



РАЧУНСКА МЕХАНИКА  
ПРЕКИДНИХ СРЕДИНА  
ОСНОВЕ И ПРИМЕНА У ФРАГМЕНТАЦИЈИ

С. МАСТИЛОВИЋ

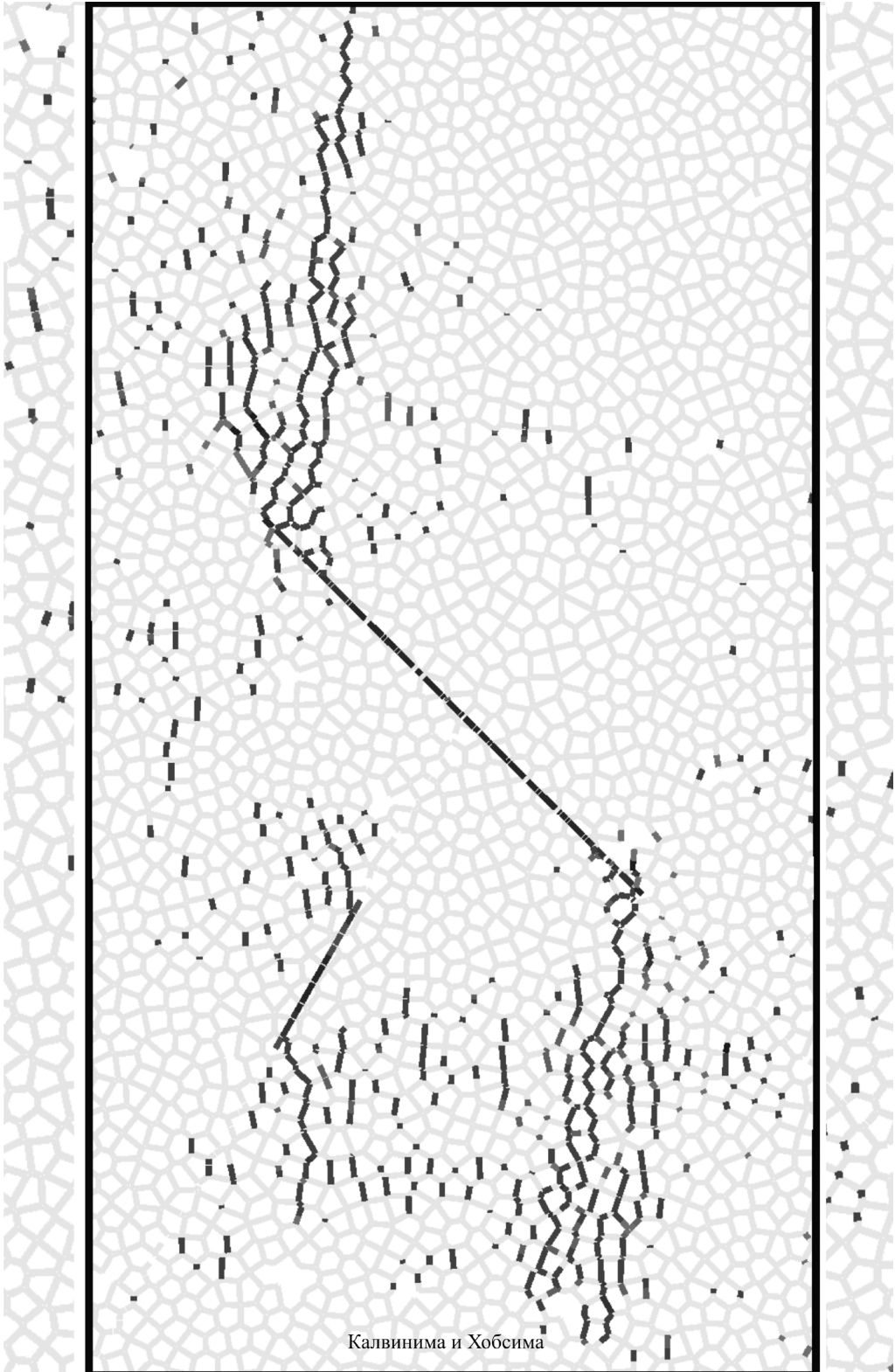


Институт за мултидисциплинарна истраживања  
Универзитет у Београду

*Рачунска механика прекидних средина*

*Основе и примена у фрагментацији*

MMXIX



# **Рачунска механика прекидних средина**

## **Основе и примена у фрагментацији**

**Сретен Мاستиловић**

Институт за мултидисциплинарна истраживања  
Универзитет у Београду

Др Сретен Мاستиловић, дипл. инж. маш.

## Рачунска механика прекидних средина: основе и примена у фрагментацији

### *Рецензенти:*

Проф. др Милан Мићуновић, Машински факултет, Универзитет у Крагујевцу  
Др Слободанка Бољановић, Математички институт САНУ  
Проф. др Предраг Елек, Машински факултет, Универзитет у Београду

### *Издаје:*

Институт за мултидисциплинарна истраживања, Универзитет у Београду  
Кнеза Вишеслава 1, 11030 Београд, Србија

### *За издавача:*

Др Соња Вељовић-Јовановић

### *Лектура и коректура:*

Јасна Додер, професор српског језика и књижевности  
Драгана Мاستиловић

### *Техничка подршка:*

Вељко Лаврнић

### *Штампа и повез:*

Мрак штампа, Београд

### *Илустрација на претходном листу:*

Симулација са UDEC 7.00, Itasca Consulting Group, Inc.

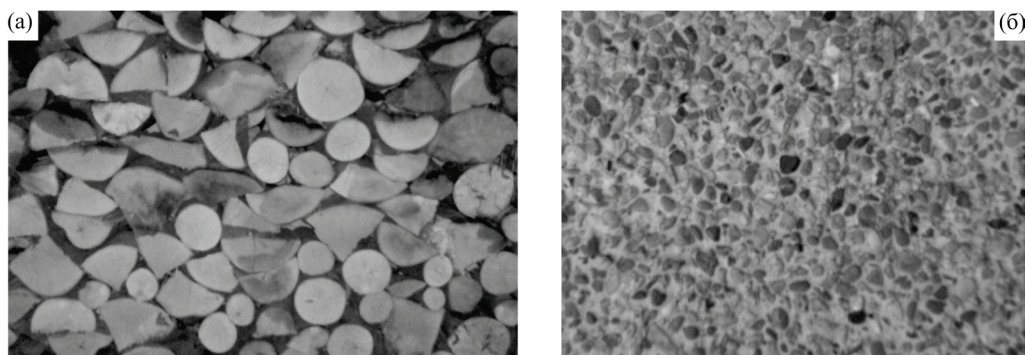
*Тираж:* 200

ISBN 978-86-80109-21-3

Београд • 2019

## Предговор

Главну почетну мотивацију за настанак и динамични развој рачунске механике прекидних средина представљала је потреба моделирања деформације, лома и распада квази-кртих материјала са прекидном и/или хетерогеном структуром и инфериорном (чак непостојећом) затезном чврстоћом (слика А). Током дугог низа година, многи истраживачи су покушавали да моделирају ове материјале коришћењем класичних метода механике континуума, али са ограниченим успехом. Један од главних разлога за уочену „неухватљивост” је да је понашање хетерогених материјала суштински дефинисано њиховим хетерогеним карактером, који утиче на локализацију деформације и оштећења, и процесе зачећа, раста и срастања прслина. Ове појаве су нераскидиво повезане са дисконтинуитетом померања који јасно крши хипотезу континуума. Наведене потешкоће довеле су до настанка рачунске механике прекидних средина чије су основне методе предмет ове монографије. Ове методе, како им само име каже, ослањају се на дисконтинуирану (прекидну) апроксимацију поља променљиве у рачунском домену.



**Слика А.** (а) Некохезивни систем са прекидном структуром и контактним међудејствима. Изводима по правцима недостаје физички смисао који имају у механици континуума. (б) Пример материјала, чији је примарни начин мезоструктурног лома раскидање међуповрши (интерфејса) слабије чврстоће. Стохастичност је својствена оваквим материјалима јер су локалне флукуације енергетских баријера суштинске карактеристике њихове структуре.

Током протеклих неколико деценија модели рачунске механике прекидних средина изборили су се за своје место међу алатима у структурној анализи и дизајну у много ширем опсегу материјалних система. Коначно, у данашње време, постали су комплементарни са моделима механике континуума и експерименталним истраживањима захваљујући својој способности да побољшају наше елементарно разумевање процеса лома и његових последица на макроскопска својства материјала која имају најширу примену у инжењерској пракси.

Ова монографија је израсла из моје претходне студије (Mastilovic, 2008b) и два поглавља приређена за Шпрингеров “Приручник механике оштећења” са др Антониом Риналдијем (Rinaldi and Mastilovic, 2015; Mastilovic and Rinaldi, 2015). Концепт јој је донекле неуобичајен јер укључује сажете приказе великог броја радова. Након уводних разматрања, изложен је језгровит преглед темељних поставки традиционалних метода рачунске механике прекидних средина које укључују: молекуларну динамику (МД) (поглавље 2), методе решетке (поглавље 3), методе дискретних елемената (ДЕМ) (поглавље 4), и честичне методе (поглавље 5). Илустрован је историјски развој метода, кроз уочавање и решавања изабраних типичних проблема приказаних у монографији кроз збирку описа радова у разноврсним областима који су у највећој мери утицали на самог аутора у његовом развоју у наведеним областима. Избор самих радова као и истицање одређених научних доприноса су субјективни у оној мери у којој одсликавају информисаност и интересовања аутора. Не може бити пренаглашено да избор радова издвојених у монографији не претендује на потпуну репрезентативност у ширем смислу. Многи истраживачи који су оставили дубок траг у доменима разних тема које су дотакнуте у овој монографији, нису поменути или нису добили простор који заслужују; неки — пре свих сам аутор — су добили више простора него што им објективно припада. Што се садржаја тиче, акценат је био на горе наведеним *традиционалним*, основним методама рачунске механике прекидних средина. Мада се ове методе сада широко користе за моделирање различитих класа материјала, чини се да су најприродније примене за симулације деформисања, оштећења и лома материјала који имају исту топологију као репрезентујућа структура модела. Модерне, напредне примене заговарају приступ моделирању где се, у мери у којој је то могуће, инсистира на непосредној кореспонденцији између експериментално утврђене структуре материјала и структуре коју експлицитно представља нумерички модел. Утирању овога пута допринело је коришћење експерименталних техника попут рентгенске микротомографије, тродимензионалних (3Д) „имицинг” техника високе резолуције, и сл., у спрези са моделима рачунске механике прекидних средина који имитирају физичку

структуру и *процесе*. Овде приказане методе имају за циљ да истакну тај тренд експлицитног представљања физичких механизма као средства за развој општих могућности за моделирање у различитим инжењерским гранама.

Између осталог и због тога, у монографију нису уврштене безмрежне методе којима, по много чему, вероватно припада место у оваквом тематском прегледу поготово када је реч о хидродинамици изглађених честица (“SPH – smoothed particle hydrodynamics”). Ово је учињено превасходно из два разлога који издвајају безмрежне од овде приказаних метода: (i) нису засноване на моделирању физичке структуре материјалног система коришћењем елементарних градивних објеката на некој од под-макроскопских скала, (ii) аутор ове монографије, изузимајући академско знање, нема непосредног радног искуства ни у развијању ни у коришћењу безмрежних метода. Сходно томе, хидродинамика изглађених честица која је настала из потребе моделирања, између осталог, фрагментације на космичкој скали (Monahan, 1988) а и дан-данас се користи за симулирање процеса фрагментације (нпр., Myagkov, 2017; Liu et al., 2018) није укључена у ову монографију јер у суштини представља безмрежну методу механике континуума. Такође, неће бити речи ни о спрегнутим методама које комбинују традиционалне рачунске методе механике прекидних средина и механике континуума (типично, метода коначних елемената (МКЕ, FEM): “MD-FEM, DEM-FEM, Particle FEM,...”), или методама материјалне тачке (“material point method, finite pointset method”). Преглед хибридних метода које премошћавају просторне скале доступан је у (Munjiza, 2004; Fish, 2009; Marenic et al., 2012).

За типичну област примене, у којој методе рачунске механике прекидних средина долазе до пуног изражаја, одабрана је динамичка фрагментација чврстих материјала. Нагли механички распад чврстог материјала је широко распрострањен процес који је својствен многим природним појавама и индустријским технологијама. Широко опсег мерења распада, почев од тешких атомских језгара до астероида, открива постојање упадљиве универзалности појаве фрагментација. Појава је неповратна, нелинеарна, и неравнотежна и изразито тешка за испитивање коришћењем традиционалних аналитичких метода (нпр., Krajcinovic, 1996; Wu et al., 2014a). Штавише, основни концепти механике континуума (као што су, нпр., напон, релативна деформација, чак и температура) су у најбољем случају условно примењиви. Динамички лом и фрагментација су појаве суштински везане за широке опсеге временских и просторних скала. Типични процес динамичке фрагментације представља



катастрофалну, акролошку<sup>1</sup> појаву коју одликују екстремно велики градијенти параметара стања а обухвата инерцијалне ефекте, ударне таласе, лом, пренос масе, и фазне прелазе који се одвијају у неколико микросекунди. Стратегија изложена у овој монографији заснована је на коришћењу симулација рачунске механике прекидних средина у циљу стицања увида у микромеханику деформације и еволуције оштећења и изналажење особина материјала и параметара модела кључних за рационално аналитичко моделирање. Овај приступ по правилу обухвата истраживање универзалних трендова којима градијенти промене стања и стохастичност (у мноштву појавних облика на различитим просторним под-нивоима) утичу на динамички одзив идеализованог материјала на макроскали. Основни принципи динамичке фрагментације су деценијама темељно истраживани, и експериментално и теоријски. Прегледи обимне литературе су доступи, између осталих, у референцама (Meyers, 1994; Grady, 2006; Elek and Jaramaz, 2009; Ramesh et al., 2015). Механизми, теорије и модели динамичког лома и фрагментације су одскора прегледно приказани у (Åström, 2006; Zhang and Ravi-Chandar, 2009; Ramesh et al., 2015). Свестрано разматрања теорије фрагментације, историјског развоја и одговарајуће литературе су ван оквира ове студије. Сходно томе, биће наведено само неколико незаобилазних радова почевши од пионирског рада Линеа (Lineau, 1936) о насумичној геометријској фрагментацији који је послужио као почетна инспирација за Мотову класичну студију (Mott, 1947) чији су транскрипти од недавно доступни у референци (Grady, 2006). Грејди је, заједно са својим сарадницима, најзаслужнији за развој теорије фрагментације са механичке (Grady and Kipp, 1980, 1985) и енергетске (Grady, 1982; Grady and Winfree, 2001) тачке гледишта чији је фокус углавном био на предвиђању просечне величине фрагмента и неким истакнутим статистичким питањима расподеле њихових величине. Расподеле Мота и Линфута (Mott and Linfoot, 1943) и Грејдија и Кипа (Grady and Kipp, 1985; Grady, 2006) су широко коришћене за процесе динамичке фрагментације код којих постоји карактеристична дужинска или масена скала. Међутим, многи истраживачи (нпр., Oddershede et al., 1993; Åström, 2006; Levy et al., 2010) су опазили да је расподела фрагмената боље представљена степеном него експоненцијалном функцијом, нарочито у случају кртих материјала; што ће се видети и из радова представљених у овој монографији. Због горе поменутих тешкоћа, нераздвојиво повезаних са аналитичким приступом решавању проблема фрагментације, разне рачунске технике су — уз незаобилазне експерименталне методе — рано нашле примену у истраживањима, а све у циљу стицања што детаљнијег увида у суштинске

---

<sup>1</sup> Акрологија (Akrology) је грана науке о материјалима која се бави физиком материјала у условима екстремних оптерећења.

карактеристике појаве. Почело се са МД, коју су Холиан и Грејди (Holian and Grady, 1988) користили за симулирање фрагментације при хомогеном, адијабатском ширењу кондензоване материје („микроскопски велики прасак“). Овај рад је био веома утицајан на даљи истраживачки развој те је, од тада па до данашњих дана, МД непрекидно коришћена за изучавање фрагментације као што ће се видети из малог избора радова приказаних и у овој монографији. Уз МД, примери рачунских метода које су „положиле тест времена“ па још увек налазе примену у симулацијама динамичког лома и фрагментације укључују методе решетке (Riera et al., 2014; Rodrigues et al., 2016; Iturrioz, 2018), ДЕМ (Wittel et al., 2008; Iturrioz et al., 2009; Timar et al., 2010, 2012; Paluszny et al., 2014), честичне методе (Baker and Warner, 2012; Kumar and Ghosh, 2015), МКЕ (Schubert et al., 2005; Levy and Molinari, 2010; Ugrcic, 2013; Paluszny et al., 2016), безмрежне методе (Wu et al., 2014b; Li et al., 2015; Myagkov, 2017).

Динамичко оптерећење покреће сложену каскаду оперативних механизма деформације и оштећења са различитим карактеристичним праговима зачећа и временским скалама трајања (Boigne, 2011). Динамички одзив материјала настаје интеграцијом ових оперативних механизма и одликују га екстремно велики градијенти и муњевито повећање напона и температуре, који доводе до секвенцијалног лома који кулминира појавом високоенергетских фрагмената. Уочљиво је да овако настали фрагменти садрже акумулирана оштећења (тј., непотпуно развијене унутрашње пукотине или шупљине) која даље еволуирају, што — у зависности од расположивости „заробљене“ кинетичке енергије и времена — доводи до наставка процеса распада дуго након престанка деловања првобитног динамичког оптерећења (ударног контакта, експлозије) све до асимптотског приближавања стационарној расподели фрагмената. Овај фасцинантни процес предмет је интересовања и мотивација за коришћење рачунских метода прекидних средина сажетих у овој монографији.

Широк опсег тема које су, уз динамичку фрагментацију, представљене у овој монографији илустрјује потенцијал рачунске механике прекидних средина као ефикасног алата за структурну анализу и дизајн. Ове методе су заживеле као одржив, алтернативни приступ; комплементаран са традиционалним методама механике континуума и експерименталне анализе. Овај сажети преглед је усредсређен на садржаје, аспекте, и примере који се, са нужно субјективне тачке гледишта, чине и актуелним и суштинским. Фасцинантне области и методе које су изостављене укључују неке садржаје који би, макар оправдања ради, могли да буду класификовани као напредни мада су, добрим делом, ушли у главне токове и комерцијалне програмске пакете. Расположивост литературе и комерцијалних програма можда чини упитним осврт на неке техничке садржаје елементарног

нивоа. Међутим, с једне стране, сврха ове монографије и јесте увођење и усмеравање на самосталан рад, а са друге, инжењерска пракса нас свакодневно уверава у важност разумевања онога што се дешава „под хаубом”.

Захваљујем се колегама широм света који су својим несебичним ангажовањем и стрпљењем помогли у обликовању ове монографује. Захваљујем се рецензентима на труду и прилежности. Захваљујем се проф. Јасни Додер на драгоцену лектуру и коректуру текста. На крају, захваљујем се Министарству просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије на суфинансирању издавања овога дела.

## Садржај

Предговор .....	v
Напомене о нотацији .....	xiii
Поглавље 1    Увод .....	1
1.1    Еластичне особине 2Д система .....	7
Поглавље 2    Молекуларна динамика .....	10
2.1    Емпиријски потенцијали .....	17
2.1.1    Скраћивање домета потенцијала .....	24
2.2    Израчунавање макропараметара стања система .....	26
2.2.1    Напон, релативна деформација и ефективна чврстоћа ..	26
2.2.2    Температура .....	28
2.2.2.1    Термичка иницијализација система на жељену почетну температуру .....	34
2.3    Симулациона ћелија у молекуларној динамици .....	35
2.4    Термостатичка Нозе-Хуверова МД .....	38
2.5    Предности и недостаци традиционалне МД .....	40
2.6    Примена МД на проблеме фрагментације .....	43
Поглавље 3    Методе решетки .....	81
3.1    Решетке са централним међудејствима ( $\alpha$ модели) .....	82
3.1.1    Троугаона решетка са централним међудејствима .....	84
3.1.1.1    Троугаона решетка са централним међудејствима између првих и других суседа .....	86
3.1.2    Квадратна решетка са централним међудејствима .....	87
3.1.3    Хронологија развоја и примери примене метода решетки са централним међудејствима .....	88
3.2    Решетке са централно-угаоним међудејствима ( $\alpha$ - $\beta$ модели) ..	106
3.2.1    Троугаона решетка са централно-угаоним међудејствима .....	106

3.2.2	Квадратна решетка са централно-угаоним међудејствима .....	109
3.2.3	Хронологија развоја и примери примене метода решетки са централно-угаоним међудејствима .....	110
3.3	Решетке са гредним међудејствима .....	114
3.3.1	Троугаона Бернули-Ојлерова гредна решетка .....	115
3.3.2	Квадратна Бернули-Ојлерова гредна решетка .....	118
3.3.3	Троугаона Тимошенкова гредна решетка .....	118
3.3.4	Процедура рачунарске имплементације за гредне решетки .....	120
3.3.5	Хронологија развоја и примери примене метода гредних решетки .....	122
3.4	Примена решеткастих модела на проблеме фрагментације .....	138
Поглавље 4	Методe дискретних елемената .....	142
4.1	Имплементација ДЕМ на некохезивне материјале .....	147
4.1.1	ДЕМ клизајући (слип) модел са трењем котрљања .....	149
4.1.2	Примена ДЕМ на растресите грануларне материјале .....	154
4.1.2	Примена ДЕМ на кохезивно тло .....	157
4.2	Имплементација ДЕМ на кохезивне материјале .....	161
4.2.1	Примена ДЕМ на стене .....	163
4.2.2	Примена ДЕМ на бетон .....	180
4.3	Примена ДЕМ модела на проблеме фрагментације .....	183
Поглавље 5	Честичне методе .....	216
5.1	Примери примене честичних модела .....	221
5.2	Примена честичних модела на проблеме фрагментације .....	240
Поговор	.....	257
Референце	.....	261
Регистри	.....	279

## Напомене о нотацији и списак ознака

У овоме сажетку се дефинише нотација која се понавља у целој монографији. Символи који се користе само локално, у појединим деловима текста, дефинисани су у самом тексту приликом прве употребе.

Скаларне величине означене су обичним, а тензорске масним, словима.

Доњи индекси са малим словима абецедне ( $i, j, k$ ) резервисани су за означавање честица материјалног система или чворова мреже док доњи индекси са малим словима грчког алфабета ( $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ ) означавају компоненте вектора и тензора. На пример,  $r_i$  је вектор положаја честице  $i$  чије су компоненте  $(r_i)_\alpha$ , где индекс  $\alpha$ , у тродимензионалом простору, узима вредности (1, 2, 3) или  $(x, y, z)$  у Декартовом правоуглом координатном систему. Температура у просторном домену центрираном око чвора  $i$  означава се са  $T_i$ , док у истој тачки тензор еластичности  $C_i$  има компоненте  $(C_i)_{\alpha\beta\gamma\delta}$  ( $\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, 2, 3$ ). Коначно, ознака  $f_{ij}$  се односи на силу између честица  $i$  и  $j$  са компонентама  $(f_{ij})_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ).

