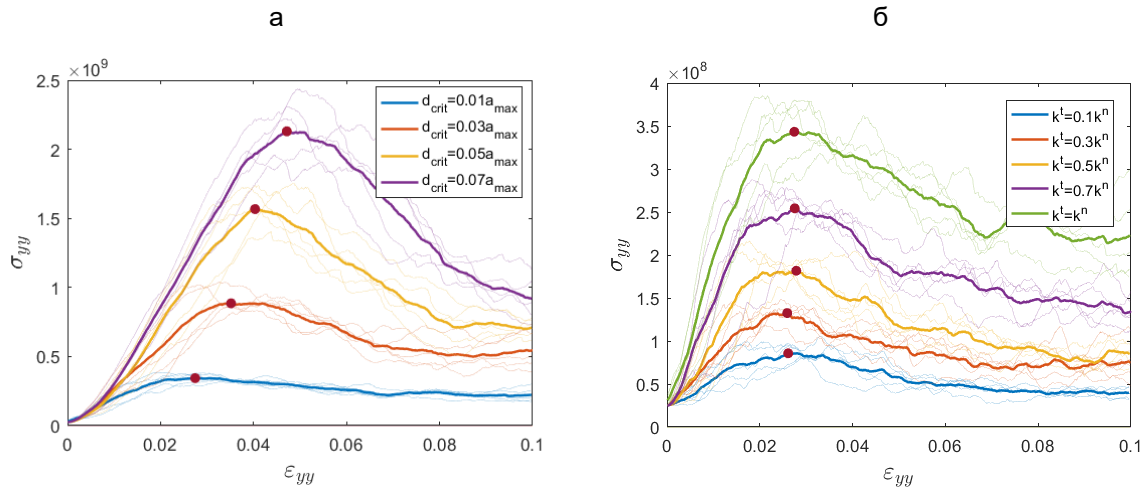


Рис. 3. Диаграммы напряжения–деформации для различных наборов параметров. Для (а) зафиксированы $\mu = 0.1$, $k^t = k^n$; для (б) – $d_{crit} = 0.01R_{max}$, $\mu = 0.1$. Точками обозначены предельные нагрузки материала.

В каждом случае наблюдается рост как угла наклона линейной части, так и максимального значения напряжения, что соответствует росту модуля Юнга и прочности тела на сжатие с ростом варьируемого параметра.

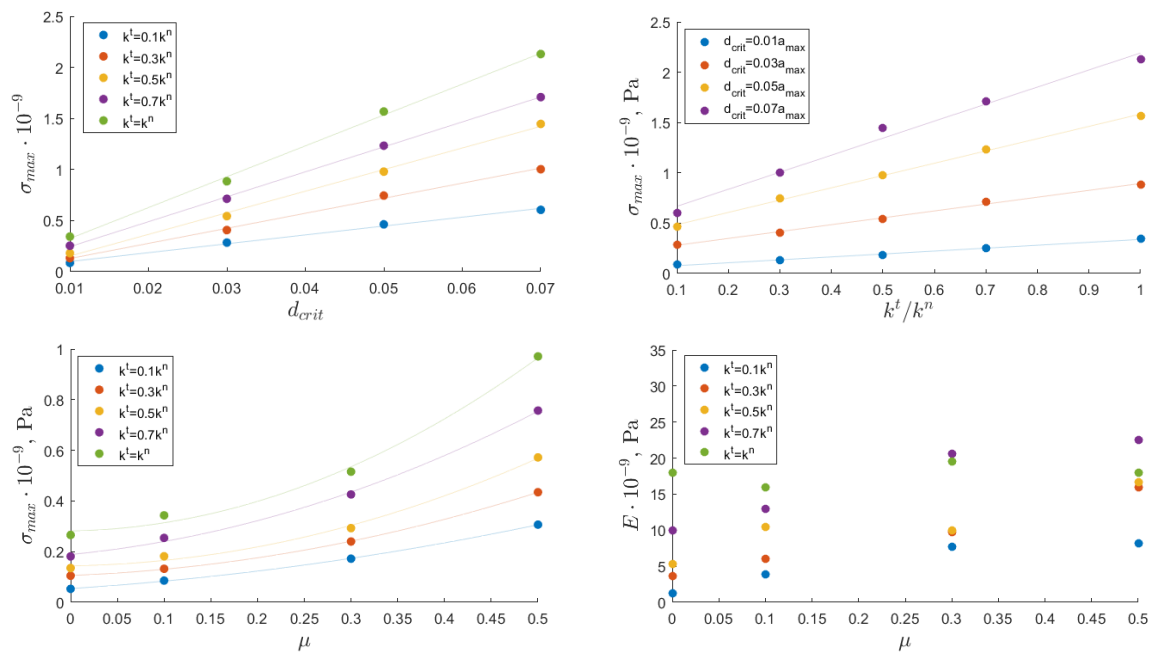


Рис. 4. Влияние различных параметров на прочность материала и модуль Юнга.