Горњи индекси у малој загради користе се за нумерисање греда у мрежи (b) или за означавање физичких величина у дводимензионалним проблемима (2D) које одговарају раванском стању напона ( $\sigma$ ), односно, раванском стању деформација ( $\epsilon$ ). Горњи индекси  $n$  и  $t$  коришћени без заграда означавају, редом, нормалне и тангенцијалне компоненте различитих физичких величина у међучестичним контактима. Видети, као илустрацију за ову нотацију, слику 4.2 и изразе (4.6–4.8). Често коришћени индекси означавају и следеће вредности: max – највећу, cr – критичну, fin – крајњу (коначну); као и оне које се односе на лом ( $f$ ), фрагментацију (F), и врх криве напон–релативна деформација (m).

Усваја се конвенција о сабирању по којој у Декартовим координатама понављање индекса са малим словима *грчког алфабета* подразумева понављање сумирања са свим вредностима које индекс може да узима. Нпр.,  $a_\alpha = C_{\alpha\beta} b_\beta = C_{\alpha 1} b_1 + C_{\alpha 2} b_2 + C_{\alpha 3} b_3$  или  $\sigma_{\alpha\alpha} = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}$ . (Понављање индекса са словима абецедне никада не подразумева сумирање по овој конвенцији.)

Скаларни производ два вектора означен са  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  дефинисан је сумом  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_\alpha b_\alpha$ .

Унутрашњи производ два тензора означен са  $\mathbf{A} : \mathbf{B}$  дефинисан је сумом  $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta}$  односно  $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta\gamma\delta}$ , у зависности од реда тензора.

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{ако је } \alpha = \beta \\ 0 & \text{ако је } \alpha \neq \beta \end{cases} \quad \text{Кронекеров (Kronecker) симбол}$$

Пермутациони симбол

$$e_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} +1 & \text{када су индекси } \alpha, \beta, \gamma \text{ парне пермутације } 1, 2, 3 \\ -1 & \text{када су индекси } \alpha, \beta, \gamma \text{ непарне пермутације } 1, 2, 3 \\ 0 & \text{када се индекси понављају} \end{cases}$$

Скраћенице које су коришћене кроз цео текст (и одговарајући парњаци на енглеском језику) укључују:

2Д, 3Д – дводимензионални, тродимензионални (“2D, 3D”),

МКЕ – метода коначних елемената (“FEM – finite element method”),

МД – молекуларна динамика (“MD – molecular dynamics”),

ДЕМ – метода дискретних елемената (“DEM – discrete element method”).

Коначно, због великог обима сажете литературе и разноврсности научних области, текст се одликује мноштвом ознака које су дефинисани при првом коришћењу. Уложен је труд да се избегну понављања ознака мада је при томе устаљена нотација систематски поштована кад год такав компромис не може да доведе до забуне. Следи списак ознака без наглашавања природе величине (скалар, вектор, тензор) сем када је то неопходно. (Изостављене су ознаке коришћене искључиво локално; типично, параметри разних модела.)

$\sigma, \varepsilon$	напон, релативна деформација,
$\varepsilon_f$	релативна деформација при раскидању везе,
$\dot{\varepsilon}$	брзина релативне деформације,
$\sigma_m$	затезна чврстоћа;
$\tau$	напон смицања;
$\tau_F$	експонент степене расподеле фрагмената;

- $C, C_{\alpha\beta\gamma\delta}$  тензор еластичности (“stiffness tensor”, дословно, тензор чврстоће),  
 константе еластичности;
- $C_0$  брзина звука;
- $E, K, \nu, \mu, \lambda$  еластичне константе: модули еластичности и компресије, Поасонов  
 коефицијент, Ламеови коефицијенти (константе);
- $\mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{a}$  вектор положаја, померај, брзина и убрзање,
- $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  међусобно растојање између честица  $i$  и  $j$ ,
- $r_0 = r_{0ij}$  међучестично растојање у референтном положају,
- $\bar{r}_{ij} = r_{ij}/r_0$  нормализовано међучестично растојање;
- $\omega$  угаона брзина;
- $\omega_E, \omega_0$  Ајнштајнова фреквенција, основна хармонијска фреквенција;
- $m_i, m_0$  маса честице  $i$ , маса јединичне честице моноатомског система;
- $m$  маса фрагмента (увек без индекса);
- $m_{\max}, m_{\max 0}, m_{\max}^{2nd}, m_{ave}$  маса најтежег фрагмента, маса најтежег фрагмента који  
 одговара првој критичној тачки (фазни прелаз оштећење–фрагментација), маса  
 фрагмента другог по тежини, просечна маса фрагмената;
- $t, \delta t$  време, рачунски временски корак;
- $L, A, I, W$  дужина, особине попречног пресека: површина, аксијални момент инерције  
 и отпорни момент (ако се односе на греду попреч. пресека  $t \times h$  имају горње  
 индексе <sup>(b)</sup>);
- $\mathbf{p}_i = m_i \mathbf{v}_i$  количина кретања честице  $i$ ;
- $\mathbf{L}_i = I_i \boldsymbol{\omega}_i$  момент количине кретања (кинетички момент, замах) честице;
- $\mathcal{K}$  кинетичка енергија;
- $\Phi$  потенцијална енергија атомског система;
- $\phi(r_{ij})$  међучестични потенцијал (између пара честица);
- $\mathbf{f}_{ij}$  међучестична сила;
- $\varepsilon_{LJ}, \varepsilon_M$  дубина потенцијалне јаме (за Ленард-Џоунсов и Морсов потенцијал);
- $E_{coh}, E_{vac}$  кохезивна енергија, енергија формирања ваканција;
- $U$  деформациона енергија (различити индекси);
- $T, P$  температура, притисак,
- $T_c, P_c$  температура и притисак у критичној тројној тачки,
- $T_{\max}, P_{\max}$  максималне вредности температуре и притиска,
- $T_m$  температура топљења;
- $T_{ij}$  обртни момент тангенцијалне компоненте међучестичне силе;
- $n(m)$  број фрагмената масе  $m$ ;
- $n_{fin}$  коначни број фрагмената (по окончању фрагментације);
- $N(m)$  кумулативни број фрагмената масе  $m$  (одговарајућа расподела);
- $N_{tot}$  укупни број веза у узорку (нпр., пројектилу);



- $N_{ab}, N_{par}$  број атома (или честица) у систему;  
 $M(m)$  кумулативна расподела маса фрагмената;  
 $M_{tot}$  укупна маса узорка (нпр., пројектила);  
 $M_k, M_k^j$   $k$ -ти статистички момент (честице  $j$ );  
 $k_B, h$  Болцманов коефицијент, Планкова константа;  
 $k$  коефицијент крутости везе (различити горњи индекси);  
 $\alpha, \beta, \gamma$  константе крутости носача у решетки (различити индекси);  
 $D$  скаларни параметар оштећења,  
 $D_{fin}$  вредност скаларног параметра оштећења по окончању фрагментације;  
 $D_{pr}, R_{pr}$  пречник и полупречник лоптастог (кружног) пројектила;  
 $d, \bar{d} = d/r_0$  пречник витког нанопројектила, нормализована вредност;  
 $R$  полупречник честице у ДЕМ;  
 $v_{imp}$  брзина удара пројектила,  
 $v_0, v_1$  брзина удара пројектила које одговарају два критична тачкама фазних прелаза при фрагментацији;  
 $G_f$  енергија лома;  
 $K_{lc}$  ломна жилавост при првом моду (отварање);  
 $\mathcal{E}_R$  параметар јачине експлозије (енергија експлозије);  
 $\Xi \in \{\mathcal{R}, P_{max}, T_{max}, \dot{\varepsilon}_{max}^2\}$  генерички параметар стања при балистичком Тејлоровом тесту;  
 $\mu_f$  коефицијент трења;  
 $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \dots$  коефицијенти Поасонове хипер-експоненцијалне функције;  
 $pdf(\ )$  функција густине вероватноће;  
 $ccdf(\ )$  комплементарна кумулативна густина вероватноће;

# 1 Увод

Многи материјали имају прекидну (дисконтинуалну) и нехомогену структуру на микроскопској и мезоскопској, па чак и макроскопској скали, што доводи до сложених механичких понашања која се тешко репродукују са моделима заснованих на традиционалној механици континуума. Међу овим сложеним појавама које је неопходно моделирати је и еволуција оштећења са зачетком, растом, међусобном интеракцијом и срастањем прелина које могу да доведу до појаве течења материјала, дифузне или локализоване деформације и оштећења, фрагментације. Свим овде описаним методама рачунске механике прекидних средина заједничко је да се заснивају на дискретним моделима који материјал представљају скупином засебних (дистинктних) елемената који јесу, или могу бити, у међусобној вези. Ови модели се разликују од рачунских модела механике континуума по дефиницији поља померања само у коначном броју чворних тачака и, сходно томе, у формулацији проблема коришћењем алгебарских, уместо парцијалних диференцијалних, једначина.

Током шездесетих година двадесетог века истраживачи и инжењери који су радили у различитим областима механике материјала приметили су да решења до којих се дошло коришћењем традиционалне механике континуума често испољавају сингуларитете или дају резултате који нису у складу са експерименталним опажањима. У деценији која је следила, изванредно брз развој могућности рачунара и одговарајући напредак у развоју нумеричких метода омогућио је оживљавање потраге за осмишљавањем рачунарских решења уочених проблема. Као резултат тог премишљања, настале су, и убрзано се развијале, рачунске методе које су користиле дистинкте структурне јединке (као што су атоми, молекули, честице, опруге, штапови, греде) за моделирање материјала у циљу решавања различитих проблема. Са појавом рачунара све

приступачнијих цена са стално унапређиваним перформансама и, сходно томе, могућностима опажања на све мањим просторним и временским скалама, ове методе постају доступне широј бази истраживача те почињу да нуде решења и за истраживачке и за индустријске проблеме. Рачунска механика прекидних средина изникла је из тог процеса као важна и динамична грана рачунске механике, чврсто успостављена као саставни део — како најмодернијих истраживања у различитим областима попут нанотехнологија, истраживања матичних ћелија, биомедицинском инжењерингу, свемирске пропулзије — тако и индустријских процеса који покривају широк распон различитих области попут рударства, машинске обраде, фармације, науке о материјалима, грађевинарства, итд. Моделирање коришћењем рачунарских симулација<sup>2</sup> је флексибилније од аналитичког моделирања и има предност у односу на експериментална истраживања у томе да су подаци доступни у свакој фази виртуелног експеримента. Ова флексибилност протеже се и на могућности конфигурисања оптерећења, почетних и граничних услова, и моделирања тополошке, геометријске и структурне неуређености текстуре материјала. При томе стално треба имати на уму кључно правило да је, у циљу постизања најбољих могућих резултата, рачунске методе прекидних средина потребно структурирати у складу са геометријским и физичким специфичностима абстрахованог материјала.

Виртуелни експерименти су у главним аспектима веома слични стварним лабораторијским експериментима. Прво се припрема узорак од материјала који је предмет изучавања. Овим поступком се *ствара* објекат симулације у виртуелном простору („нумерички” или „виртуелни” материјал; нпр., у литератури се често среће израз „нумерички бетон”) што представља суштински различит прилаз решавању проблема у односу на, нпр., МКЕ које, у принципу, само представљају технике интеграције конститутивних модела непрекидних средина. Овако створени узорак (од виртуелног материјала) се затим повезује са неопходним „виртуелним” мерним инструментима како би параметри стања од интереса могли да буду снимани и обрађивани током извесног временског периода. Пошто је већина мерења подложна статистичким варијацијама, што више времена стоји на располагању за осредњавање резултата, мерења постају све прецизнија. Међутим, резолуција виртуелног мерења је обрнуто пропорционална величини периода осредњавања те је

---

<sup>2</sup> Последњих пар деценија одомаћио се и израз „виртуелни експерименти” који ће због тога у даљем тексту бити коришћен без наводника, мада неки истраживачи имају несклоност према њему. Слично, придев „виртуелни” ће у даљем тексту такође бити под наводницима само приликом прве употребе (виртуелни: материјал, мерни инструмент...).

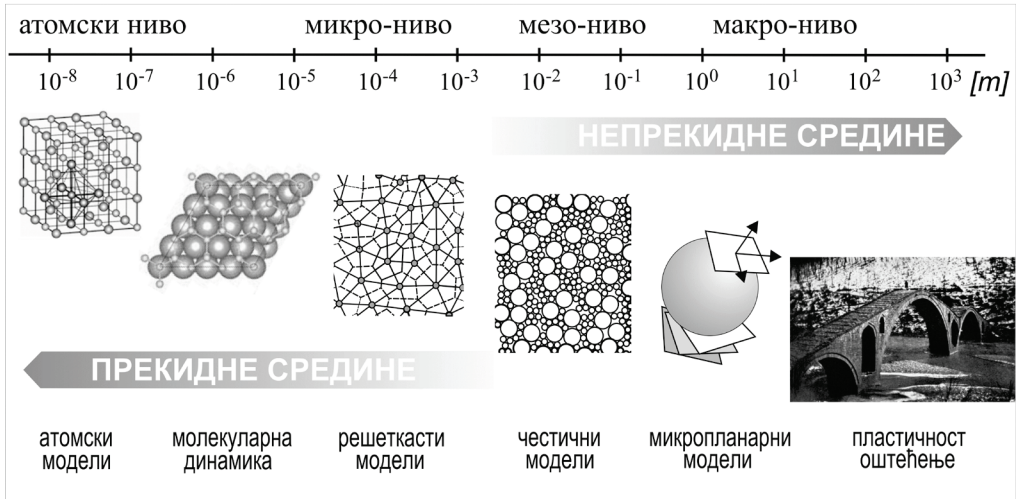
неопходно наћи компромис између ових конфликтних захтева узимајући у обзир природу физичке појаве која се симулира. Најчешће грешке које се чине приликом виртуелних експеримената веома су сличне онима које могу да контаминирају резултате стварних лабораторијских експеримената: узорак није адекватно припремљен, мерење сувише кратко траје, не меримо оно што мислимо да меримо...

Све рачунске методе механике прекидних средина нуде неке заједничке предности приликом анализе оштећења и лома у поређењу са одговарајућим конвенционалним рачунским методама заснованим на механици континуума (типично, МКЕ). Оштећење и његова еволуција представљени су експлицитно преко раскинутих веза и покиданих контаката; није неопходно коришћење било каквих емпиријских релација ради дефинисања оштећења или одређивања његовог ефекта на понашање материјала. Микропрслине у симулацијама настају, проширују се и сједињују у различите видове макроскопских оштећења без потребе за коришћењем нумеричких „домишљатости” попут пригодног оријентисања мреже, реформулације мреже или сталног премрежавања домена. Не постоји потреба за развојем конститутивних закона у циљу репрезентовања сложених нелинеарних одзива материјала пошто се они појављују природно (сами по себи) кроз колективно понашање дискретних јединица вођених једноставним конститутивним правилима.

Методе механике прекидних средина почеле су учестало да се користе у последње две деценије у решавању просторних (3Д) проблема тако да се сада дводимензионални (2Д) модели све ређе срећу у стручној литератури. Међутим, примери наведени у овој прегледној монографији фокусирани су углавном на 2Д проблеме и важна достигнућа остварена у 3Д арени биће, по правилу, поменута мање детаљно. Сажет преглед многих модела рачунске механике прекидних средина који ће бити разматрани приказан је на слици 1.1 у спрези са природном просторном скалом на којој се најчешће користе. При томе ваља имати у виду да су границе просторних нивоа „замагљене” јер су подложне дефинисању за сваки материјал понаособ. Нпр., просторни ниво који одговара мезоструктури бетона (реда величине сантиметара или чак дециметара) или стена (реда величине дециметара или метара) за неколико редова величина превазилази онај за силикон карбид (SiC).

На просторној скали кристалне решетке могуће је користити атомске моделе засноване на квантној механици, односно, решавању Шредингерове (Schrödinger) једначине (тзв., МД основних принципа – “*first principle MD*”, позната и као “Born–Oppenheimer” или “Carr–Parrinello” МД). Насупрот томе, традиционална МД користи емпиријске међуатомске (међумолекуларне)

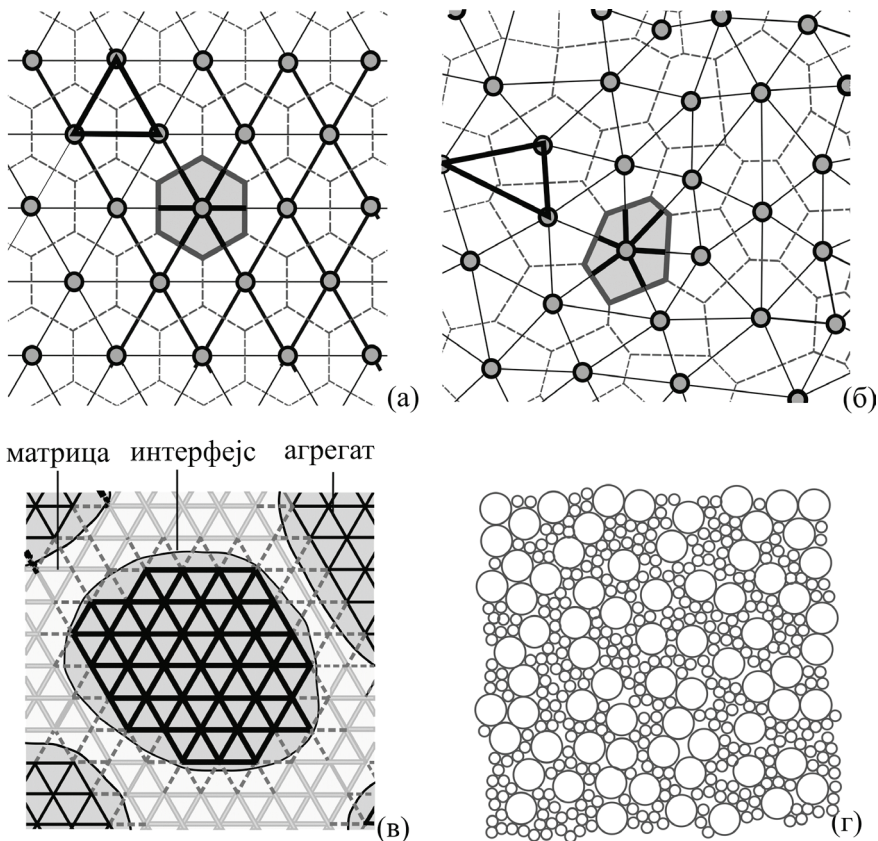
потенцијале те има много већи просторно-временски опсег. Нумеричке методе механике прекидних средина на микроскопској и мезоскопском скали (види слику 1.1; у даљем тексту често ће бити коришћене кованице микроскали и мезоскали) могу бити, условно, подељене у три широке, међусобно испреплетане категорије које чине методе: (i) решетке или мрежа опруга (“lattice; spring network”), (ii) дискретних/оделитих елемената (“discrete/distinct element”), и (iii) честица (“particle”).



**Слика 1.1.** Опажајне просторне скале и одговарајући модели за крпе геоматеријале са неуређеном микроструктуром попут бетона. (Инспирисамо сликом из D’Addeta et al., 2001)

Решетке су најједноставнији модели прекидних средина који се користе за симулацију комплексних одлика динамичког одзива и феноменологије оштећења и лома различитих класа материјала. Решеткасти модели се састоје из једнодимензионалних (1Д) дискретних елемената попут опруга, штапова или греда којима су додељене како геометријске и структуралне особине тако и карактеристике лома које им омогућавају да имитирају еластичну и нееластичну деформацију и лом апстрахованог материјала. Ови модели су, у принципу, изданци модела кристалних решетке на атомској скали, као што је МД. Њихове компаративне предности највише долазе до изражаја када текстура материјала може природно да се представи системом дискретних елемената који су у међусобној интеракцији преко реолошких елемената (у основном облику – еластичних опруга). Имајући то у виду, није изненађујуће да су просторне решетке и рамови били првобитни системи моделирања прекидних средина – разне идеје примене у инжењерској механици датирају, у најмању руку, од

пионирског рада Хреникова (Hrennikoff, 1941). Решетке, дакле, могу да се користе за моделирање континуалних средина коришћењем мрежних структура на много грубљој просторној скали од атомске. Ово отклања очигледну потребу да се ради са огромним бројем степени слободе што би за последице могло да има како загушење рачунара тако и презасићеност подацима (претерано изобиље информација, “data glut”) која би била неизбежна у случају коришћења атомских решетки за моделирање и најмањих структура на макроскали. Овим приступом се, такође, своди на релативно скроман ниво број чворова неопходних за моделирање јединичне хетерогености материјалне структуре. Свеобухватни прегледи решеткастих модела које је објавио Остоја-Старжевски (Ostoja-Starzewski, 2002, 2007) коришћени су као узор за излагање у овој монографији.



**Слика 1.2.** (а) Правилна и (б) неправилна троугаона Деланејева решетка дуална Воронојевој тесалацији граница зрна. (в) Мезоструктура трофазног композита пројектованог на правилну троугаону решетку. (г) Мезоструктура кохезивног грануларног материјала; размештај кружних честица два различита пречника.

За разлику од решеткастих модела код којих основне структурне елементе представљају линијски носачи, код метода дискретних елемената (ДЕМ) основни градивни блокови модела<sup>3</sup> су исте димензионалности као разматрани проблем. На пример, раванске ДЕМ укључују моделе прекидних система који се састоје од 2Д основних конститутивних елемената као што су кругови (слика 1.2г), елипсе, или многоуглови са придруженим геометријским, структурним и контактним особинама које омогућавају њиховим „склоповима” (конгломератима, агломератима) да апроксимирају феноменолошки одзив циљних класа материјала. Најсажетије исказано, ДЕМ омогућавају симулацију кретања и међудејстава огромног броја дискретних објеката. Макроскопско понашање таквих модела израња (само по себи) као последична особина система поизашла из малог комплета микро-особина појединачних зрнаца и њихових међудејстава. Ови модели пружају могућност детаљног увида у суптилне микромеханизаме чије комбиновање доводи до сложених макроскопских понашања, те проучавања механичког понашања хетерогених материјала и система прекидне микроструктуре који се не могу адекватно проучавати постојећим теоријама континуума. Међучестични контакти су обдарени способношћу дисипације енергије и ограничене кохезивне чврстоће (сведене на нулу, наравно, у случају симулације растреситих, природно-некохезивних материјала) који омогућавају представљање како еластичних и нееластичних појава тако и настанка и развоја прслина. ДЕМ су способне да се носе са сложеностима лома захваљујући поменутој динамичкој интеракцији зрнаца материјалног система. Важно је нагласити да особине контаката између зрнаца треба да буду такве да их је могуће идентификовати са макроскопским особинама еластичне и нееластичне деформације и лома материјала. Свеобухватне прегледе ДЕМ објавили су, између осталих, Бићанић (Bicanic, 2004) и Донзе и сарадници (Donzé et al., 2008).

На крају, честичне методе, које се користе у последње три деценије за симулацију материјала на грубљим просторним скалама, засноване су на поопштавању приступа модела кристалних решетки у оквирима традиционалне молекуларне динамике. Улогу атома или молекула преузима крути, јединични материјални ентитет назван честица континуума (“continuum particle”) или квази-честица, која може да представља, на пример, зрно керамике, агрегат бетона, честицу композита, гранулу кластичне стене. Аналитички домен, који заузима симулирани материјал, дискретизован је, као и код решеткастих модела, у правилне или неправилне мреже честица које уопштено узев делују међусобно

---

<sup>3</sup> У овој монографији ће ови дискретни (оделити) елементи најчешће бити називани зрнцима ради формалног подвлачења разлике у односу на честичне методе. Осим термина честице, у ДЕМ су устаљени и грануле и зрна.

преко нелинеарних потенцијала у оквирима класичне динамике. Честични модели користе опробане МД технике како би се на директан начин суочили са различитим изразито сложеним изазовима физике екстремних појава. Критични корак у моделирању је прелаз на међучестични потенцијал са усвојеног атомског потенцијала (приступ одозго на горе) или скупа циљаних карактеристика континуума (одозго на доле), што је уобичајена кључна ставка свих нумеричких приступа у рачунској механици прекидних средина. Традиционалне референце за честично моделирање су Ален и Тилдесли (Allen and Tildesley, 1987) и Гринспен (Greenspan, 1997), док се Вонг и сарадници (Wang et al., 2010) могу консултовати за преглед новијих развоја.

Рачунске методе засноване на решеткама, ДЕМ, и честичним методама суочавају се са сличним изазовима. Како су сажето истакли Инграфеа и Вавржинек (Ingraffea and Wawrzynek, 2004): „Како би се користили једноставни облици „елемената”, попут греда или лопти, величина довољно малих да акомодирају појаву оштећења на жељеној просторној скали, морају се измишљати вештачка локална еластична и пластична конститутивна својства у циљу постизања опажених глобалних карактеристика материјала на макроскопској скали. За сваку топологију или паковање и расподелу величина дискретних елемената, мора се прво процесом калибрације одредити одговарајући сет вештачких локалних својстава. Постоје ограничења топологија/аранжман/величина која морају да се поштују. При томе, стварни микромеханички процес оштећења и пластичне деформације, попут декохезије границе зрна или клизања код поликристалних материјала морају да буду трансформисани кроз еквивалентна дејства крајева греда или тачака контакта честица.”

## 1.1 Еластичне особине 2Д система

Конститутивни изрази за линеарно-еластични чврсти материјал представљају везу између компонената тензора напона ( $\sigma_{\alpha\beta}$ ) и релативне деформације ( $\epsilon_{\gamma\delta}$ ) у облику

$$\sigma_{\alpha\beta} = C_{\alpha\beta\gamma\delta} \epsilon_{\gamma\delta} \quad \alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, 2, 3 \quad (1.1)$$

где су  $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$  компоненте тензора еластичности које поседују следеће особине симетрије  $C_{\alpha\beta\gamma\delta} = C_{\beta\alpha\gamma\delta} = C_{\alpha\beta\delta\gamma} = C_{\gamma\delta\alpha\beta}$ .

Хуков закон за изотропни (3Д) материјал може језгровито да се изрази у следећим облицима



$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1+\nu'}{E'} \sigma_{\alpha\beta} - \frac{\nu'}{E'} \sigma_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} \quad \text{или} \quad \sigma_{\alpha\beta} = 2\mu' \varepsilon_{\alpha\beta} + \lambda \varepsilon_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} \quad \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3 \quad (1.2)$$

где су  $E'$ ,  $\nu'$ ,  $\mu'$ , и  $\lambda'$  физичко-механичке особине материјала и то редом: модул еластичности (Јангов модул), Поасонов коефицијент (бочне контракције), и Ламеови коефицијенти;  $\delta_{\alpha\beta}$  је Кронекеров симбол, а поновљени индекси указују на сумирање, како је било речи у напоменама о нотацији.

Често је обичај, када се ради о 2Д (или раванским) проблемима, да се конститутивне релације напишу у сличном облику

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1+\nu^{(2D)}}{E^{(2D)}} \sigma_{\alpha\beta} - \frac{\nu^{(2D)}}{E^{(2D)}} \sigma_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} \quad \text{или} \quad \sigma_{\alpha\beta} = 2\mu^{(2D)} \varepsilon_{\alpha\beta} + \lambda^{(2D)} \varepsilon_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} \quad \alpha, \beta, \gamma = 1, 2 \quad (1.3)$$

где равански (површински) коефицијенти  $E^{(2D)}$ ,  $\nu^{(2D)}$ ,  $\mu^{(2D)}$ , и  $\lambda^{(2D)}$  формално представљају 2Д пандане стварних материјалних карактеристика  $E'$ ,  $\nu'$ ,  $\mu'$ , и  $\lambda'$ .

Очигледно је да равански коефицијенти  $E^{(2D)}$ ,  $\nu^{(2D)}$ ,  $\mu^{(2D)}$ , и  $\lambda^{(2D)}$  нису ништа више него параметри добијени комбиновањем материјалних карактеристика у условима раванског стања:

- деформација ( $2D = \varepsilon$ :  $\varepsilon_{33} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$ )

$$E^{(\varepsilon)} = \frac{E'}{1-\nu'^2}, \quad \nu^{(\varepsilon)} = \frac{\nu'}{1-\nu'} \quad (1.4a)$$

- напона ( $2D = \sigma$ :  $\sigma_{33} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0$ )

$$E^{(\sigma)} = E', \quad \nu^{(\sigma)} = \nu' \quad (1.4b)$$

Горе наведени изрази раванске изотропне еластичности могу да се поопште за случај анизотропних материјала. Коефицијенти који одговарају раванском стању релативних деформација ће бити од сада навођени без горњих индекса (тј.,  $E^{(\varepsilon)} = E$ ,  $\nu^{(\varepsilon)} = \nu$ ) ради сажетије нотације.

Компонентне тензора чврстоће који одговарају раванском стању деформација су осредњене величине које се током симулација израчунавају коришћењем поступака уобичајених у молекуларној динамици (2.12) (Vitek, 1996). Стога је погодно да се модул еластичности,  $E'$ , изрази у функцији компонената тензора чврстоће који одговарају раванском стању деформација

$$E' = \frac{C_{1122} (3C_{1111} - 4C_{1122})}{C_{1111} - C_{1122}} \quad (1.5)$$

Израз (1.5) следи из матрице еластичности

$$[C_{ab}] = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2212} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1212} \end{bmatrix} = \frac{E'}{(1+\nu')(1-2\nu')} \begin{bmatrix} 1-\nu' & \nu' & 0 \\ \nu' & 1-\nu' & 0 \\ 0 & 0 & (1-2\nu')/2 \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

која одговара „привидним” конститутивним релацијама раванског стања деформација (Nemat-Nasser and Hori, 1993). Сажета Војтова (Voigt) нотација: 11 → 1, 22 → 2, и 12 → 6 је веома погодна за коришћење у једначини (1.6).

Упутно је да се истакне услов изотропности

$$C_{1212} = \frac{1}{2}(C_{1111} - C_{1122}) \quad (1.7)$$

који ће бити интензивно коришћен у извођењима која следе.

Односи између раванских коефицијената

$$E = \frac{4(\lambda + \mu)\mu}{\lambda + 2\mu}, \quad \nu = \frac{\lambda}{\lambda + \mu}$$

директно следе из једначине (1.2). Такође, поређењем израза (1.1) и (1.2) могу се добити функционалне везе између раванских модула и компоненти тензора (ефективне) еластичности у следећим облицима

$$\lambda = C_{1122}, \quad \mu = \frac{1}{2}(C_{1212} + C_{1221}), \quad \kappa = \frac{1}{2}(C_{1111} + C_{1122}), \quad \nu = \frac{C_{1122}}{C_{1111}}, \quad E = \frac{C_{1111}^2 - C_{1122}^2}{C_{1111}} \quad (1.8).$$

## 2 Молекуларна динамика

Овај кратки преглед има циљ да језгровито представи основе метода традиционалне молекуларне динамике (МД). Непотребно је да се наглашава да је разматрање ове огромне теме, које следи, непотпуно и подложно како субјективности наметнуте областима интересовања аутора тако и ограничењима која намеће сама тема. Нема покушаја да се уведу напредни садржаји, као што су нпр. симулације неравнотежних процеса, симулационе методе засноване на квантној механици (Шредингеровој једначини), комбинацији МД и МКЕ, или паралелно процесирање, иако се сасвим природно ослањају на предметну област интересовања и већ су потпуно уходане у истраживачкој пракси.

МД је техника рачунских симулација која омогућава да се предвиди временска еволуција система честица (атома, молекула) које су у међусобном дејству. Основна замисао је једноставна. Прво, за атомски систем неопходно је да се: (i) дефинише скуп почетних услова (почетни положаји и брзине свих атома у систему), потом (ii) усвоји потенцијал за дефинисање (*унутрашњих*) међуатомских сила, и на крају (iii) уведе (*спољашње*) оптерећење које делује на материјални систем. Након тога, у традиционалној МД, која је предмет овога сажетка, еволуција атомског система у времену прати се решавањем система једначина кретања класичне механике за сваки атом понаособ. У оквиру класичне механике, једначине које управљају кретањем материјалне честице су оне које одговарају другом Њутновом закону. Уколико су разматране честице атоми, резултујућа сила која делује на сваки атом у датом тренутку може се добити из међуатомског потенцијала који је, уопште узев, функција положаја свих атома система (2.1a). Дакле, када су дефинисани почетни услови и интеракциони потенцијал, једначине кретања класичне механике могу се решити нумерички. Положаји и брзине свих атома система у функцији времена добијају се као резултат решавања система алгебарских једначина који апроксимира горе поменути систем диференцијалних једначина кретања. Дакле,

за разлику од Монте Карло метода, кретање сваког појединог атома и сваког (статистичког) ансамбла атома (тј., свака физичка реализација неке статистичке расподеле; “ensemble”) су у потпуности детерминистички. Вреди нагласити да је, за задате почетне услове, еволуција система у времену, у принципу, једнозначно одређен проблем (у пракси, нагомилавање рачунских грешка, у зависности од квалитета хардвера и софтвера, може да уведи извесну дозу неизвесности у резултат симулација).

Први научни рад у коме су Алдер и Веинрајт (Alder and Wainwright, 1957) користили рачунарске симулације МД методом објављен је пре више од пола века. Стога, није изненађујуће да заинтересованом истраживачу стоје на располагању многе изванредне књиге посвећене рачунарским симулацијама у физици кондензоване материје (нпр., Hoover, 1986; Allen and Tildesley, 1987; Haule, 1992; Ercolessi, 1997; Rapaport, 2004). МД може да се посматра и користи и као метода статистичке механике: генерисањем низа конфигурација дефинисаних према одређеним статистичким функцијама расподела. У већини случајева аналитичари нису заинтересовани за трајекторије појединих атома, него за макроскопска својства материјала која произилазе из кретања мноштва атома. Као што ћемо касније видети, информације добијене рачунарским симулацијама могу да се осредњавају у одређеним временским интервалима за све (или неке) атоме система ради добијања термодинамичких параметара.

Главне предности МД метода су могућност анализирања брзих неравнотежних процеса са просторном резолуцијом на атомској скали (нпр. микроскопских механизма оштећења, пластичне деформације изазване простирањем ударних таласа, динамички раст прслине и лом, јонско бомбардовање, удар и фрагментација, итд). За многе од ових проблема, МД методе немају алтернативу.

Како је већ било речи, МД се може сматрати нумеричко-симулационим изданком статистичке механике који је нашао примену у истраживањима у широком спектру проблема распрострањених у различитим научним областима као што су:

- Статистичка физика: теорија течности; својства статистичког ансамбла; структуре и својства малих кластера; фазни прелази,...
- Наука о материјалима: тачкасти, линеарни и равански дефекти у кристалима и њихове интеракције; стабилне и метастабилне структуре сложених легура и сродни фазни дијаграми; аморфни материјали; оштећење материјала зрачењем; микроскопски механизми лома; реконструкције површина; топљење; раст танких филмова; трење,...

- Хемија и биохемија: молекуларна структура; хемијске реакције; структура, функционални механизми и процес савијање протеина; дизајн лекова; вибрациона релаксација и пренос енергије; структура мембрана; динамика великих биомолекула,...

Многе савремене експерименталне технике су у потпуности испреплетене са рачунским моделирањем ове врсте. Пример је електронска микроскопија дефеката кристалне решетке, посебно електронска микроскопија високе резолуције (Vitek, 2011).

Ригорозни теоријски приступ МД симулацијама, у којима је сваки атом у интеракцији са свим другим атомима система заснованој на квантној механици (тзв., Кар-Паринело, или *ab initio*, МД) нужно води у веома захтевне прорачуне који драстично ограничавају како величину система (тренутно око  $10^4$  атома) тако и (реално) време трајања симулираног процеса (наносекунде), што је изузетно скромно у поређењу са моделима коришћеним у традиционалној МД који досежу  $10^{12}$  атома и дужине трајања мерене микросекундама. Дискретни ансамбл састоји се од  $N_{at}$  атома познатих маса  $m_i$ , и положаја  $\mathbf{r}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N_{at}$ ). У традиционалној МД, ови атоми су у међудејствима преко емпиријског потенцијала

$$\Phi = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i \Phi_1(\mathbf{r}_i) + \sum_i \sum_{j>i} \Phi_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} \Phi_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (2.1a)$$

који је функција положаја атома. У изразу (2.1a), први термин представља спољна поља (нпр., гравитационо или електростатичко) и често се занемарује; други, двоатомске интеракције (интеракције између парова честица) које зависе искључиво од међучестичног растојања; трећи, интеракције у тројци честица (“three-body interactions”) које укључују и међучестичне углове, итд. У највећем броју случајева ригорозност је жртвована зарад ефикасности, те су међуатомске интеракције типа „сваки са сваким” замењене рачунарски мање захтевним апроксимацијама у којима је сваки поједини атом у међусобном дејству само са одређеним бројем најближих суседа (тзв., први-најближи, други-најближи, итд.). Апроксимација интеракцијом само са првим-најближим суседима је најчешће техничка неопходност која се са физичке тачке гледишта често образлаже (ако не, оправдава) примарношћу кратко-дометне уређености (електронски „скрининг” практично ограничава домет међуатомских дејстава) (Zallen, 1983), а мотивисана је једноставном дефиницијом прслине и огромним рачунским уштедама (решавање  $O(N_{at})$  уместо  $O(N_{at}^p)$  проблема, где је  $p \geq 2$  параметар интеракционог домета). Међутим, треба имати у виду да је, ригорозно гледано, занемаривање међудејстава између атома чије међусобно растојање прелази „растојање одсецања” оправдано за, нпр., ван дер Валсове интеракције (које

брзо опадају са повећањем растојања) али не и за електростатичке (које не опадају тако брзо). Укорењени приступ традиционалне МД, заснован на коришћењу међудејстава кратког домета (Haule, 1992), устаљен је у огромној већини студија. Занемаривањем међудејстава у тројци честица, потенцијална енергија система може да се апроксимира збиром изолованих емпиријских двоатомских потенцијала (пар-потенцијала) (претпоставка пар-по-пар адитивности; “pairwise additivity assumption”),

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \phi(r_{ij}) \quad (2.16)$$

где  $\phi$  означава међуатомски потенцијал, а  $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  растојање између повезаних атома  $i$  и  $j$ . Очигледно је да концепт међудејстава парне адитивности (2.16) представља поједностављење са далекосежним последицама. За неке кристалне решетке пар-по-пар међудејство није у стању да узме у обзир добар део кохезивног међудејства (Born and Huang, 1956). Даље, међудејство у јонским кристалима може бити последица ефеката поларизације, приписаних деловању електричних поља околних јона, који не може да се опише једноставним паровним потенцијалима. Међутим, сматра се да су главне интеракције у јонским и Ван дер Валсовим кристалним решеткама суштински паровне (Born and Huang, 1956). Многи сложенији облици потенцијалне енергије система могу, по потреби, да се користе по цену повећања времена трајања симулације. Избор потенцијала централних сила има за последицу да је потенцијална енергија зависна само од положаја атома  $\mathbf{r}_i$  ( $i = 1, \dots, N_{at}$ ), а укупна енергија система (одређена решавањем система диференцијалних једначина) одржава сталну вредност током кретања. Речником статистичке физике, класична (конвенционална) МД генерише микроканонски ансамбл ( $\Omega, E, N_{at}$ ) (Reif, 1965; Hoover, 1991).

Систем од  $N_{at}$  Њутнових диференцијалних једначина кретања система материјалних тачака са дефинисаним количинама кретања

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \frac{d}{dt}(m_i \dot{\mathbf{r}}_i) = \mathbf{F}_i \quad (2.2a)$$

апроксимира се одговарајућим једначинама коначних разлика и потом решава коришћењем неког од многих доступних алгоритама. Претпостављајући да су међуатомске силе конзервативне, интензитети централне силе којом атом  $j$  делује на суседни атом  $i$  и резултујуће силе којом на атом  $i$  делују сви први суседи могу да се израчунају коришћењем следећих израза

$$f_{ij} = |f_{ij}| = -\frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}}, \quad \mathbf{F}_i = -\sum_j f_{ij} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (2.26)$$

Моторна снага МД програма је алгоритам неопходан за интеграцију једначина кретања (2.2) свих атома система и изналагање њихових трајекторија. Алгоритми временске интеграције су засновани на методи коначних разлика у којој се време дискретизује у оквиру коначне мреже а временски корак,  $\delta t$ , представља растојање између узастопних тачака на мрежи. Познавање положаја и неких од његових временских извода у текућем временском тренутку ( $t$ ), омогућава да се коришћењем интеграционог алгоритма израчунају исте величине у наредном временском тренутку ( $t + \delta t$ ). Наравно, шеме су приближне те укључују грешке. Међу њима се посебно истичу грешке скраћивања<sup>4</sup> и грешке заокруживања које се смањују са смањењем  $\delta t$ . Поред тога што треба да је што тачнија, метода интеграција система једначина (2.2) треба да буде и брза и што скромније меморијске захтевности, да дозволи примену што дужег временског корака, и да буде једноставна за програмску имплементацију.

Неколико различитих метода су на располагању за ту сврху. Верлејев (Verlet) алгоритам је још увек у најширој примени (Allen and Tildesley, 1987), мада су доступне и моћније технике интеграције једначина коначних разлика. Извођење овога алгоритма заснива се на развоју функције положаја честице у Тејлоров (Taylor) ред у произвољном временском тренутку  $t$

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t) \delta t + \mathbf{a}_i(t) \delta t^2 + \frac{d^3 \mathbf{r}(t)}{dt^3} \delta t^3 + O(\delta t^4)$$

односно

$$\mathbf{r}_i(t - \delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{v}_i(t) \delta t + \mathbf{a}_i(t) \delta t^2 - \frac{d^3 \mathbf{r}(t)}{dt^3} \delta t^3 + O(\delta t^4)$$

Сабирањем претходна два израза добија се

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) + \mathbf{r}_i(t - \delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) + 2\mathbf{a}_i(t) \delta t^2 + O(\delta t^4)$$

Дакле, према овој техници интеграције положаји, брзине и убрзања у времену ( $t + \delta t$ ) израчунавају се директним решавањем једначина другог реда (2.2) за познате тренутне положаје  $\mathbf{r}(t)$  и убрзања  $\mathbf{a}(t) = \ddot{\mathbf{r}}(t)$ , и претходне положаје

<sup>4</sup> Грешке скраћивања односе се на тачност апроксимације тачног решења методом коначних разлика. Интеграциони алгоритми се по правилу заснивају на развоју у Тејлоров ред до одређеног члана ("truncation"; погледати извођење једначине (2.3)). Ове грешке не зависе од имплементације већ су суштински везане за алгоритам (Ercolessi, 1997).

$\mathbf{r}(t - \delta t)$  свих честица система. Временски реверзибилна једначина за израчунавање наредног положаја има облик

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \delta t) + \delta t^2 \sum_{j \neq i} \frac{\mathbf{f}_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}{m_i} + O(\delta t^4) \quad (2.3)$$

где је  $m_i$  маса  $i$ -тог атома а  $\delta t$  рачунски временски корак. Овај метод интеграције је веома компактан и једноставан за имплементацију. С обзиром да међу атомима не делују никакве дисипативне силе, динамички систем је конзервативан. Сила којом атом  $j$  делује на атом  $i$  је  $\mathbf{f}_{ij} = -\nabla_i \phi(r_{ij})$  (2.2б), и њено израчунавање је временски далеко најзахтевнији део МД симулација. Верлејев метод се чини најефикаснијим у погледу трајања прорачуна а тиме и најпогоднији за скромне рачунарске ресурсе чему, свакако, може да захвали на делу популарности. Главни недостаци Верлејевог алгоритма су неспретно руковање брзинама

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{\mathbf{r}_i(t + \delta t) - \mathbf{r}_i(t - \delta t)}{2\delta t} + O(\delta t^2)$$

које подразумева познавање наредног положаја  $\mathbf{r}_i(t + \delta t)$  и потенцијална осетљивост на грешку заокруживања због релативно великог остатка  $O(\delta t^2)$ . Међутим, могуће је добити тачније процене брзине (а тиме и кинетичке енергије система) коришћењем алтернативних алгоритама сличних Верлејевом.

Стормеров (Störmer) алгоритам (познат и под именом алгоритам жабљег скока - “leap frog”) настао је модификацијом Верлејевог алгоритма при чему најизраженија рачунска предност произилази из чињенице да се ни у једном тренутку разлика два велика броја не користи за израчунавање малог броја (Allen and Tildesley, 1987). Прорачунска шема има следећи облик

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \delta t \mathbf{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) \quad (2.4a)$$

Поред тренутних положаја и убрзања, сачуване величине укључују и брзине на средини корака

$$\mathbf{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) = \mathbf{v}_i\left(t - \frac{\delta t}{2}\right) + \delta t \mathbf{a}_i(t) \quad (2.4b)$$

Стормеров алгоритам је само модификација Верлејевог те се њиховом употребом добијају идентичне трајекторије. Проблем, евидентан у изразима (2.4), настаје због тога што брзине честица нису израчунате у истим временским



тренуцима као њихови положаји што усложњава израчунавање укупне енергије система приликом коришћења овога алгоритма.