Построение количественной оценки отношения между входными и выходными параметрами проводилось с использованием полиномиальной регрессии. Показано, что прочность тела линейно зависит от длины связей и касательной жесткости, тогда как зависимость от касательной жесткости соответствует квадратичной функции (рис. 4). Несмотря на малое число реализаций для каждой комбинации параметров, можно отметить, что предельное напряжение показывает устойчивую

зависимость от входных параметров с ошибкой в 4.83 %. Однако оценки для модуля Юнга менее стабильны и, вероятно, требуют большего количества численных экспериментов для построения подходящей регрессии, описывающей его зависимость от входных данных. Тем не менее, качественно можно также отметить рост значений модуля Юнга с ростом варьируемых параметров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложена реализация метода дискретных элементов для моделирования поведения упругих сред в тесте на одноосное сжатие. Используемый алгоритм был реализован с учетом работы на графических ускорителях с применением CUDA SDK. Численные эксперименты проводились с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютера «Политехник – РСК Торнадо».

Особенности реализации метода предполагают наличие связей между парами частиц, разрыв которых влечет за собой формирование трещин и последующее разрушение материала.

Для исследования зависимости модуля Юнга и прочности моделируемого материала на сжатие была проведена серия численных экспериментов для 80 различных комбинаций величин d_{crit} , k^t , μ и пяти статистических реализаций частиц в каждой из комбинаций.

Было показано, что прочность тела линейно зависит от длины связей и касательной жесткости, а зависимость от коэффициента трения задается полиномом второй степени. Для модуля Юнга качественно наблюдается рост при увеличении варьируемых параметров, однако, использованная в работе выборка наборов частиц не позволяет определить характер роста и сделать статистически достоверные количественные оценки.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ / REFERENCES

- Bordia R.K., Kang S.J.L., Olevsky E.A.** Current understanding and future research directions at the onset of the next century of sintering science and technology // *Journal of the American Ceramic Society*. 2017. Vol. 100 (6). P. 2314–2352. doi:10.1111/jace.14919.
- Derevschikov V.S., Kazakova E.D., Yatsenko D.A., Veselovskaya J.V.** Multiscale study of carbon dioxide chemisorption in the plug flow adsorber of the anesthesia machine // *Separation Science and Technology*. 2021. Vol. 56 (3). P. 485–497. doi:10.1080/01496395.2020.1723029.
- Fedorov A.V., Gulyaeva Y.K.** Strength statistics for porous alumina // *Powder Technology*. 2019. Vol. 343. P. 783–791. doi:10.1016/j.powtec.2018.11.098.
- Hardy S., McClay K., Muñoz J.A.** Deformation and fault activity in space and time in high-resolution numerical models of doubly vergent thrust wedges // *Marine and Petroleum Geology*. 2009. Vol. 26 (2). P. 232–248. doi:10.1016/j.marpetgeo.2007.12.003.
- Guiron M.L.E., Sassi W., Leroy Y.M., Gauthier B.D.M.** Mechanical constraints on the chronology of fracture activation in folded Devonian sandstone of the western Moroccan Anti-Atlas // *Journal of Structural Geology*. 2003. Vol. 25 (8). P. 1317–1330. doi:10.1016/S0191-8141(02)00155-4
- Lisitsa V., Kolyukhin D., Tcheverda V., Volianskaia V., Priimenko V.** GPU-based discrete element modeling of geological faults // *Supercomputing. 5th Russian Supercomputing Days. Revised Selected papers*. Springer, Cham, 2019. P. 225–236.

Luding S. Introduction to discrete element methods: basic of contact force models and how to perform the micro-macro transition to continuum theory // *European Journal of Environmental and Civil Engineering*. 2008. Vol. 12. (7–8). P. 785–826. doi:10.1080/19648189.2008.9693050.

Potyondy D.O., Cundall P.A. A bonded-particle model for rock // *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*. 2004. Vol. 41 (8). P. 1329–1364. doi:10.1016/j.ijrmms.2004.09.011.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

ЧЕПЕЛЕНКОВА Вероника Дмитриевна – инженер лаборатории вычислительной физики горных пород Института нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН. Основные научные интересы: вычислительная механика, численное моделирование физических процессов в пористых и гранулированных средах.

ЛИСИЦА Вадим Викторович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института математики СО РАН. Основные научные интересы: численные методы для моделирования физических процессов в пористых средах.

*Статья поступила в редакцию 21 декабря 2023 г.,
одобрена после рецензирования 25 декабря 2023 г.,
принята к публикации 26 декабря 2023 г.*