Последња варијанта Верлејевог алгоритма која ће бити разматрана је тзв. Верлејев алгоритам коригованих брзина. Ова интеграциона техника је вредна помена јер из ње проистичу исте трајекторије као код оригиналног Верлејеог алгоритма али, како јој име каже, даје боље процене брзина. Извођење овога алгоритма заснива се поново на развоју функције положаја честице у Тејлоров ред у произвољном временском тренутку,  $t$ , с тим што се то сада чини за два окружења дефинисана временских померајима  $\delta t$  и  $2\delta t$ . Трајекторије се, дакле, могу израчунавати коришћењем оригиналног Верлејевог израза (2.3), међутим, предност ове модификације лежи у томе што се брзина израчунава следећим изразом

$$v_i(t) = \frac{v_i(t + \delta t/2) - v_i(t - \delta t/2)}{2} - [a_i(t + \delta t) - a_i(t - \delta t)] \frac{\delta t}{12} + O(\delta t^4)$$

Из претходног израза се види да је за израчунавање брзина честица у текућем временском тренутку потребно познавати њихова убрзања у наредном временском тренутку.

Горе поменути алгоритми, и њима слични, потпуно су адекватни за већину МД симулација. Међутим, понекад је потребно да се користе интеграционе шеме вишег реда које, сажето речено, у Тејлоровој апроксимацији (2.1a) користе изводе вектора положаја вишег реда. Ови алгоритми омогућавају не само постизање веће тачности прорачуна за исти временски корак него и коришћење дужег временског корака без губитка тачности (барем на кратке стазе). Нажалост, коришћење ових алгоритама вишег реда (пример је популарни метод предвиђања-исправке; “predictor-corrector” метод) скопчано је са многим тешкоћама у имплементацији које сежу изван оквира овога прегледа а детаљно су дискутовани у литератури (нпр., Allen and Tildesley, 1987; Rapaport, 2004).

Време потребно за израчунавање међудејстава између  $N_{at}$  атома раванског система коришењем алгоритма (2.3) пропорционално је  $N_{at}^2$  (Allen and Tildesley, 1987). Ради побољшавања брзине извршавања програма, веома је корисно да се одржава *листа суседа* сваког атома коју је увео Верлеј у свом класичном раду (Verlet, 1967). Нпр., листа суседа  $i$ -тог атома образује се укључивањем свих атома на удаљености мањој од прописане вредности одбацивања (“cut-off distance”). Између периодичних ажурирања листе суседа (типично, неколико прорачунских циклуса), програм не проверава све остале атоме у систему него само оне који се појављују у листи за дати атом. Даље, атомске интеракције, а тиме и листе суседа, ограничене су, готово искључиво, на прве-најближе суседе.

## 2.1 Емпиријски међуатомски потенцијали

У МД атоми система ступају у међудејства која доводе до њиховог кретања одакле опет, због промена њихових положаја, произилази промена међуатомских сила. Улога међуатомских сила је, дакле, кључна за реалистично репродуковање симулиране физичке појаве. Према томе, симулација је реалистична само у мери у којој су међуатомске силе налик онима које оперишу између стварних атома у одговарајућој атомској конфигурацији (Ercolezzi, 1997). Као што је већ напоменуто, атомско везивање у оквиру МД може бити симулирано или са квантно-механичким (*ab initio*) или емпиријским (конвенционалним) моделима. Међуатомске силе су, стриктно узев, квантно-механичке по природи, али упркос појави рачунара високих перформанси постоји свега неколико физичких појава мезоскопских размера које могу реалистично да се репродукују са *ab initio* симулацијама.

Класична дефиниција међуатомске интеракције, заснована на емпиријским потенцијалима, апроксимира ригорозну квантно-механичку природу материјала. Електрони нису директно присутни у моделу већ се њихов утицај уводи посредно преко површи потенцијалне енергије које се добијају решавањем Шредингерове једначине у оквиру Борн-Опенхајмерове (Born-Oppenheimer) апроксимације. Пошто ова решења нису доступна у аналитичком облику за материјалне системе од практичног интереса, непознате површи потенцијалне енергије апроксимирају се аналитичким функцијама које потенцијалну енергију дефинишу искључиво на основу положаја атома. Креирање аналитичке функције потенцијалне енергије и избор улазних параметара често се заснива на фитовању расположивих експерименталних података који су од највећег интереса за конкретан проблем који се изучава (нпр., модул еластичности, кохезивна енергија, температура фазних прелаза, вибрационе фреквенције,...)

Како је претходно приказано (2.2б), међуатомске силе се обично добијају као (негативни) градијенти међуатомских потенцијала зависни од атомске конфигурације (што се за најједноставнији случај паровних међудејстава са најближим суседима своди на њихова међусобна растојања). Самим тим, међуатомски потенцијали су улазни подаци од највећег значаја у МД моделима, а пошто је *ab initio* МД (атомски модели на слици 1.1) изван оквира ове студије, пажња је усредсређена искључиво на емпиријске међуатомске потенцијале (стога је придев „емпиријски”, зарад сажетости, изостављен у даљем тексту).

Приликом формирања МД модела, међуатомски потенцијал се креира на основу познавања атомске природе симулираног материјала или се усваја *apriori*. Конструкција међуатомског потенцијала је уметност колико и наука, али са становишта корисника избор је, у данашње време, прилично поједностављен захваљујући широком спектру доступне литературе. Избор међуатомског потенцијала је од суштинске важности из барем два директна разлога: (i) адекватност и тачност потенцијала диктирају квалитет резултата симулација, (ii) његова сложеност одређује ефикасност кода у смислу времена трајања симулације. Иако неки компактни потенцијали могу да изгледају неадекватни, многи фундаментални, генерички аспекти изучаване физичке појаве могу бити уочени захваљујући предностима које пружа њихова једноставност.

Најједноставнији потенцијали су пар-потенцијали (двоатомни потенцијали) код којих је сила међудејства два атома у потпуности одређена њиховим међусобним растојањем. Постоји обимна литература о начинима на који се ови потенцијали експериментално одређују или теоријски моделирају (нпр., Stone, 1996). Они, строго узевши, описују реално само племените гасове који се карактеришу сферним електронским облацима блиским атомским језгрима без валентних електрона расположивих за стварање веза, односно, привлачним међуатомским интеракцијама заснованим на слабир ван дер Валсовим (van der Waals) силама. Најједноствнији потенцијал овога типа је дисконтинуални потенцијал „круте кугле” који подразумева да је вредност међуатомске силе једнака: (i) нули ако је међуатомско растојање веће од прописане вредности, и (ii) бесконачности ако је међуатомско растојање једнако или мање од прописане вредности.

Реалније међуатомске интеракције се добијају под претпоставком да сила међудејства поступно варира од снажно одбојне (на малим међуатомским растојањима) преко привлачне (на средњим растојањима) да би коначно асимптотски конвергирала ка нули (са даљим порастом растојања) (слика 2.1). Најпознатији потенцијал овог типа, који је у прошлости много коришћен када је фокус истраживања био пре изучавање квалитативних трендова (суштинске физике) него уско специфичне проблематике, је Ленард-Џоунсов (Lennard-Jones) 6-12 потенцијал оригинално развијен за племените гасове са ван дер Валсовом кохезијом (Lennard-Jones and Devonshire, 1939). Општи облик овога потенцијала је

$$\phi(\bar{r}_{ij}) = -\varepsilon_{LJ} \left[ 2 \left( \frac{1}{\bar{r}_{ij}} \right)^6 - \left( \frac{1}{\bar{r}_{ij}} \right)^{12} \right] \quad (2.5)$$

где  $\varepsilon_{LJ}$  представља дубину потенцијалне јаме, а  $\bar{r}_{ij} = (r/r_0)_{ij}$  количник текућег и

равнотежног растојања између атома  $i$  и  $j$  (слика 2.1). Ови параметри модела се бирају са циљем да оптимално репродукују најпожељније физичко-механичке особине материјала. Количина објављених радова са Ленард-Џоунс системима од настанка МД је непревазиђена било којим другим потенцијалом, и само из тог разлога, не помињући друге, не може се претерати са наглашавањем његовог значаја. Међутим, као што се види из табеле 2-1, може се претерати са применом овога потенцијала за квантитативно изучавање сложенијих материјала.

Члан  $\bar{r}_{ij}^{-12}$  у изразу (2.5), који доминира међуатомским одбијањем, је изабран због погодности у примени: што се физичких основа тиче експоненцијални члан је прикладнији избор. Најједноставнији потенцијал који узима ову реалност у обзир је Морсов (Morse) потенцијал:

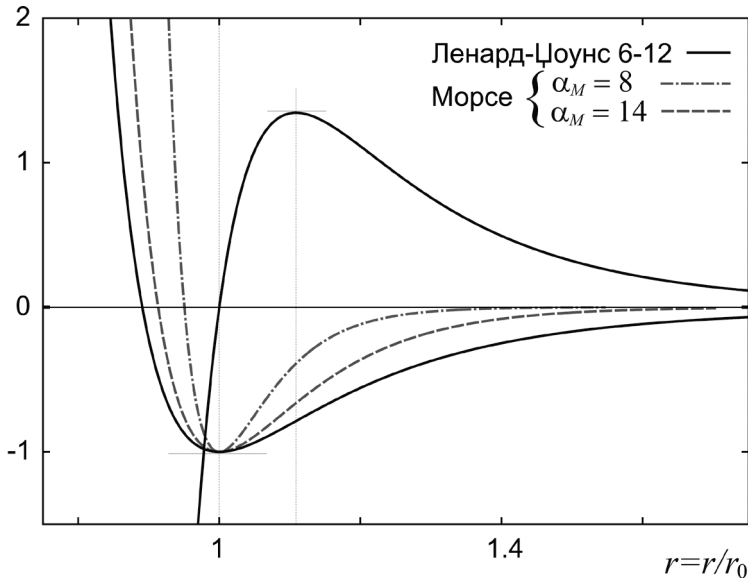
$$\phi(\bar{r}_{ij}) = \varepsilon_M \left\{ \exp[-2\alpha_M(\bar{r}_{ij} - 1)] - 2 \exp[-\alpha_M(\bar{r}_{ij} - 1)] \right\}$$

Подесиви параметар  $\alpha_M$  дефинише нагиб одбојног зида (односно, ширину потенцијалне јаме; слика 2.1) док је значење  $\bar{r}_{ij} = (r/r_0)_{ij}$  непромењено. Параметри  $\varepsilon_M$ ,  $r_0$  и  $\alpha_M$  се, као и у претходном случају, уобичајено одређују подешавањем особина материјала које су најрелевантније за проблем који се анализира. Морсов потенцијал је изворно развијен за ковалентне везе које су снажно просторно оријентисане па међуатомски растојање није довољно за реалистичан опис међудејства (Marenic et al., 2012).

Одређени типови пар-потенцијала су конструисани са ограниченим циљем да репродукују одбојне интеракције међу честицама, док привлачне интеракције могу да буду описане неким другим типом интеракције. Веома користан потенцијал, који се користи за ову сврху, је Борн-Мејеров (Born-Mayer) потенцијал развијен за моделирање главних карактеристика одбојних међудејстава између јонских кристала (са максимално попуњеним енергетским нивоима електронског омотача) карактеристичним за керамичке материјале. Функционални облик овог потенцијала је

$$\phi(r_{ij}) = A_b \exp(-B_b r_{ij}) \quad (2.6)$$

где су  $A_b$  и  $B_b$  подесиви параметри. Овај одбојни потенцијал је коришћен у познатом Бакинговом (Buckingham) потенцијалу (Marenic et al., 2012). Мада је облик међуатомског потенцијала са инверзним степеном (2.5) најчешће коришћен у хеуристичким студијама, резултати квантно-механиких прорачуна, као што је већ било речи, дају предност експоненцијалном облику, што је касније коришћено и у неким честичним моделима (5.4).



**Слика. 2.1.** Шематски приказ пар-потенцијала са јединичном дубином потенцијалне јаме: Ленард-Џоунсов 6-12 са одговарајућом силом (пуна црна линија), Морсов за две вредности параметра  $\alpha_M$  који дефинише ширину потенцијалне јаме.

Једноставни потенцијали омогућавају и директан начин процене модула еластичности материјала коришћењем израза

$$E = \frac{1}{r_0} \left( \frac{d^2 \phi}{dr^2} \right) \Big|_{r=r_0} \quad (2.7a)$$

који следи из његове физичке основе (Ashby and Jones, 1996). Ешби и Џоунс су такође дали и израз за процену теоријске затезне чврстоће

$$\sigma_m = \frac{1}{r_0^2} \left( \frac{d\phi}{dr} \right) \Big|_{r=r_D} \quad (2.7b)$$

у коме  $r_D$  означава тзв. растојање одвајања дефинисано са максималном вредношћу међуатомске силе  $df(r)/dr = 0$ , односно, тачком превоја међучестичног потенцијала  $d^2\phi(r)/dr^2 = 0$ .

Основна сврха сваког међуатомског потенцијала је да исправно репродукује најистакнутије карактеристике атомских веза. Стога, треба увек имати на уму да су пар-потенцијали „првобитно развијени са циљем описивања атомске интеракције у системима у којима су ови облици потенцијала физички оправдани” (Vitek, 1996) и одупрети се искушењу да се користе непромишљено зарад њихове једноставности.

**Табела 2-1.** Поређење изабраних особина три метала и Ленард-Џоунсовог система.  $E_{coh}$  и  $E_{vac}$  су, редом, кохезивна енергија и енергија формирања ваканција,  $k_B$  је Болцманов (Boltzmann) коефицијент, а  $T_m$  је температура топљења (Ercolessi, 1997).

особина	Cu	Ag	Au	LJ
$E_{coh}/k_B T_m$	30.	28	33	13
$E_{vac}/E_{coh}$	0.33	0.36	0.25	$\approx 1$
$C_{1122}/C_{2323}$	1.5	1.9	3.7	1

Ови поједностављени потенцијали не могу тачно да опишу међуатомске интеракције у сложенијим системима (Ercolessi et al., 1988) као што су, на пример, снажно ковалентни системи (попут SiC), највећи број керамика које карактеришу потпуно попуњене орбитале, метали које карактерише де-локализовано „море електрона” (табела 2-1), или полупроводници. Ипак, у МД симулацијама од 50-их до 80-их година прошлог века готово искључиво су коришћени пар-потенцијали. Значајан напредак је остварен током 1980-их са развојем вишеатомских потенцијала за метале заснованих на концепту густине (или координације) (нпр., Daw and Baskes, 1984). Главно физичко својство које је требало моделирати је да, као последица Паулијевог (Pauli) принципа искључења, међуатомске везе постају слабије када су угњежене у „згуснуто” локално окружење. На пример, код метала сви електрони нису локализовани на сферним облацима око језгра (као што је случај код племенитих гасова), а валентни електрони се често деле међу многим јонима. Сходно томе, сила која делује на атом не зависи само од растојања које одваја његово језгро од језгра суседа, него и од локалне атомске густине (слика 2.2). Другим речима, силе између јона су по карактеру зависне од више тела (“many-body in character”), уместо да буду једноставно пар-по-пар адитивне, рефлектујући слабљење међуатомских веза у „окружењу великог броја”. Од тог времена конструисано је мноштво различитих потенцијала са намером да репродукује најважније карактеристике понашања материјала одржавајући функционални облик потенцијала што једноставнијим. Фокус је обично на привлачном делу потенцијала (Ercolessi et al., 1988). Сходно томе, развијени су, тзв., потенцијали модела лепка (“glue model”), видети, нпр., (Mishin et al., 1999) и тамо наведене референце. Међу овим потенцијалима највећу популарност је стекао тзв. потенцијал усађеног атома (“embedded atom potential”) развијен на основу ефективног описа средине у циљу апроксимације интеракције између јона у металима. Општи облик свих потенцијала модела лепка је

$$\phi(r_{ij}, \rho_i) = \sum_i \left[ \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) + \psi(\bar{\rho}_i) \right], \quad \bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}). \quad (2.8)$$

Међусобно се разликују само по облицима функција:  $\phi$  (двоатомски члан који зависи искључиво од атомског растојања),  $\psi$  (допринос који зависи од густине – енергије усађивања неопходне да се уметне  $i$ -ти атом у позадину електронске густине  $\bar{\rho}_i$ ), и  $\rho_{ij}$  (функција атомске густине) (Mishin et al., 1999). Доприноси међудејстава између више тела (“many-body contributions”) одражавају нелинеарност члана који зависи од густине. Нпр., Холиан и сарадници (Holian et al., 1991) су одабрали енергију усађивања у следећем облику

$$\psi(\bar{\rho}_i) = (1 - \chi_{\text{eam}}) E_{\text{coh}} e \bar{\rho}_i \ln(\bar{\rho}_i)$$

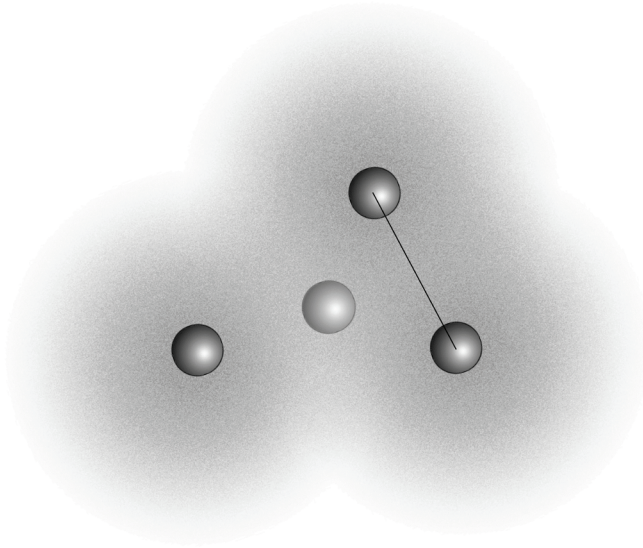
где тежински параметар  $0 < \chi_{\text{eam}} < 1$  дефинише релативне уделе два доприноса у (2.8<sub>1</sub>) а  $e$  је Ојлеров (Euler) број и одговара реципрочној вредности  $\bar{\rho}_i$  при нормалној густини. Кохезивна енергија је у претходном изразу дефинисана са  $E_{\text{coh}} = d(d+1)\varepsilon/2$ , где  $d(d+1)$  представља број најближих суседа у густо пакованом  $d$ -димензионалном систему, а  $\varepsilon$  дубину потенцијалне јаме. Локалну тежинску функцију су дефинисали на следећи начин

$$\rho(r_{ij}) = \rho(r) = \frac{1}{d(d+1)e} \left( \frac{r_{\text{max}}^2 - r^2}{r_{\text{max}}^2 - r_0^2} \right) = \frac{\bar{\rho}_0 \varepsilon}{2E_{\text{coh}}} \left( \frac{r_{\text{max}}^2 - r^2}{r_{\text{max}}^2 - r_0^2} \right)$$

где је  $r_{\text{max}}$  гранична вредност међуатомског растојања после кога тежинска функција има вредност нула (према нотацији коришћеној у поглављу 2.2.1,  $r_{\text{max}} \equiv r_{\text{cut}}$ ), а при нормалној густини у неоптерећеној, референтној конфигурацији ( $r = r_0$ ),  $\bar{\rho}_i = \bar{\rho}_0 = 1/e$ . (Индекси који означавају атоме изостављени су ради сажетијег писања.)

Разлике између двоатомских пар-потенцијала и вишеатомских потенцијала су детаљно размотрене у литератури (нпр., Holian et al., 1991; Gullet et al., 2004). Потенцијал усађеног атома (“EAM”) изузетно је много коришћен за моделирање жилавих (дуктилних) материјала, нарочито метала, мада га, попут много једноставнијих пар-потенцијала, прати глас да је употребљив само за квалитативно анализирање физичких појава. Ово због тога што су уз све предности, нарочито у односу на пар-потенцијале, препозната два његова основна недостатка (Mishin et al., 1999). Први недостатак је системски: мада веома успешно моделира физичку природу металних веза овај потенцијал укључује одређене апроксимације које га чине недовољним у одређеним ситуацијама (Voter, 1994). Други недостатак је технички и односи се на слабе стране традиционалне процедуре развоја ових потенцијала, недостатке процеса

одређивања параметара потенцијала на основу доступних експерименталних података. Овај други, технички, недостатак често не омогућава да се извуче максимум у оквирима омеђеним системским ограничењима.



**Слика. 2.2.** Потенцијал усађеног атома (“EAM”): енергија централног атома дефинисана је збиром пар-чланова између суседа и функционалом који зависи од комбиноване густине суседа (Gullet et al., 2004). Паулијев принцип искључења подразумева да када електронски облаци атома почну да се преклапају, енергија система почиње драматично да се увећава јер два електрона не могу да заузимају исто квантно стање.

Потенцијал који је од посебног интереса за моделирање полупроводничких материјала (као што је SiC) је Терсофов потенцијал (Tersoff, 1988). Овај међуатомски потенцијал има општи облик

$$\phi = \frac{1}{2} \sum f_C(\mathbf{r}_{ij}) [a_{ij} f_R(\mathbf{r}_{ij}) + b_{ij} f_A(\mathbf{r}_{ij})] \quad (2.9)$$

Множитељ  $f_C$  је глатка функција одсецања (“cutoff function”) која варира између 1 и 0, док функције  $f_R$  и  $f_A$  представљају одбојне и привлачне делове пар-потенцијала и често се, по угледу на Морсов потенцијал, бирају у облику експоненцијалних функција. Овај потенцијал је представљао основу за развој емпиријских међуатомских потенцијала за широк спектар материјала. Релативно добра преносивост га је чинила нарочито погодним за случајеве у којима је база познатих својстава материјала веома ограничена.



Даља разматрања предности и мана међуатомских емпиријских потенцијала и њихових функционалних облика превазилазе циљеве овог сажетог прегледа а могу се наћи у многим референцама (нпр., Yip, 2005; и многе друге). Последњих двадесетак година, емпиријски потенцијали се развијају циљано – за специфичне материјалне системе са опсегом применљивости на уму. Крајњи тест сваког емпиријског потенцијала представља његова успешност у симулацији особина од интереса. Међутим, чини се прикладно да се заврши овај кратак преглед додајући да се у непрестаном надметању између софистицираних и просторно већих дискретних модела, под ограничењима задатим рачунарским могућностима, ови последњи још увек сматрају важнијима по питању смислености резултата. Другим речима, опште је привађено да је за симулације оштећења и лома упутније повећати величину дискретног система а поједноставити потенцијал, него учинити супротно. Овај тренд наметнуо је развој паралелног процесирања (Plimpton, 1995) без кога се данас не могу ни замислити МД симулације у најсавременијим истраживањима. Са брзим развојем рачунарских могућности, доступност квалитетних емпиријских потенцијала се све више намеће као један од главних предуслова за ширење области примењивости МД симулација на реалне квантитативне анализе понашања и особина стварних материјала.

### 2.1.1 Скраћивање домета потенцијала

Емпиријски потенцијали приказани у поглављу 2.1 имају неограничен домет. У МД симулацијама је устаљени обичај да се успостави растојање одсецања (скраћивања),  $r_{cut}$ , и не узимају у обзир међуатомске интеракције за међуатомска растојања која га превазилазе јер су одговарајуће силе занемарљиве. Ово занемаривање међуатомског дејства у опсегу потенцијаловог асимптотског приближавања нули (слика 2.1) доводи до поједностављивања програма и огромних уштеда у рачунарским ресурсима због драстичног смањивања броја парова атома који су у међудејству.

Међутим, једноставно скраћивање потенцијала би довело до новог проблема: кад год би међусобно растојање између пара атома „прешло” преко растојања одсецања дошло би до мале, скоковите промене енергије система. Велики број оваквих догађаја могао би, са једне стране, да има утицаја на закон одржања енергије, а са друге, да утиче на физику суптилних микропроцеса који зависе од детаља локалног енергетског стања. Због тога се ограничавање домета потенцијала најчешће врши глатким прелазом у привлачном опсегу, нпр., коришћењем кубног сплајна. За илустрацију ће бити приказан приступ Холиана

и коаутора (Holian et al., 1991) у коме се уобичајени облик Ленард-Джоунсовог потенцијала (2.5) прекида на  $r_{\text{spl}} \approx 1.109 r_0$  и замењује кубним сплајном у  $r^2$

$$\phi_{\text{spl}}(r) = -a_2 (r_{\text{cut}}^2 - r^2)^2 + a_3 (r_{\text{cut}}^2 - r^2)^3$$

који досеже нулу у  $r_{\text{cut}}$ . Параметри сплајна

$$r_{\text{cut}}^2 = r_{\text{spl}}^2 \left\{ 5 - 5 \sqrt{1 - \frac{1}{25} \left( 9 - \frac{24 \phi_{\text{LJ}}}{r_{\text{spl}} \phi'_{\text{LJ}}} \right)} \right\}$$

$$a_2 = \frac{5r_{\text{spl}}^2 - r_{\text{cut}}^2}{8r_{\text{spl}}^3 (r_{\text{cut}}^2 - r_{\text{spl}}^2)} \phi'_{\text{LJ}},$$

$$a_3 = \frac{3r_{\text{spl}}^2 - r_{\text{cut}}^2}{12r_{\text{spl}}^3 (r_{\text{cut}}^2 - r_{\text{spl}}^2)^2} \phi'_{\text{LJ}}$$

изабрани су тако да обезбеђују континуитет координате, нагиба и закривљености (C0, C1, и C2) у тачки пресека ( $r = r_{\text{spl}}$ ):  $\phi_{\text{LJ}} = \phi_{\text{spl}}$ ,  $\phi'_{\text{LJ}} = \phi'_{\text{spl}}$  и  $\phi''_{\text{LJ}} = \phi''_{\text{spl}}$ . Пошто је описани кубни сплајн у  $r^2$  уместо у  $r$ , приликом извршења програма су избегнуте операције кореновања и дељења са  $r$ , док су разлике у изгледу функције практично неуочљиве (Holian et al., 1991).

Физичке величине су, наравно, донекле под утицајем овога скраћивања опсега потенцијала. По потреби, могу бити процењени ефекти овога утицаја и унесена одговарајућа исправка (нпр., Ercolessi, 1997; Rapaport, 2004); нпр., кроз допринесе вредностима кохезивне енергије и укупног притиска. Ефекте скраћивања домета потенцијала није тако лако проценити код геометрија које укључују слободне површине, због поремећене симетрије, те могу имати израженији утицај на вредност површинске енергије. Све у свему, евентуална процена ових ефеката је проблем специфичан за сваку примену.

## 2.2 Израчунавање макропараметара стања система

Везу између микроскопског понашања и термодинамике представља статистичка физика. Да би се, у МД симулацијама, израчунао одређени физички параметар стања макроскопског система, неопходно је да буде дефинисан у функцији положаја и количине кретања материјалних честица дискретног система. Строго узев, параметри стања дискретног система могу бити повезани са концептима континуума (попут компоненти тензора еластичности, напона, односно температуре и оштећења) само када је термодинамички систем: (i) довољно велики да буде статистички хомоген, и (ii) или у равнотежи или довољно близу равнотеже (мерено Дебориним бројем (Крајсиповић, 1996)). Уколико ови предуслови нису испуњени значење концепата континуума постаје спорно.

### 2.2.1 Напон, релативна деформација и ефективна чврстоћа

Општи израз за тензор напона у околини дате честице у материјалном систему који се налази у равнотежном стању може да се добије развојем еластичне деформационе енергије система у Тејлоров ред (Hoover, 1985).

$$U = U_0 + \frac{1}{1!} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \varepsilon_{\alpha\beta} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta} \partial \varepsilon_{\gamma\delta}} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \dots = U_0 + \sigma_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \dots \quad (2.10)$$

Математичка релација (2.10), строго узев, важи само на ниским иницијалним температурама када су померања атома из равнотежног положаја (а тиме и одговарајуће брзине подрхтавања) релативно мале. У равнотежном стању, када су резултујуће силе које делују на било коју честицу система (2.2б<sub>2</sub>) једнаке нули (односно, свака честица лежи у некој потенцијалној јами), систем мора да буде стабилан за случај деловања спољњег оптерећења у виду малог, хомогеног тензора релативне деформације  $\varepsilon_{\alpha\beta}$ . Линеарни (други) члан у Тејлоровом реду (2.10) представља тензор напона, што је општа термодинамичка релација независна од применљивости Хуковог закона (Landau and Lifshitz, 1970). У вези са изразом за потенцијалну енергију система (нпр., кристалне решетке) (2.1), уколико међуатомска дејства могу успешно да се апроксимирају са пар-потенцијалом централне силе  $\phi = \phi(r_{ij})$  (2.1б), компонента тензора напона је

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{(r_{ij})_{\alpha} (r_{ij})_{\beta}}{|r_{ij}|} = -\frac{1}{2V} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} f_{ij} \frac{(r_{ij})_{\alpha} (r_{ij})_{\beta}}{r_{ij}} \quad (2.11)$$

где је  $V$  запремина осредњавања, а  $(r_{ij})_\alpha$  и  $(r_{ij})_\beta$  одговарајуће ( $\alpha$  и  $\beta$ ) пројекције вектора међусобног положаја  $r_{ij}$ , тим редом (Vitek, 1996; Egami, 2011). Важно је да се уочи да напон дефинисан изразом (2.11) дефинисан у односу на стање статичке равнотеже, што имплицира да је, ригорозно узев, применљив само за статичку (односно, квази-статичку) деформацију где је резултантна сила која делује на сваки атом (2.10) једнака (или „довољно блиска“) нули. Насупрот томе, динамичка деформација подразумева простирање таласа и, да би израз (2.11) могао да се користи, мора да буде прећутно претпостављено да неравнотежни процес може да се представи са сукцесивним низом равнотежних процеса (стања), што је концепт рутински коришћен из нужде у термодинамици неравнотежних процеса. Концепт примене (2.11), илустрован је примером промене средњег нормалног напона (притиска) током времена забележени на четири мерна места на слици 2.6а.

Квадратни (трећи) члан у Тејлоровом реду за еластичну деформациону енергију система (2.10) дефинише тензор еластичности

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left( \frac{d^2\phi}{dr_{ij}^2} - \frac{1}{r_{ij}} \frac{d\phi}{dr_{ij}} \right) \frac{(r_{ij})_\alpha (r_{ij})_\beta (r_{ij})_\gamma (r_{ij})_\delta}{r_{ij}^2} = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left( \frac{f_{ij}}{r_{ij}} - \frac{df_{ij}}{dr_{ij}} \right) \frac{(r_{ij})_\alpha (r_{ij})_\beta (r_{ij})_\gamma (r_{ij})_\delta}{r_{ij}^2} \quad (2.12)$$

За сложеније међутомске реакције од оних описаних пар-потенцијалима – попут потенцијала усађених атома (2.8) – изрази (2.11) и (2.12) се усложњавају како би узели у обзир и кохезивни допринос укупној енергији система (нпр., Vitek, 1996).

Идеална 2Д решетка је еквивалентна 3Д континууму у условима раванског стања деформација (Landau and Lifshitz, 1970). Стога, изрази за Поасонов коефицијент и модул еластичности

$$\nu = \frac{C_{1122}}{C_{1111}}, \quad E = \frac{C_{1111}^2 - C_{1122}^2}{C_{1111}} \quad (2.13a)$$

изотропног материјала у функцији две произвољно изабране компоненте тензора еластичности могу бити изведене коришћењем одговарајућих израза за раванско стање деформација (Nemat-Nasser and Hori, 1993). У случају међудејстава централним силама важи релација  $C_{1111} = 3 C_{1122}$  те се изрази за Поасонов коефицијент и модул еластичности редукују на

$$\nu = 1/3, \quad E = 8 C_{1111}/9 \quad (2.13b)$$

Компоненте тензора релативне деформације израчунавају се на основу одступања тренутне конфигурације мреже у односу на референтну конфигурацију у почетном тренутку. Пошто су подаци о положају свих атома познати у сваком тренутку (дакле, и у тренутној и у почетној конфигурацији), израчунавање компоненти (релативне) деформације је једноставно. На пример, компоненте левог Коши-Гриновог (Cauchy-Green) тензора деформације везане за атом  $i$  раванског система се обично дефинишу (нпр., Buehler et al., 2003) на следећи начин

$$b_{\alpha\beta} = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^6 (\bar{r}_{ij})_{\alpha} (\bar{r}_{ij})_{\beta}, \quad (\bar{r}_{ij})_{\alpha} = (r_{ij})_{\alpha} / r_0 \quad (2.14a)$$

Треба запазити да је, за разлику од дефиниције напона (2.11), виријална једначина (2.14a) валидна тренутно у времену и простору, тј. не захтева временско осредњавање.

У случају изузетно великих деформација праћених великим транспортом масе (попут деформација жилавих пројектила карактеристичних за фрагментацију) упутније је коришћење природне, Сет-Хилове (Seth-Hill), дефиниције релативне деформације

$$\varepsilon(t) = \int_{L_0}^{L(t)} \frac{dL}{L} = \ln \frac{L(t)}{L_0} \quad (2.14б)$$

за израчунавање подужних и попречних нормалних релативних деформација. У изразу (2.14б), природна релативна деформација је дефинисана на уобичајени начин као количник промене димензија „виртуелне мерне траке” и тренутне величине одговарајуће димензије.

### 2.2.2 Температура

Прорачун температурних поља током динамичких процеса је од фундаменталног значаја за анализу и моделирање. Као што је већ поменуто, ова потреба, нажалост, отвара нека суштинска питања везана за термодинамику неравнотежних процеса а у вези са основним термодинамичким (тачније, термостатичким) концептима попут ентропије и апсолутне температуре система који није у равнотежи. Неке термодинамичке теорије неравнотежних процеса постулирале су да класични термостатички концепти треба да се локално примењују у нехомогеним норавнотежним ситуацијама, јер „користан опис временски зависног неравнотежног понашања није могућ без неког рецепта за описивање тренутног стања система” (Hoover, 1985). Други су прибегли

дефинисању неравнотежне ентропије која се затим користи као потенцијал за извођење генерализоване температуре, различите од локалне равнотежне температуре (Jou and Casas-Vazques, 1992). С тим у вези треба се присетити Каленовог става (Callen, 1961) да су неравнотежне дефиниције ентропије засноване на несигурним премисама. Временом је постигнут консензус у погледу коришћења стандардне дефиниције температуре, познате из кинетичке теорије гасова, засноване на екипартиционој теореми која обезбеђује везу између просечне кинетичке енергије и температуре система честица. Према тој теореми сваки степен слободе доприноси  $k_B T/2$  унутрашњој енергији система одакле директно следи

$$T \equiv \frac{2}{3k_B} \left\langle \frac{m v^2}{2} \right\rangle \quad (2.15a)$$

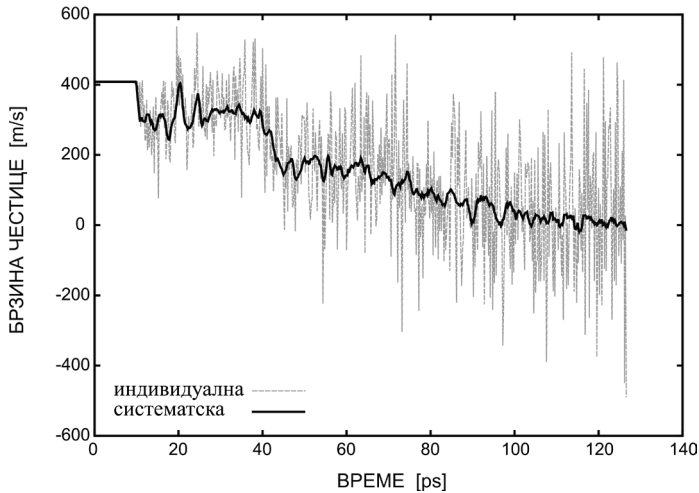
Дефиниција (2.15a) је чврсто утемељена у статистичкој механици пошто произилази из расподеле највеће вероватноће канонског ансамбла дате Болцмановом функцијом  $\exp[-H(\Gamma)/k_B T]$  (Hoover, 1985; Wannier, 1987). Дакле, израз (2.15a) прећутно подразумева да је посматрани ансамбл канонски, систем термички у равнотежен, а брзине честица расподељене у складу са Максвел-Болцмановом (Maxwell-Boltzmann) расподелом (Chandler, 1987) илустрованом на слици 2.8. Тако, термин „температура”, увек када је коришћен надаље у оквирима МД и сродних дискретних метода, подразумева „тренутну кинетичку температуру”. Ипак, треба имати у виду да „термодинамичка температура  $\equiv$  средња вредност тренутне кинетичке температуре у временском периоду одређене дужине у стању равнотеже система” представљају једине ригорозно дефинисане еквиваленте. Речима Холиана и коаутора (Holian et al., 1995), „у неравнотежним ситуацијама, тренутна кинетичка температура је једина смислена дефиниција”.

Температура је дефинисана (у 2Д простору) као

$$T_i = \frac{m_i}{2N_i k_B} \sum_{j=1}^{N_i} (v_{xj}^2 + v_{yj}^2) \quad (2.15b)$$

где  $m_i$  означава масу атома,  $N_i$  број атома који припада простору осредњавања, а  $k_B$  Болцманову константу. Такође,  $v_x$  и  $v_y$  су компоненте вибрационе брзине (брзине подрхтавања) (слика 2.3) добијене одузимањем брзине корелативног кретања ( $\bar{v}$  - пуна линија) од укупне брзине атома ( $v_T$  - испрекидана линија)

$$v_\alpha = v_{T\alpha} - \bar{v}_\alpha \quad (\alpha = x, y) \quad (2.16)$$



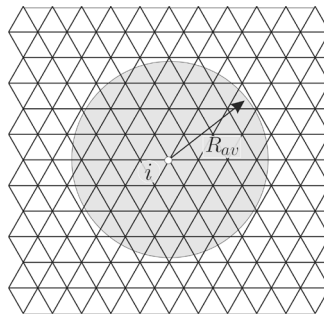
**Слика. 2.3.** Типична промена брзине честица забележена током симулације удара витког пројектила брзином 0.408 km/s (1.2 Mach). Пуна линија представља систематску брзину (тзв., корелативног) кретања док испрекидана приказује укупну брзину индивидуалног атома. Разлика између укупне брзине и њеног систематског дела даје вибрациони део брзине (2.16) који дефинише термалну енергију насумичног подрхтавања представљену апсолутном температуром (2.15) (Mastilovic, 2016).

Укупна брзина добија се директно решавањем Њутнових једначина кретања (2.2), док се брзина корелативног кретања може израчунавати просторним осредњавањем укупних брзина свих атома који припадају одређеној осредњавајућој површини  $\bar{v} = \langle v \rangle$ . Горе наведени изрази адекватни су подели кретања молекула, у кинетичкој теорији гасова, на „насумични” и „систематски” део (Fung, 1977, стр. 4). Први део, брзина подрхтавања, дата изразом (2.16), не доприноси резултантној количини кретања али поседује коначну кинетичку енергију која се идентификује са топлотном енергијом и повезана је са апсолутном температуром преко (2.15); то је топлотна (термичка) брзина  $\sqrt{3k_b T/m}$  из (2.15a). С друге стране, систематски део (брзина корелативног кретања дефинисана као локална средња вредност) доприноси систематском кретању делова материје на начин како је то осмишљено у механици континуума.

Тренутна кинетичка температура, израчуната коришћењем израза (2.15) и (2.16), је осредњена и у времену и у простору. У 2Д симулацијама, за подручје осредњавања се обично узима исти кружни регион (осенчен на слици. 2.4) који је претходно коришћен за израчунавање брзине корелативног кретања (2.16). Према томе, сваки чвор у мрежи представља и центар подручја осредњавања полупречника  $R_{av}$  који карактеришу одговарајућа брзина корелативног кретања и температура добијених осредњавањем у оквиру наведеног подручја. Величина осредњавајућег подручја (крuga/лопте у 2Д/3Д) је резултат компромиса између контрадикторних захтева за што је могуће већим статистичким узорком

и најмањом могућом резолуцијом прорачуна (мерења). Осетљивост историје промене температуре на величину подручја осредњавања илустрована је у (Mastilovic and Krajinovic, 1999c). Пример распоређивања подручја осредњавања, у којима се величина температуре користи не само за добијање температурног поља (2.5) него и за праћење промене температуре у времену (2.4б), приказан је на слици 2.5 за случај удара витког пројектила равне главе у крути зид (тзв., Тејлоров балистички тест; Taylor, 1948). Кружна подручја осредњавања, која играју улогу мерних трака, током деформације узорка прате кретање атома на који су центриране. Уколико се током деформације атоми на које су површине осредњавања центриране (нпр., атом  $i$  на слици 2.4) приближе ивици деформисаног објекта, може да дође до непотпуне попуњености подручја осредњавања што има различите последице за различите параметре макростања (у зависности од њихове дефиниције; (2.11)-(2.15)) што треба пажљиво испитати у сваком конкретном случају. Детаљи овог разматрања за случај симулације Тејлоровог балистичког теста илустрованог сликама 2.5-2.7 могу се наћи у (Mastilovic, 2015). Примери промене у времену притиска (средњег нормалног напона) и температуре приказани су на слици 2.6 за четири мерне површине означене на слици 2.5.

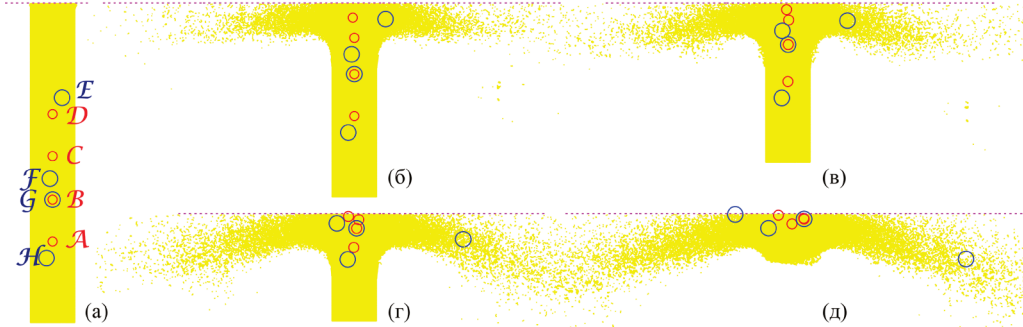
На крају, у изабраним временским тренуцима може да се забележи и тренутни изглед поља макроскопске величине стања, што је илустровано на слици 2.7 на примеру апсолутне температуре при МД симулацији Тејлоровог балистичког теста. За потребе приказивања поља просторне расподеле макропараметара стања, површине осредњавања (слика 2.4) се центрирају на *све* атоме модела ( $i = 1, N_{at}$ ), односно, макропараметри стања се израчунавају у свакој тачки.



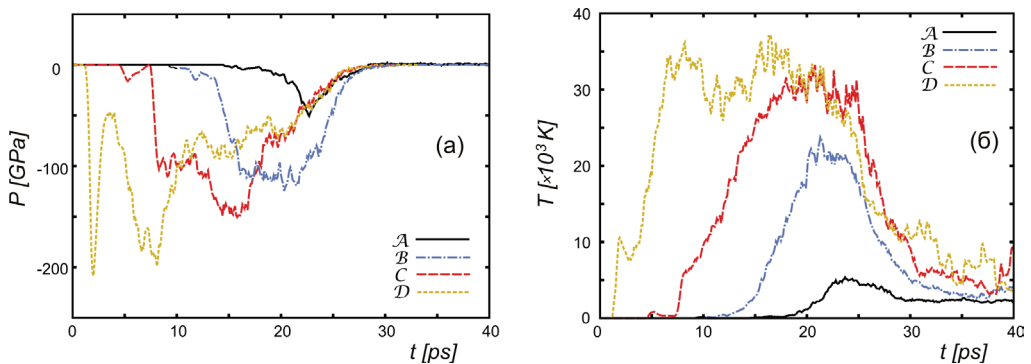
**Слика 2.4.** Површина (у општем случају, запремина) осредњавања полупречника  $R_{av}$  за израчунавање макроскопских параметара стања у МД симулацијама (виртуелни сензор). (Преузето из референце (Krajinovic and Mastilovic, 1999) са допуштењем издавача. Copyright (1999) by Elsevier).



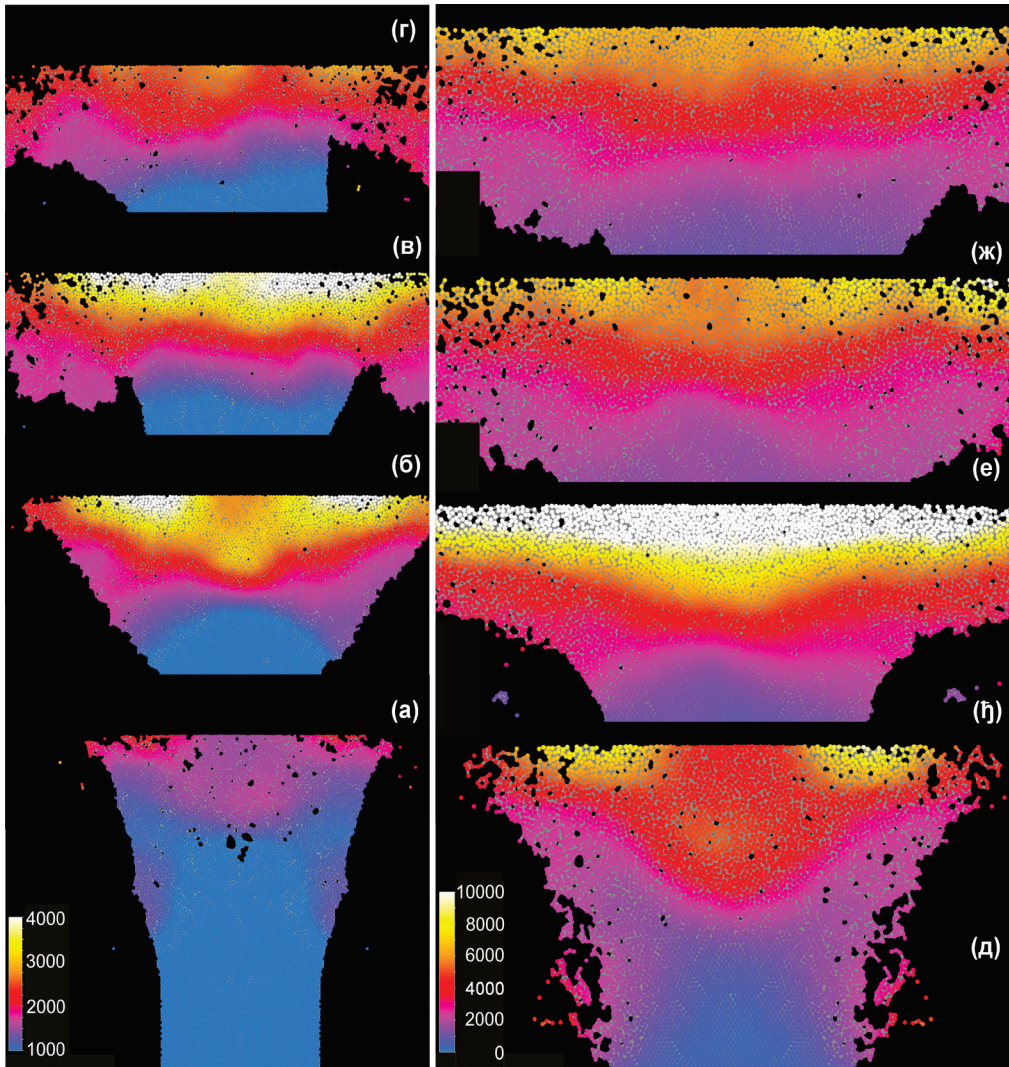
Детаље наведених поља могуће је визуализовати и преко изокривних линија које спајају тачке поља са истим вредностима макроскопског параметра стања (нпр., изотерме су приказане у (Mastilovic, 2016)). Сlike попут 2.6 и 2.7 омогућавају детаљну анализу временских и просторних градијената промене макроскопских параметара стања.



**Слика 2.5.** Секвенца деформисаних конфигурација нанопроектила приликом удара у крути зид брзином  $v_{\text{imp}} = 7 \text{ km/s}$  са означеним положајима осам површина осредњавања (виртуелних мерних трака) коришћених за израчунавање макропараметара стања: (a) 0.2 ps, (б) 6 ps, (в) 10 ps, (г) 12 ps, (д) 13 ps. Мање (црвене) површине осредњавања означене  $\mathcal{A}$ - $\mathcal{D}$  постављене су дуж уздужне осе симетрије док су веће (плаве) површине осредњавања означене  $\mathcal{E}$ - $\mathcal{H}$  померене за мало растојање од уздужне осе симетрије са изузетком  $\mathcal{G}$  која је центрирана на исти атом као и  $\mathcal{B}$  ради испитивања ефекта величине површине осредњавања. (Преузето из референце (Mastilovic, 2015) са допуштењем издавача. Copyright (2015) by Springer).



**Слика 2.6.** Примери промене (a) притиска (средњег нормалног напона) и (б) температуре током времена забележени на четири мерна места  $\mathcal{A}$ - $\mathcal{D}$  равномерно распоређена дуж уздужне осе симетрије нанопроектила при брзини удара  $v_{\text{imp}} = 4 \text{ km/s}$ . Историје промене притиска откривају познате облике компресионог таласа (нарочито подручја осредњавања  $\mathcal{B}$  и  $\mathcal{C}$  које се налазе око средине пројектила те резултати нису контаминирани површинским ефектима) (Mastilovic, 2016).



**Слика 2.7.** Примери промена температурног поља током симулације Тејлоровог балистичког теста (удар витког пројектила у крути зид) при брзинама удара  $v_{\text{imp}} = 0.7 \text{ m/s}$  (лева страна; индивидуални атоми су замагљени) и  $v_{\text{imp}} = 1.5 \text{ km/s}$  (десна страна; индивидуални атоми су истакнути). Сlike одговарају следећим временским тренуцима и бројевима фрагмената: (а) (10 ps, 10), (б) (20 ps, 11), (в) (50 ps, 84), (г) (100 ps, 397); односно, (д) (5 ps, 23), (ђ) (15 ps, 168), (е) (20 ps, 258), и (ж) (50 ps, 1318). Скала вредности на тумачу се односи на апсолутну температуру у К. Највише вредности температуре (бела) у танком контактном слоју указују на његово топљење што има важне последице на коефицијент контактнoг трења (Mastilovic and Krajcinovic, 1999b).

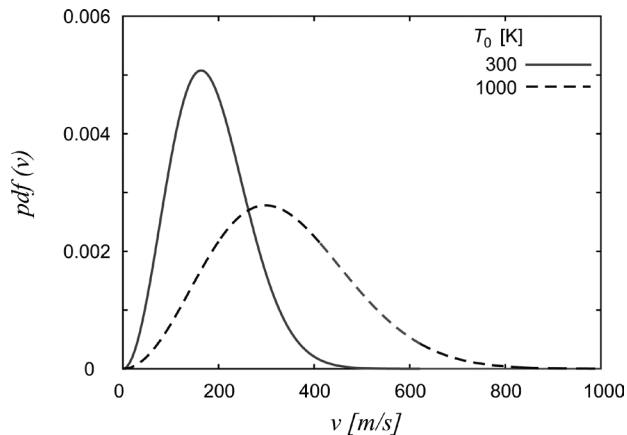
### 2.2.2.1 Термичка иницијализација система на жељену почетну температуру

Дефинисање почетних и граничних услова неопходних за извођење МД симулације подразумева дефинисање почетних положаја и брзина свих атома система. У случају симулација деформисања чврстог тела, дефинисање почетних положаја се своди на дефинисање координата атома у, најчешће, Декартовом (Descartes) правоуглом координатном систему у оквиру, нпр., одговарајуће кристалне решетке или аморфне конфигурације. Међутим, почетне вибрационе брзине се, уопштено узев, дефинишу одабиром интензитета брзина за сваки атом из Максвел-Болцманове расподеле за жељену почетну температуру узорка ( $T_0$ ) док се правци брзина додељују насумично.

Максвел-Болцманова расподела интензитета брзина подрхтавања, обезбеђује опсег вредности који се користи за одабир почетних услова у погледу интензитета брзина атома. Ова расподела даје густину вероватноће („probability density function“) за атоме са интензитетом брзине  $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$  (за 2Д проблеме) и има облик

$$pdf(v) = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T_0} \right)^{3/2} v^2 \exp\left( -\frac{m v^2}{2k_B T_0} \right) \quad (2.17)$$

Примери Максвел-Болцманове расподеле интензитета брзина за тунгстен (W) илустровани су на слици 2.8, за две различите температуре. Као што се види, расподела није симетрична па је просечна вредност интензитета брзине



**Слика 2.8.** Максвел-Болцманове расподеле интензитета брзина подрхтавања за тунгстен ( ${}_{74}\text{W}$ ) за температуре 300 К и 1000 К.

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T_0}{\pi m}} \quad (2.18a)$$

увек већа од највероватније вредности (која одговара максимуму криве расподеле)

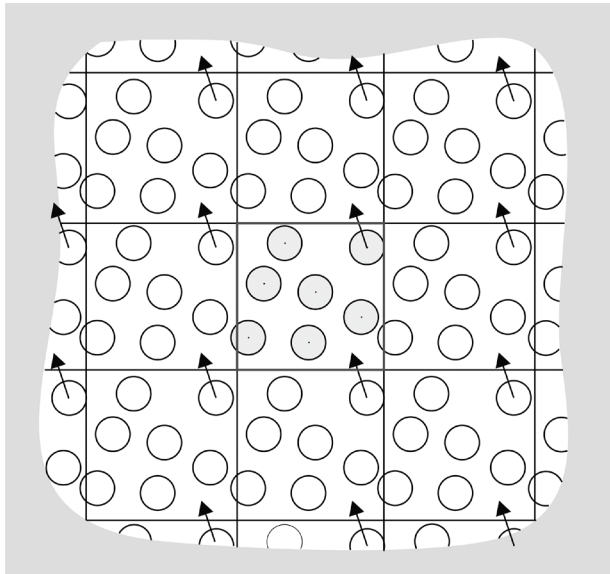
$$v_m = \sqrt{\frac{2k_B T_0}{m}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \langle v \rangle. \quad (2.18b)$$

### 2.3 Симулациона ћелија у молекуларној динамици

Сврха увођења симулационе ћелије са периодичним граничним условима је избегавање нежељених површинских ефеката. МД симулације које се могу обављати на стандардним радним станицама или рачунарима ограничене су на моделирање релативно малих система и краткотрајних физичких појава (нпр., видети табелу 2-3). Симулације квази-статичких оптерећења, које карактерише примена вештачког пригушења у циљу бржег уравнотежења система у сваком циклусу оптерећења, још су више просторно ограничене. Одзивом тако малих система могу да доминирају површински ефекти. Непожељни површински ефекти могу да се уклоне коришћењем периодичних граничних услова кад год је од интереса проучавање понашања запреминског материјала (Born and von Karman, 1912). Запремина (у 2Д проблемима, површина) периодичне ћелије репрезент је запреминског (“bulk”) материјала у смислу да се сматра да је исти састављен од периодичних ћелија окружених са свих страна својим егзактним репликама (Allen and Tildesley, 1987) као што је илустровано на слици 2.9.

Уклањање нежељених површинских ефекта коришћењем ових периодичних ћелија постиже се по цену увођења нефизичке периодичности у атомски систем. Нежељене последице укључују: (i) нереалистично крут одзив, (ii) неприродне таласне дужине у пољима решења, и (iii) сузбијање локализације до које би иначе могло доћи (Mesarovic and Padbidri, 2005). Још једна вештачка последица коришћења периодичних граничних услова је кршење принципа одржања момента количине кретања (Haule, 1992) чему је посвећена одговарајућа пажња у литератури (нпр., Li and Johnson, 1992; Mastilovic, 2008b). У циљу симулирања најопштијих услова оптерећивања, неопходно је бити у стању да се промени облик и величина периодичне ћелије и одржавају константне

вредности одређених параметара стања (нпр., температуре или притиска). Ограничење да облик периодичне ћелије мора да остане непромењен има негативан утицај на применљивост МД периодичне ћелије. На пример, МД симулација са периодичним ћелијама 2Д једноосног теста, употребом конвенционалних алгоритама, може да репродукује само веома рестриктивно, једнодимензионално стање деформација. Неколико алтернативних МД метода су предложене као потенцијална решења у серији радова (Parrinello and Rahman, 1981; Nose and Klein, 1983; Li and Johnson, 1992, 1993). У тим радовима, облик периодичне ћелије третира се као феноменолошка променљива подложна промени током времена.



Слика 2.9. Периодични гранични услови и симулациона ћелија.

У општем просторном случају, периодична ћелија је паралелопипед, једнозначно описан са три вектора  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ , и  $\mathbf{c}$ , који се простиру дуж три ивице ћелије и могу бити различитих интензитета и произвољних оријентација. Положаји и брзине атома у периодичној ћелији се нормализују са матрицом  $\hat{h}$  на следећи начин:  $\mathbf{r}_i = \hat{h} \mathbf{s}_i$  и  $\dot{\mathbf{r}}_i = \hat{h} \dot{\mathbf{s}}_i$ , где је  $\hat{h} = \{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}\}$  а  $\mathbf{s}_i = \{\xi_i, \eta_i, \zeta_i\}$  ( $0 \leq \xi_i, \eta_i, \zeta_i \leq 1$ ). Ради сажетијег писања, означавање вектора ће бити изостављено у наставку овога подпоглавља. Динамика ћелије је у потпуности дефинисана Лагранжијаном следећег облика (Parrinello and Rahman, 1981)

$$\Lambda_{PR} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{s}}_i^T M \dot{\mathbf{s}}_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \phi(r_{ij}) + \frac{1}{2} \mathcal{W} \text{Tr}(\dot{\hat{h}}^T \dot{\hat{h}}) - p_e \Omega_b \quad (2.19)$$

где је  $M = \hat{h} \hat{h}$  метрички тензор,  $p_e$  спољни притисак (средњи нормални напон),  $\Omega_b$  запремина периодичне ћелије, и  $\mathcal{W}$  фиктивна маса. Једначине кретања за временску еволуцију честица и периодичне ћелије могу бити изведени из Лагранжијана (2.19) у облику

$$\ddot{s}_i = - \sum_{j \neq i} \frac{1}{m_i} \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} (s_i - s_j) - M^{-1} \dot{M} \dot{s}_i \quad (i = 1, \dots, N) \quad (2.20a)$$

$$\mathcal{W} \ddot{\hat{h}} = (\pi - p_e \mathbf{1}) \sigma - h \Sigma \quad (2.20b)$$

где је  $\mathbf{1}$  јединична матрица, а  $\pi$  интерно генералисана матрица притиска која представља одзив система на примењени напон  $S$ . Симетрични тензор  $\Sigma$  је повезан са примењеним напоном  $S$  и равнотежном конфигурацијом ћелије. На основу израза (2.20b) следи да је динамика периодичне ћелије дефинисана неравнотежом између спољних и унутрашњих сила. Упркос обећавајућој формулацији динамике јединичне МД ћелије (2.19, 2.20), уочени су одређени проблеми приликом њеног коришћења који могу да доведу до не-физичких резултата. Најочигледнији међу њима су били немогућност очувања симетрије и обртање симулационе ћелије до кога долази због неодржања момента количине кретања (Li and Johnson, 1992). С обзиром да горе дефинисана МД Паринела и Рахмана није изведена из основних принципа, измене формулације (2.19, 2.20) су захтевале проверу одржања динамичких и структурних променљивих. Детаљи овога поступка доступни су у референци (Li and Johnson, 1992). Овде ће бити само поменута основна модификација Лагранжијана (2.19) заменом кинетичке енергије МД ћелије са  $\mathcal{W} \text{Tr}(\dot{\hat{h}}^T Q \dot{\hat{h}}) / 2$  где је  $Q$  линеарна функција од  $\hat{h} \hat{h}^T$  изабрана тако да елиминише зависност кинетичке енергије од избора МД ћелије. Ли и Џонсон су овако измењену формулацију Паринело-Рахманове МД, прво верификовали провером конвергенције и рачунањем различитих функција одзива Ленард-Џоунсовог система (са везама између најближих суседа) директно из флукуација а потом, користили за изучавање сложених термодинамичких и статистичко-механичких система (Li and Johnson, 1993). (Непотребно је наглашавати да је горе наведена техника приказана у изузетно сажетој форми; заинтересовани читалац мора да се окрене ка изворној литератури за детаљније упознавање са овом моћном МД техником.)

## 2.4 Термостатичка Нозе-Хуверова МД

У одсуству дисипативних сила, из једначина кретања класичне механике произилази одржање укупне енергије система што подразумева да код овога типа МД симулације израчуната температура система (2.15) може битно да варира током симулације. Значај могућности извођења симулација при константној температури, коју је непотребно образлагати, учинио је ову тему веома популарном међу истраживачима који се баве рачунском статистичком механиком, из чега је произашло обиље различитих алгоритама. Сви ови алгоритми за обезбеђивање сталне просечне температуре ансамбла честица користе модификацију Њутнових једначина кретања која је у овом сажетом прегледу илустрована Нозе-Хуверовим приступом.

Нозе-Хуверова термостатичка МД има теоријску основу у класичном термодинамичком концепту „повезивања“ термодинамичког система (у овом случају, конвенционалне МД ћелије) са топлотним резервоаром који осигурава сталну температуру ансамбла током симулације (Hoover, 1985; Holian et al., 1995). Самим тим дати ансамбл честица је, по дефиницији, канонски  $(\Omega, T, H)$ , за разлику од стандардне МД из које проистиче микроканонски  $(\Omega, E, H)$  ансамбл. Нозе-Хуверов модел користи класични концепт температуре (размотрено у потпоглављу 2.1.3) заснован на тренутној кинетичкој енергији система. Техника обезбеђивања термостатичких услова је типа интегралне повратне спреге у циљу ограничавања кретања атома. Додатни члан са убрзањем уметнут је у Њутнову једначину

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} - \mathcal{G}_H \xi_H \dot{\mathbf{r}}_i \quad (2.21a)$$

Динамичка променљива,  $\xi_H$ , мора да задовољи додатну једначину кретања

$$\dot{\xi}_H = \mathcal{G}_H \left( \frac{T}{T_0} - 1 \right) \quad (2.21b)$$

У изразу (2.21)  $\mathcal{G}_H$  је брзина спрезања честице са термичким резервоаром. Њутнова једначина кретања (2.2) следи из израза (2.21a) за  $\mathcal{G}_H = 0$ . Динамичка променљива  $\xi_H$  (позната и као променљива простирања топлоте) одржава непромењеним дугорочни просек кинетичке енергије, у исто време допуштајући колебање њене тренутне вредности (слика 2.10).

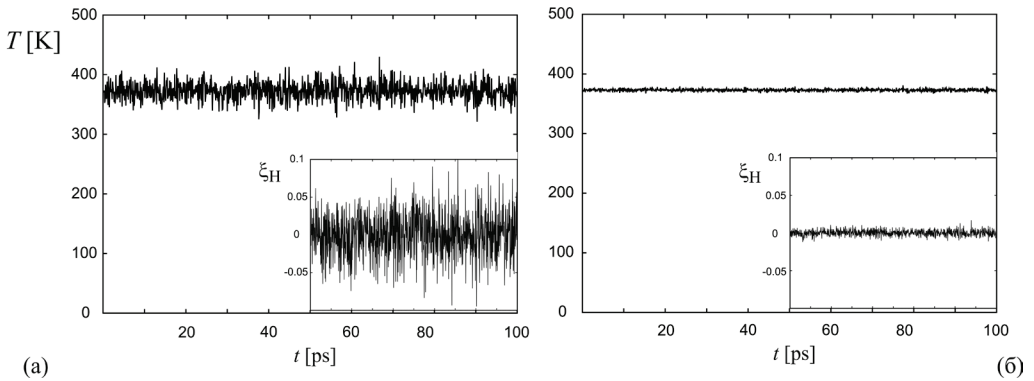
Нумеричка интеграција Нозе-Хуверових једначина кретања коришћењем Стормеровог алгоритма централних разлика (2.4) (Holian et al., 1990) своди се на следеће изразе

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(t - \delta t) + \delta t \dot{\mathbf{r}}(t - \delta t/2) + O(\delta t^3) \quad (2.22a)$$

$$\xi_H(t) = \xi_H(t - \delta t) + v \left[ \frac{T(t - \delta t/2)}{T_0} - 1 \right] \delta t + O(\delta t^3) \quad (2.22b)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t + \delta t/2) = \frac{1}{1 + \vartheta_H \xi_H(t) \delta t/2} \left\{ \dot{\mathbf{r}}(t - \delta t/2) \left[ 1 - \frac{1}{2} \delta t \vartheta_H \xi_H(t) \right] + \frac{\mathbf{F}(t)}{m} \delta t \right\} + O(\delta t^3) \quad (2.22c)$$

Детаљно разматрање ове методе је доступно у изворној референци (Holian et al., 1995). Суштина је да се коришћењем израза (2.19) обезбеђује да просечна температура остаје непромењена током симулације и поред тога што тренутне вредности температуре нужно флукутирају око просека (слика 2.10). Напреднија верзија термостата доступна је у референци (Nose, 2001).



**Слика 2.10.** Главни панел: Примери флукуација тренутне температуре у времену за константну средњу вредност 373 К у системима са бројем атома: (а) 1300, и (б) 34000. Умети: Одговарајуће флукуације динамичке променљиве  $\xi_H$  којима се обезбеђује непроменљивост средње температуре.



## 2.5 Предности и недостаци традиционалне МД

Главне предности класичних МД метода су:

- (i) Једини улазни подаци неопходни за образовање модела (не рачунајући граничне и почетне услове) односе се на међуатомски потенцијал. Мимо тога, не постоје класични конститутивни модели којима се постулирају односи између главних термомеханичких параметара стања.
- (ii) Не уводе се било какве претпоставке у погледу природе симулираних процеса односно физичких механизма који су предмет изучавања. Сходно томе, отвара се могућност да добро осмишљени виртуелни експеримент пружи детаљан увид у главне механизме одвијања изучаваних физичких појава.
- (iii) Горе поменути увид у механизме одвијања изучаваних физичких појава могуће је остварити са изузетно фином просторно-временском резолуцијом.

Главни недостаци класичних МД метода су у доброј мери условљени горе наведеним предностима:

- (i) **Класични опис међуатомске интеракције**, засноване на емпиријским потенцијалима, која знатно поједностављује ригорозну квантно-механичку природу материјала. Ефекти електронске конфигурације могу бити уведени *посредно* преко површи потенцијалне енергије које се, заузврат, апроксимирају емпиријским потенцијалима зависним искључиво од положаја атома.
- (ii) **Класични опис међуатомских сила** у коме Њутнова једначина кретања замењује Шредингерову једначину квантне механике. Један од индикатора ваљаности ове апроксимације је де Бројева таласна дужина која за термичка кретања има облик

$$\Lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \quad (2.23)$$

где је  $h$  Планкова (Planck) константа,  $m$  атомска маса,  $k_B$  Болцманова (Boltzmann) константа а  $T$  апсолутна температура (Ercolessi, 1997). Сматра се да су квантни ефекти занемарљиви ако је де Бројева таласна дужина мања од међуатомског растојања,  $\Lambda_{th} < d_0$  (табела 2-2), или уколико је фреквенција вибрационог кретања,  $\nu$ , таква да је  $h\nu < k_B T$ . У осталим случајевима, атоми већине хемијских елемента (осим најлакших попут Н, Не, племенитих гасова) могу да се сматрају тачкастим честицама на довољно високим температурама и класична механика може да се користи за описивање њиховог кретања. Код најлакших елемената квантна корекција се често суперпонира на класични опис кретања.

**Табела 2-2.** Параметри атомског модела за три хемијска елемента и резултујућа термичка де Бројева (de Broglie) таласна дужина израчуната за две различите температуре коришћењем израза (2.15).

	$m$ [ $\times 10^{-25}$ kg]	$d_0$ [ $\times 10^{-10}$ m]	$\Lambda_{th}$ [ $\times 10^{-10}$ m]	
			$T$ [K]	
			300	1000
H	0.0167	0.50	1.0	0.55
Si	0.465	2.2	0.19	0.10
W	3.1	2.8	0.074	0.040

(iii) **Просторно-временска ограничења** која обухватају величину МД модела (број атома) и време трајања симулиране појаве омеђују опсег проблема који се могу решавати МД методама.

Иако је МД изузетно узнапредовала и добила на популарности на крилима екстремно брзог развоја рачунарске технологије, тренутно стање још увек макроскопска моделирања чак и најкраћих физичких појава чини незамисливим. Нпр., није ни изблиза могуће МД моделирање бакарног узорка  $1 \times 1 \times 1 \text{ nm}^3$  јер се исти састоји од  $10^{21}$  атома што далеко превазилази могућности и најмоћнијих рачунарских система. Просторну скалу симулације дефинише величина симулационе ћелије која је ограничена управо бројем атома који могу да буду укључени у МД модел, типично до  $10^8$ . Ово одговара величини симулационе ћелије реда величине пар десетина нанометара (у просторним симулацијама), односно пар микрометара (у раванским симулацијама). Све структурне карактеристике од интереса и корелационе дужине треба да буду мање од наведених величина симулационе ћелије а површински ефекти не смеју да утичу на резултате виртуелних симулација. Примери рекордних величина МД модела укључују симулације Цермана и Кадау (Germann and Kadau, 2008) са  $10^{12}$  Ленард-Цоунс атома уређених у кубну кристалну решетку величине симулационе ћелије  $2.5 \times 2.5 \times 2.5 \text{ }\mu\text{m}$  и временом трајања од свега 40 временских корака изведене коришћењем 212,992 процесора “BlueGene/L” кластера у Националној Лабораторији Лоренс Ливерморе (САД). Према расположивим подацима, изгледа да је тренутни рекорд од  $4.125 \cdot 10^{12}$  атома (што је еквивалентно кубној симулационој ћелији димензија  $4.5 \times 4.5 \times 4.5 \text{ }\mu\text{m}$ ) постигао тим научника из Немачке (“LRZ, HLRS, Technische Universität München, the laboratories of Thermodynamics at Technische Universität Kaiserslautern and Universität Paderborn”) који је захваљујући рачунарској платформи “SuperMUC” (инсталираној у Лајбниц суперкомпјутеском центру Баварске академије наука)

симулирао хетерогену расподелу честица користећи 131072 процесора и преко 500 TFLOPS.

Временску скалу симулације дефинишу величина временског корака и број циклуса. Максимални временски корак интеграције у МД симулацији је дефинисан најбржим кретањем (растежањем везе) у систему.<sup>5</sup> Као типични пример за једно од најбржих растежања узима се C–H веза чија је типична вибрациона фреквенција 90 THz ( $3000 \text{ cm}^{-1}$ ) што одговара периоду од 11 fs. Како би се обезбедило неколико тачака по вибрацији C–H везе, обично се усваја временски корак од 1 fs. Оптичке фреквенције фонона су реда величине 10 THz што одговара периоду од око 100 fs. Све у свему, типичан временски корак у МД симулацијама је реда величине фемтосекунде. За 2Д Ленард-Џоунс системе, често коришћене у студијама презентованим у овом прегледу, иницијална процена временског корака заснива се на изразу

$$\delta t = \left( \frac{1}{60} \div \frac{1}{30} \right) \frac{2\pi}{\omega_E}, \quad \omega_E = \sqrt{3} \omega_0 \quad (2.24)$$

где  $\omega_E$  означава Ајнштајнову (Einstein) фреквенцију повезане са основном хармонијском фреквенцијом  $\omega_0 = C_0 / r_0$  дефинисаном у зависности од брзине звука и равнотежног међуатомског растојања (Holian et al., 1995). Временски корак процењен коришћењем израза (2.24) је исто реда величине фемтосекунде. Мали временски корак потребан за МД симулације атомских система озбиљно ограничава укупно време симулације. Коришћењем савремених рачунара (и масивног паралелног процесирања) могуће је израчунати отприлике око  $10^8$  временских циклуса. На тај начин се долази до границе могућности МД метода да симулирају физичке појаве које се јављају унутар 100 ns. Ово је озбиљно ограничење за многе проблеме које укључују термички активирани процес (табела 2-3) због чега је развијено неколико метода за њихово убрзање за потребе изучавања површинске дифузије, таложења филмова, еволуције тачкастих дефеката. Рекордна МД симулација реда величине 10  $\mu\text{s}$  описује брзо савијање протеинских ланаца (Freddolino et al., 2008).

Повећавање физичког времена трајања симулираних процеса је стална, активна истраживачка област која укључује побољшавање нумеричких алгоритама, паралелно процесирање, и континуални развој хардверских могућности.

---

<sup>5</sup> Напредак МД метода остварен је увођењем вишеструких временских корака (Rapaport, 2004). Ова техника омогућава суочавање, на оптималан начин, са сложеним системима чији одзив одликује више временских скала: нпр., молекулима који имају јаке „унутрашње” везе, док им спољашње међудејство одликују мекши потенцијали; молекулима који имају нагло променљива међудејства кратког домета, али благо променљива међудејства дугог домета; или молекулима који се састоје од атома изразито различитих маса.

(iv) **Презасићеност количином излазних података** (“data glut”) Горе поменути детаљни увид у механизме одвијања изучаваних појава на атомској скали са изузетно фином временском резолуцијом (типично реда величине фемтосекунди) нужно доводи до претераног изобиља изворних излазних података ( $r$ ,  $v$ ,  $a$ ).

**Табела 2-3.** Репрезентативне временске и просторне скале неопходне за опажање неких типичних деформационих механизма при оптерећењу одскочним притиском: (а) једнофазних метала, и (б) аморфних кртих материјала. (Преузето из референце Bourne (2011) са допуштењем издавача. Copyright (2011) by Springer).

(а) МЕХАНИЗАМ	РЕПРЕЗЕНТАТ. ПРОСТОРНА СКАЛА	РЕПРЕЗЕНТАТ. ВРЕМЕНСКА СКАЛА	(б) МЕХАНИЗАМ	РЕПРЕЗЕНТАТ. ПРОСТОРНА СКАЛА	РЕПРЕЗЕНТАТ. ВРЕМЕНСКА СКАЛА
ФАЗНА ТРАНСФОРМ.	10 ns	10 ps	ЗАЧЕЋЕ ПРСЛИНА	100 $\mu\text{m}$	10 ns
ЗАЧЕЋЕ ДИСЛОКАЦИЈА	50 nm	50 ps	СРАСТАЊЕ ПРСЛИНА	1 mm	100 ns
ЗАЧЕЋЕ ТВИНА	1 ns	1 ns	ДРОБЉЕЊЕ У ПРАХ	1 mm	1 $\mu\text{s}$
МЕЂУДЕЈСТВА ДИСЛОКАЦИЈА	100 nm	100 ns	ТЕЧЕЊЕ ФРАГМЕНАТА	1 mm	1 $\mu\text{s}$
СПАЛАЦИЈА, ОШТЕЋ. ПРИ ЗАТЕЗАЊУ	1 $\mu\text{m}$	100 ns	МЕЂУФРАГМЕНТ. ТРЕЊЕ	10 mm	10 $\mu\text{s}$
АДИЈАБАТСКО СМИЦАЊЕ	100 $\mu\text{m}$	10 $\mu\text{s}$	МЕЂУФРАГМЕНТ. ОБРТАЊЕ	10 mm	10 $\mu\text{s}$

## 2.6 Примена МД на проблеме фрагментације

*Холиан и Грејди* (Holian and Grady, 1988) су, по свему судећи, први применили МД у циљу изучавања проблема динамичке фрагментације и то на примеру хомогеног, адијабатског ширења флуида. Коришћена МД техника се заснива на класичној слици „великог праска“ у Еуклидском простору где се бесконачни узорак моделира шаховским пољем (састављеним од периодично понављајућих јединица) које се шири. Ефекат слободних површина у МД моделу се на тај начин своди на минимум. У почетном тренутку странице 2Д симулационе ћелије ( $L_x \times L_y$ ) почињу да се шире константном брзином

$$L_x(t) = L_x(0) \cdot (1 + \dot{\epsilon} t) \tag{2.25}$$

$$L_y(t) = L_y(0) \cdot (1 + \dot{\epsilon} t)$$

Овај начин наношења динамичког оптерећења сличан је методи генерисања ударног таласа раније примењеној у МД симулацијама (Holian, 1988) с тим што

се за разлику од нехомогеног случаја оптерећења (при ударном таласу) константни градијент брзина примењује на све честице у симулационој ћелији. Сходно томе, компоненте брзине сваке честице ( $i = 1, N_{at}$ ) у два правца попримају облик

$$\begin{aligned}\dot{x}_i(0^+) &= \dot{x}_i(0) + \dot{\varepsilon} x_i(0) \\ \dot{y}_i(0^+) &= \dot{y}_i(0) + \dot{\varepsilon} y_i(0)\end{aligned}\tag{2.26}$$

где су  $\dot{x}_i(0)$  и  $\dot{y}_i(0)$  компоненте насумичне брзине термичке побуде у почетном тренутку, а  $\dot{\varepsilon}$  брзина ширења. Од почетног тренутка надаље, ширење је адијабатско јер нема додавања енергије систему а кретање свих атома је у складу са Њутновим законима кретања и периодичним контурним условима.

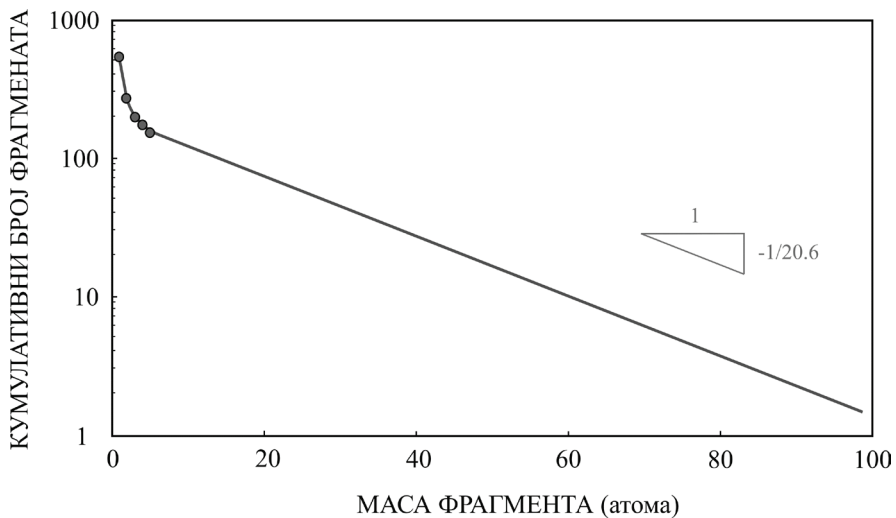
Међуатомске интеракције 4200 честица флуида моделиране су Ленард-Џоунсовим потенцијалом (2.5) са јединичним временом дефинисаним параметрима потенцијала,  $t_0 = 2^{-1/6} r_0 (m_0 / \varepsilon_{LJ})$ . Опсег међуатомске интеракције је глатко скраћен на  $\approx 1.55 r_0$  увођењем кубног сплајна у тачки пресека  $\approx 1.10 r_0$ . У симулацијама је коришћено пет подзвучних брзина ширења добијених sukcesивним удвостручавањем бездимензионе релативне деформације ширења у опсегу  $\dot{\varepsilon} t_0 \in [0.0535, 0.856]$ . Почетно стање флуида је уравнотежено при масеној густини  $\rho_0 r_0^2 / m_0 = 0.945$  и температури,  $k_B T_0 / \varepsilon_{LJ} = 0.60$ , мало изнад температуре топљења. Симулације су прекинуте приликом достизања густине  $\rho_0 r_0^2 / m_0 = 0.22$  у очигледно неравнотежном стању материје судећи по облику фрагмената (који је далеко од кружног).

Статистика атомских кластера (фрагмената, капљица) одређена је за горе дефинисана завршна стања при свих пет брзина ширења. Добијени кумулативни број фрагмената масе  $m$  (или веће) приказан је на логаритамској ординати у односу на масу  $M$  (дату у јединицама броја атома јединичне масе  $m_0$ ). Кумулативни број фрагмената је коришћен уместо самог броја фрагмената јер је величина сама по себи мање подложна флукуацијама при релативно малој величини узорка (свега 4200 атома), поготово за веће величине фрагмената. Статистичком анализом добијених резултата дошло се до закључка да је кумулативна расподела добро приказана збиром два експоненцијална члана, дакле тзв. двомодалном експоненцијалном функцијом

$$N(m) = N_1 \exp\left(-\frac{m}{\mu_1}\right) + N_2 \exp\left(-\frac{m}{\mu_2}\right)\tag{2.27}$$

где су два мода једноатомски врх ( $\mu_1 = 1$ ) и широко раме расподеле (нпр.,  $\mu_2 = 20.6$  при  $\dot{\varepsilon} t_0 = 0.21$  на слици 2.11).

На овом месту је важно да се напомене да је експоненцијалну расподелу фрагмената могуће извести аналитички, максимализацијом броја начина на који фрагменти могу бити расподељени, на идентичан начин на који се у статистичкој механици добија канонска Болцманова расподела максимализацијом ентропије (Grady and Kipp, 1985). При наведеном извођењу се, уз увођење претпоставке о једнако вероватним масама кластера, максимализује број начина на који фрагменти могу бити распоређени  $N_0!/(n_1!n_2!\dots n_{N_{at}}!)$ , при чему је  $n_k$  број кластера састављен од  $k$  атома,  $N_0$  број фрагмената, а  $N_{at}$  укупни број атома. Холиан и Грејди (1988) су ваљаност овакве експоненцијалне расподеле фрагмената демонстрирали на примерима расподела фрагмената добијених експериментално експлозијом челичних цилиндара као и расподелом кумулативног броја галаксија насталих фрагментацијом Универзума после великог праска. Закључак аутора је био да је, од атомске до галактичке скале, расподела фрагмената добијених хомогеном фрагментацијом конзистентно експоненцијална у функцији маса фрагмената. На овај начин су, анализом физичког процеса фрагментације на основу МД симулација, искључене многе геометријске теорије фрагментације којима је у то време обиловала литература (Grady and Kipp, 1985; Elek and Jaramaz, 2009).



**Слика 2.11.** Шематски приказ статистике фрагмената за коначно стање 2Д-МД симулације адијабатског ширења ( $N_{at} = 4200$ ) при брзини ширења  $\dot{\epsilon}t_0 = 0.21$ . Пет плавих тачака означава резултате симулација ( $N(m_k), m_k$ ) ( $k = 1, 2, 3, 4, 5$ ) док је пуна црвена линија представља двомодални фит коришћењем израза (2.27) и модова  $\mu_1 = 1$  и  $\mu_2 = 20.6$ . (Репродуковано на основу података из референце (Holian and Grady, 1988).)

На крају, Холиан и Грејди су извели аналитичке процене просечне и медијалне масе фрагмената у зависности од иницијалне густине (односно, температуре) узорка и брзине ширења, а у функцији основних особина међу-атомских сила. Извођење је засновано на ранијем Грејдијевом теоријском моделу динамичке фрагментације (Grady, 1982) развијеном на основу равнотеже кинетичке енергије ширења сферичне капљице и потенцијалне енергије неопходне за стварање слободне површине и овде је сажето у основним цртама. У почетном тренутку,  $t=0$ , просторни домен — који ће у процесу раздвајања постати фрагмент — добија енергију ширења, дефинисану у функцији хомогено нанесене брзине повећања релативне деформације,  $\dot{\epsilon}$ . Како се домен (будућег) фрагмента и његово непосредно окружење шире, локална еластична деформациона енергија по јединици масе се повећава са квадратом релативне деформације. У тренутку стварања фрагмента (дефинисаном временом  $L_\phi/C_0$  неопходним да пропагацију поремећаја преко домена фрагмента датог његовим пречником  $L_\phi$ ) отвара се око њега слободна површина. Током овога процеса енергија оптерећења је у равнотежи са енергијом неопходном за стварање слободне површине (Grady, 1982). Еластична релативна деформација је пропорционална  $L_\phi \dot{\epsilon}$ . Без обзира на димензионалност разматраног проблема, површинска енергија по јединици масе је инверзно пропорционална пречнику фрагмента  $L_\phi$ . Сходно томе, у тренутку настанка фрагмента, када су еластична енергија оптерећења и површинска енергија у равнотежи, важи пропорционалност  $L_\phi \propto \dot{\epsilon}^{-2/3}$ . На овај начин добијен је израз за просечну масу  $d$ -димензионалног фрагмента

$$m_{ave} \propto L_\phi^d \propto \dot{\epsilon}^{-2d/3} \quad (2.28)$$

који за Холианов и Грејдијев (1988) 2Д модел има облик  $m_{ave} \propto \dot{\epsilon}^{-4/3}$ .

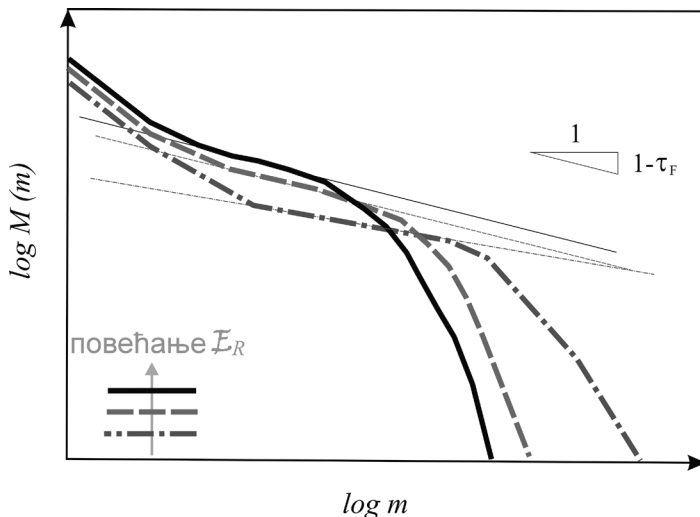
Чинг и коаутори (Ching et al., 1999) су истраживали утицај улазне енергије која доводи до фрагментације на расподелу маса фрагмената. Слично претходно-описаном раду Холиана и Грејдија (1988) користили су релативно мали (4,200 атома) и једноставан (Ленард-Џоунс 6-12) 2Д-МД модел. Узорак је био облика квадрата са неуређеним распоредом атома (као код аморфног материјала) густине  $\rho^* = \rho_0 \sigma^2 = 0.61$  и слободним граничним условима. Коришћен је Верлејев алгоритам (2.3) који обезбеђује одржање константне количине кретања. Енергија се уноси у термички уравнотежени систем преко почетних брзина у радијалном правцу додељених свим атомима система пропорционално њиховом растојању од геометријског центра квадратног узорка (2.26). Као меру интензитета експлозије аутори су користили бездимензиони параметар јачине

експлозије  $\mathcal{E}_R$  представљен односом кинетичке и потенцијалне енергије непосредно након „детонације” (задавања динамичког оптерећења). Параметар јачине eksploзије је вариран у опсегу  $\mathcal{E}_R = [0.43, 6.49]$  променом константе пропорционалности  $\dot{\epsilon}$  у изразу (2.26).

Статистичка анализа резултата симулације процеса фрагментације вршена је коришћењем кумулативне расподеле маса фрагмената,  $M(m)$

$$M(m) = \int_m^{\infty} n(x) dx \quad (2.29)$$

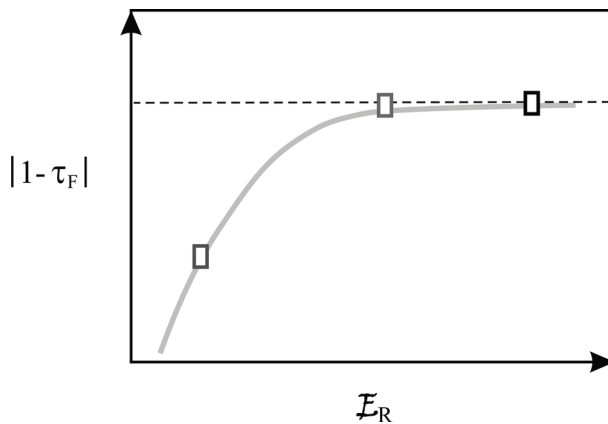
(односно укупне масе свих фрагмената већих или једнаких  $m$ ) у стационарној (временски непроменљивој) конфигурацији. Треба уочити да је  $M(0) = M_{tot}$ , по дефиницији (2.29), почетна маса система. Резултати симулација, шематски приказани на слици 2.12, указују да се, усвајањем нотације  $n(m) \propto m^{-\tau_F}$ , расподела кумулативне масе фрагмената (2.29) може аналитички приказати са степеном функцијом,  $M(m) \propto m^{1-\tau_F}$ , која се у домену малих и средњих маса фрагмената  $m$ , простире преко целе декаде маса са тенденцијом повећања са повећањем броја атома у систему (Ching et al., 1999).



**Слика 2.12.** Шематска илустрација кумулативне расподеле маса фрагмената  $M(m)$  приказане у зависности од масе фрагмената  $m$  за три различите вредности енергије експлозије  $\mathcal{E}_R$ . Уочљив је тренд повећавања масе лакших на рачун тежих фрагмената са повећавањем енергије експлозије. (Репродуковано на основу података из референце (Ching et al., 1999).)



Кључно опажање у овоме раду, шематски приказано на слици 2.13, је да се експонент кумулативне расподеле  $1-\tau_F$  (дефинисан нагибом линеарног сегмента на слици 2.12 који одговара средњем опсегу маса фрагмената) повећава монотонно са повећавањем енергије експлозије у коришћеном опсегу,  $\mathcal{E}_R = [0.43, 6.49]$ . Ова промена је праћена смањењем ширине домена успешне апроксимације степеном функцијом; при  $\mathcal{E}_R = 6.49$  овај домен готово да не постоји. На основу тога, Чинг и коаутори су закључили да расподела маса фрагмената није универзална па се, сходно томе, ни процес ударне фрагментације не може се сматрати појавом само-организоване критичности како су претпоставили Одершеде и сарадници у утицајном раду (Oddershede et al., 1993). Чинг и сарадници су проверили робусност добијених резултата вршењем симулација на моделима са различитим густинама атома, бројем атома, обликом узорка (круг уместо квадрата) и у свим наведеним случајевима уочили су наведену промену експонента. Уочавајући горе описане трендове понашања фрагментираниог система, аутори су се запитали да ли степена функција, са повећањем улазне енергије, уопше опстаје као погодан модел расподеле фрагмената у средњем опсегу маса. Показали су да се при даљем повећању  $\mathcal{E}_R$  домен успешне апроксимације степеном функцијом практично нестаје па се (нпр., за  $\mathcal{E}_R = 100$ ) расподела кумулативне масе фрагмената мења у експоненцијалну. Нажалост, због релативно малог узорка, из динамичког оптерећења  $\mathcal{E}_R = 100$  произилази мала просечна маса фрагмента (око два атома) што баца сенку на општост закључка.



**Слика 2.13.** Шематски приказ зависности експонента кумулативне масе фрагмената,  $|1-\tau_F|$  од енергије експлозије,  $\mathcal{E}_R$ , сходно слици 2.12. Наизглед стационарни ниво 0.62 назначен је испрекиданом линијом. (Репродуковано на основу података из референце (Ching et al., 1999)).

На крају, зарад касније дискусије, ваља опазити да је процена  $1-\tau_F$  коришћењем нагиба линеарног сегмента на слици 4 у изворној референци (Ching et al., 1999) у средњем опсегу маса фрагмената неизбежно скопчана са одређеном произвољношћу у одређивању самог опсега маса које припадају дотичном линеарном сегменту. На пример, увидом у горе-наведене изворне податке, чини се да је ствар субјективне процене да ли су линеарни сегменти  $M(m) \propto m^{1-\tau_F}$  који одговарају двома најмањим енергијама експлозије (0.43 и 1.19) готово једнако међусобно паралелни као и одговарајући линеарни сегменти две расподеле које одговарају највећим енергијама експлозије (4.22 и 6.49). Овим монотоност повећања  $|1 - \tau_F| = f(\mathcal{E}_R)$  сугерисана сликом 2.13 постаје упитна, са свим последицама које из тога проистичу о чему ће бити речи касније.

*Острем и коаутори* (Åström et al., 2000) су истраживали тренутну фрагментацију 2Д течности и чврстог материјала у условима ударног и експлозивног оптерећења са циљем да стекну увид у стварну природу могуће критичности процеса фрагментације, универзалности физичког процеса и упореде конкурентске теорије.

Пре преласка на описивање конкретних истраживања упутно је подсетити се на стање у тадашњој литератури на дату тему. Две веродостојне форме расподеле величине фрагмената током тренутне фрагментације су биле иницијално предложене на основу статистичких аргумената (нпр., Grady and Kipp, 1985):

- једна је полазила од претпоставке да је фрагментација Поасонов процес, из чега у 2Д анализи произилази експоненцијална расподела квадратног корена маса фрагмената (тј., пречника фрагмената);
- друга се засновала на принципу максималне ентропије (односно, максимализације броја начина на који процес фрагментације може да се одвија) што је доводило до експоненцијалне расподеле маса фрагмената.

Насупрот томе, резултати широког спектра експеримената и симулација тренутне (експлозивне и ударне) фрагментације, нарочито кртих материјала, временом су почели да указују на то да је у домену фрагмената малих и средњих величина њихова расподела боље описана степеном него експоненцијалном функцијом. Овде је упутна одређена доза опреза јер, као што ће се видети из прегледа радова датог у овој монографији, ваљаност описа степеном функцијом може да варира са опсегом величина фрагмената, опсегом величина енергије

доступне за фрагментацију, и врстом материјала.<sup>6</sup> Уопштено узев, чини се да већина доступних података упућује на расподелу фрагмената која представља комбинацију расподеле засноване на степеној функцији (у опсегу фрагмената мале и умерене величине) и мање-више експоненцијалног опадања (у остатку расподеле који се односи на домен већих фрагмената). Оваква слика је навела Одершедеа и сараднике (Oddershede et al., 1993) да предложи да ударна фрагментација показује само-организовану критичност. Пошто се у наведеним резултатима помало скалирање све до опсега величина фрагмената блиског најмањим димензијама објеката подвргнутих фрагментацији, Одершеде и сарадници су тумачили експоненцијално опадање у домену великих фрагмената као ефекат коначне величине узорка.

Насупрот овој теорији само-организоване критичности, Кун и Херман (Kun and Herrmann, 1999) су показали, на основу резултата својих симулација, да прелаз (конкретно прелазна маса фрагмента, “crossover mass”) од степене ка експоненцијалној расподели зависи од енергије удара, што упућује на то да се не ради о ефекту коначне величине него о суштинском делу физичке слике процеса, како су управо сугерисали статистички аргументи.

У циљу разрешења наведених дилема, Острем и сарадници осмислили су 2Д рачунарске симулације тренутне фрагментације два потпуно различита физичка система: (i) експлозивна фрагментација течности коришћењем МД модела са Ленард–Џоунсовим потенцијалом, и (ii) експлозивна и ударна фрагментација грануланог материјала моделирана коришћењем решеткастог модела сачињеног од еластичних греда (чију презентацију остављамо за поглавље 3.4). МД симулација експлозивне фрагментације течности је заснована на модификацији већ описаног модела који су користили Холиан и Грејди (Holian and Grady, 1988). Основна разлика је коришћење симулационе ћелије са периодичним граничним условима у вертикалном правцу уз nanoшење експлозивног оптерећења применом градијента брзине у хоризонталном правцу. Важно је напоменути да ове МД симулације, у циљу смањења времена њиховог трајања, нису извођене до постизања стварне равнотежне (стационарне) расподеле фрагмената него до тренутка када се јасно образују кластери атома и уђе у режим квази-статичког балистичког ширења. Пошто је у наведеним фрагментима „заробљена” велика количина кинетичке енергије у форми термичке вибрационе енергије, током балистичког кретања фрагмената долази

---

<sup>6</sup> “Pure power laws are seldom found in nature; in our model, they appear only when the energy is right at the transition point from a damaged to a fragmented state, is uniformly distributed over the sample, and the material is fragile enough for branches to propagate without stopping across the sample. Such cases may obviously appear quite unfrequently. More commonly, power-law distributions with exponential large-size cutoffs are encountered” (Aström et al., 2004a).

како до њиховог даљег распадања на мање фрагменте тако и до њихове термичке абразије (откидања индивидуалних атома или малих кластера са површине великог фрагмента) све до постизања равнотежног стања. Такође треба уочити да аутори, у циљу поједностављивања модела, нису омогућили сударе између фрагманата, што би представљало озбиљан недостатак у случају симулације ударне фрагментације. Међутим, у случају динамичког оптерећења у виду експанзионог таласа, ова претпоставка не представља упрошћење са потенцијално далекосежним последицама на резултате.

Хронолошки гледано, резултати ових симулација морају се прво сажети почевши од резултата добијених коришћењем решеткасте гредне методе (поглавље 3.4) како би се пратио развој аргумената у анализи аутора. Што се тиче МД симулација фрагментације течности, важно је уочити да аутори наглашавају (ранија опажања Холиана и Грејдија, 1988) да је изузетно временски захтевно достићи термичку равнотежу — а тиме и стационарну расподелу фрагмената — у МД симулацијама. У време када су рађене ове симулације, достизање равнотежне расподеле фрагмената у МД симулацијама чак и са тада коришћеним (а за данашње услове веома малим величинама система) било је практично неизводљиво. Стога су Острем и сарадници (као и Холиан и Грејди пре њих) једноставно прекидали симулације у одређеном тренутку на горе наведени начин. Због тога су изражавали очекивање да квалитативни резултати симулација МД методом одговарају онима из ране фазе симулација коришћењем неправилних решетки са гредним међудејствима (поглавље 3.4) у условима истог динамичког оптерећења. Ово очекивање се показало оправданим јер је анализа резултата МД симулација указивала на кумулативну расподелу масе фрагмената следећег облика

$$N(m, \dot{\epsilon}, A, t) = [a_1 m^{-\tau_F} + a_2(\dot{\epsilon}, A, t)] \exp\left(-\frac{m}{\mu_0}\right) \quad (2.30)$$

где параметри подешавања показују следеће тенденције са протоком времена:  $a_1 \rightarrow const.$  а  $a_2/a_1 \rightarrow 0$ , чиме се добија функционална зависност облика (3.70). Острем и сарадници су такође показали да је параметар  $\mu_0$  прилично неосетљив на време трајања симулације, па сходно томе представља поуздану процену корелационе дужине. Такође је уочено да се велики фрагменти по правилу јављају у раним фазама фрагментације, док већина најмањих фрагмената, описаних делом израза (2.30) представљеним степеном функцијом, настају, на горе описани начин, уситњавањем већих фрагмената и/или њиховом термичком абразијом. Ово је, такође, у сагласности са изразом (2.28): корелациона дужина је дефинисана кинетичком енергијом која одређује типичну масу фрагмента у

раној фази фрагментације. Након тога процес фрагментације се наставља даљим уситњавањем великих фрагмената на критичан начин, тј., резултујући фрагменти образују домен малих фрагмената расподеле који је инваријантан у односу на скалу.

*Дил и коаутори* (Diehl et al., 2000) су се такође бавили истраживањем експлозивне фрагментације коришћењем 2Д-МД модела обликованог на два различита начина. Први модел је састављен коришћењем насумично распоређених атома у МД симулационој ћелији у складу са жељеном густином са циљем упоређивања резултата са ранијом студијом Чинг и сарадника (Ching et al., 1999). Код другог модела почетно стање се, пре динамичког оптерећења, уравнотежава на жељеној температури. Модел се састоји од 40,000 атома који су у међусобној интеракцији преко Ленард-Џоунсовог 6-12 потенцијала (2.5), што је релативно велики модел за оно време имајући у виду неопходност постизања стационарне расподеле фрагмената. У циљу симулације процеса ширења после експлозије, свим атомима је у почетном тренутку саопштена центрифугална брзина на исти начин који су користили Холиан и Грејди (2.26) (Holian and Grady, 1988; а касније и Чинг и сарадници, Ching et al., 1999). Константа пропорционалности  $\dot{\varepsilon}$  [1/s] у том изразу је количинска мера енергије саопштене систему у почетном тренутку (након тога нема додавања енергије за  $t > 0$ ). За разлику од модела Холиана и Грејдија (1988) код кога се границе периодичне ћелије шире током динамичке експанзије система (2.25), у моделу који се тренутно разматра коришћени су слободни гранични услови, исто као код Чинг и сарадника (Ching et al., 1999). Такође, као меру интензитета експлозије аутори су прихватили бездимензиони параметар јачине експлозије  $\mathcal{E}_R$  који се варира променом константе пропорционалности  $\dot{\varepsilon}$  у изразу (2.26). Коришћена је Стормерова („жабљи-скок”) техника интеграције (2.4, 2.5) са временским кораком  $\delta t = 0.05$ . Резултати фрагментације, илустровани на сликама 2.14в и 2.14г, су аналитички представљени коришћењем нормализоване кумулативне масе фрагмената (односно броја фрагмената већих или једнаких  $m$ )

$$N(m) = \frac{M(m)}{m}, \quad M(m) = \int_m^{\infty} n(x) dx \quad (2.31)$$

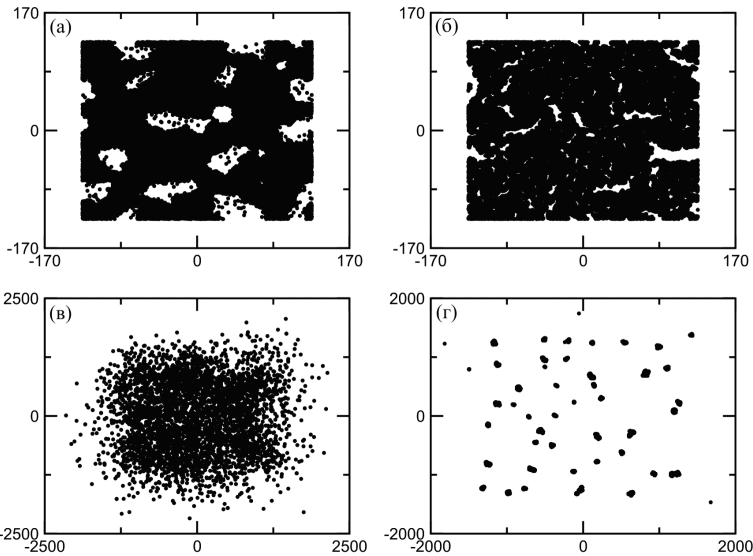
где је кумулативна маса фрагмената дефинисана изразом (2.29). У складу са закључцима Одершедеа и коаутора (Oddershede et al., 1993), ако се број фрагмената одређене масе понаша у складу са степеном функцијом,  $n(m) \propto m^{-\tau_F}$ , кумулативни број фрагмената  $N(m)$  — захваљујући нормализацији у (2.31) — треба такође да се скалира са истим експонентом  $\tau_F$ . Дил и сарадници су демонстрирали да је кумулативна расподела  $N(m)$  после извесног времена

дефинисана са стационарном вредношћу експонента  $\tau_F$ , тј. нагиб средњег дела криве у двоструко-логаритамском простору ( $\log N(m)$  наспрам  $\log m$ ), дефинисан је степеном функцијом са вредношћу  $\tau_F$  независном од времена.

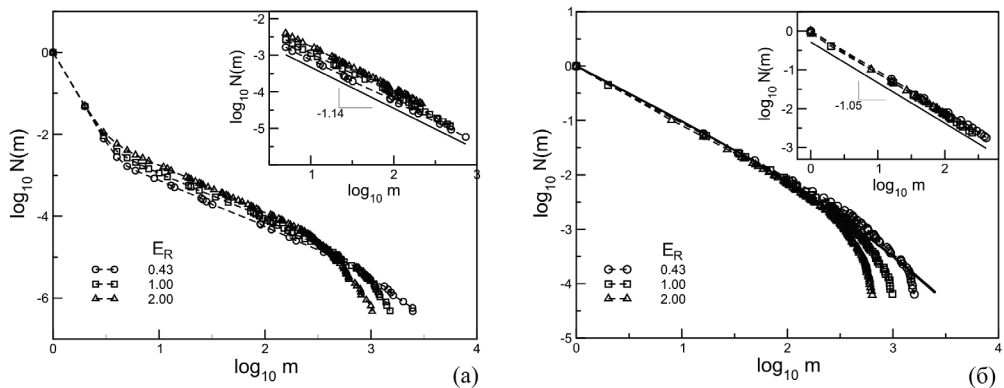
Резултати симулација са првим моделом квалитативно су слични са резултатима приказаним на слици 2.15а с тим што је у опсегу средњих маса, које карактерише расподела кумулативног броја фрагмената  $N(m)$  у облику степене функције, примећена вредност експонента  $\tau_F = 1.40 \pm 0.02$ . Ова вредност експонента се слаже са резултатом раније студије (Ching et al., 1999) при истом интензитету експлозије  $\mathcal{E}_R = 0.43$ . Међутим, важна разлика у односу на наведену студију је у томе што Дил и сарадници нису уочили зависност експонента  $\tau_F$  од енергије експлозије  $\mathcal{E}_R$ . Ову битну квалитативну разлику су Дил и сарадници објаснили *малом величином модела* који су користили Чинг и сарадници (4,200 атома) што је неоспорна чињеница. Међутим, алтернативно објашњење би могло да буде да је неосетљивост од енергије експлозије  $\mathcal{E}_R$  такође резултат релативно *малог енергетског опсега*  $\mathcal{E}_R = [0.43, 2.0]$  који су Дил и сарадници користили док су Чинг и сарадници ишли до  $\mathcal{E}_R = 6.49$ .

Резултати симулација на два узорка истих густина  $\rho^* = \rho_0 \sigma^2 = 0.61$  који одговарају различитим агрегатним стањима добијеним термичким уравнотежењима на  $T^* = k_B T_0 / \varepsilon_{LJ} = 0.37$  (мешавина чврсте и течне фазе; слика 2.14а) и  $T^* = 0.037$  (чврста фаза; слика 2.14б) потврђују инваријантност  $\tau_F$  од  $\mathcal{E}_R$  (слика 2.15). Наиме, у првом случају вредност  $\tau_F = 1.14 \pm 0.02$ , која одговара средњем опсегу маса и покрива готово два реда величина маса, непромењена је при промени  $\mathcal{E}_R \in \{0.43, 1.0, 2.0\}$ . При симулацији експлозије узорка припремљеног на истој почетној температури али промењеној густини  $\rho^* = \rho_0 \sigma^2 = 0.95$ , уочена је промена експонента,  $\tau_F = 1.07 \pm 0.02$ . При симулацији експлозије чврстог тела ( $T^* = 0.037$ ) уочава се квалитативно другачији део дијаграма  $M(m)$  који одговара најмањим фрагментима (једноатомским и двоатомским, донекле и триатомским) и поновно мало смањење вредности експонента на  $\tau_F = 1.05 \pm 0.02$ , али је ова вредност и даље независна од  $\mathcal{E}_R$  у коришћеном опсегу енергија експлозије (слика 2.15б). (Треба уочити са су Дил и сарадници потврдили идентичност расподела кумулативних маса добијених за неколико различитих почетних конфигурација које одговарају  $T^* = 0.037$ .)

Ова опажања могу се сажети закључком да је потврђена зависност расподеле кумулативног броја фрагмената у облику степене функције  $N(m) \propto m^{-\tau_F}$  у средњем опсегу маса. Вредност експонента  $\tau_F$ , који дефинише наведену функционалну зависност, прилично је — барем у опсегу енергија коришћеном у овој студији — робусна у односу на улазну енергију, али је осетљива на начин на који је узорак припремљен.



**Слика 2.14.** Приказ почетних (а, б; горњи ред) и крајњих конфигурација (в, г; доњи ред) 2Д-МД система састављеног од  $N_{at} = 40,000$  атома. Две почетне конфигурације у горњој половини слике одговарају истој густини  $\rho^* = 0.61$  система у равнотеженог на две различите температуре: (а)  $T^* = 0.37$ , и (б)  $T^* = 0.037$ . Крајње конфигурације (в, г) одговарају фрагментираним стањима при датим почетним температурама након 150,000 временских корака. Вредности на апсцисама и ординатама дате су у Ленард-Џоунс јединицама (нормализоване са  $\sigma = 2^{1/6} r_0$ ).



**Слика 2.15.** Двоосно-логаритамски приказ расподеле кумулативног броја фрагмената  $N(m)$  за коначно стање 2Д-МД симулације експлозије (150,000 временских корака, величина система је 40,000 атома) за три различите вредности бездимензионалног параметра интензитета експлозије  $E_R$ . (а) Материјал је мешавина чврсте и течне фазе са бездимензионалном густином  $\rho^* = 0.61$  и почетном температуром  $T^* = 0.37$ , (б) Материјал у чврстом агрегатном стању са бездимензионалном густином  $\rho^* = 0.61$  и почетном температуром  $T^* = 0.37$ . (Обе слике су преузете из референце Diehl et al., (2000) са допуштењем издавача. Copyright (2000) by the American Physical Society.)

На основу ових опажања, аутори су закључили да експонент  $\tau_F$ , а тиме и расподела кумулативног броја фрагмената  $N(m) \propto m^{-\tau_F}$ , зависе само од макроскопских параметара стања узорка. На крају, Дил и сарадници (Diehl et al., 2000) су у осврту на рад (Åström et al., 2000), објављен непосредно пре њиховог, нагласили да резултати њихових симулација не пружају директну аналогију са резултатима теорије перколације.

Мјагков и Шумикин (Myagkov and Shumikhin, 2005) су изучавали критично понашање и зависност расподеле маса фрагмената 2Д-МД симулацијама удара кружног пројектила у неспутани плочасти одбојник. Користили су идеалну троугласту решетку и идентичан Ленард-Џоунсов потенцијал (са завршетком на међучестичном растојању  $r_{\text{spl}} = 1.711238$  коришћењем сплајна) за оба објекта. Интеграција Њутнових једначина кретања вршена је коришћењем Стормеровог алгоритма (2.4) са бездимензионалним временским кораком  $\delta t = 0.0005 \div 0.005$  у зависности од брзине удара. У почетном тренутку, кружном пројектилу се задаје брзина удара управна на површину плочастог одбојника. Дужина одбојника је двоструко већа од пречника кружног пројектила (слика 2.16), док му је однос дебљине и дужине једнак 0.15. Геометрија проблема је, дакле, у потпуности дефинисана пречником пројектила, датом у бездимензионалној форми у јединицама равнотежног међучестичног растојања. Највећи део симулација чији ће резултати овде бити приказани обављен је при почетној температури  $T^* = 0.025$  са  $D_{\text{pr}} = 200$  што одговара укупном броју атома  $5 \cdot 10^4$ .

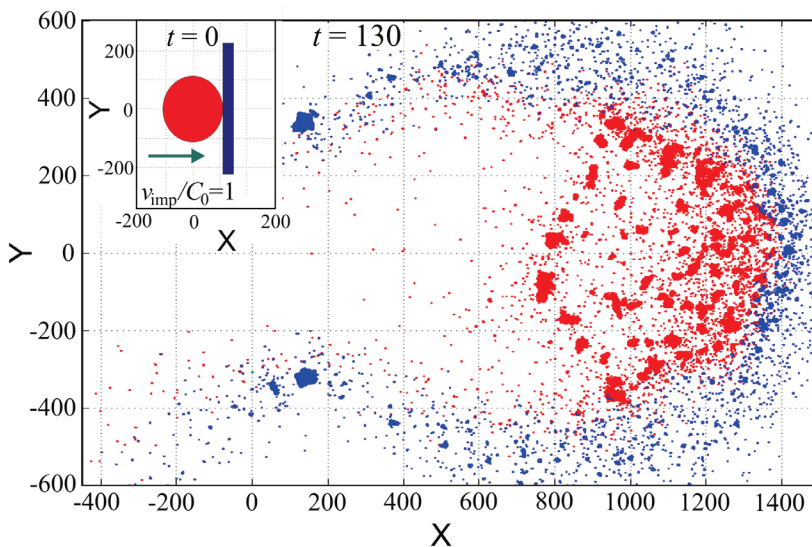
Типични изглед система после удара брзином која одговара брзини звука, приказан је на слици 2.16. Аутори су прво разматрали кумулативну расподелу маса фрагмената дефинисану изразом (2.31<sub>2</sub>). На слици 2.17, типичне расподеле маса фрагмената приказане су у различитим временским тренуцима, одакле може да се закључи да до практично стационарне расподеле долази при  $t \approx 150$ . Мјагков и Шумикин су повезали карактеристично време релаксације  $M(m)$  са временским тренутком  $t_c$  ( $\approx 60$ ) када фрагментација постаје критична. Са слике 2.17 уочљиви су нагло смањење масе највећег фрагмента  $m_{\text{max}}$  и адекватност описа  $M(m) \propto m^{1-\tau_F}$  у широком опсегу маса фрагмената. Међутим, аутори су истакли да постојање ове функционалне зависности није довољно за класификацију фрагментације међу критичне појаве. У циљу испитивања да ли њихов систем коначне величине показује особине критичног понашања, аутори су користили статистичку методу засновану на статистичким моментима

$$M_k^j(t) = \sum_m m^k n^j(m, t) \quad (2.32)$$

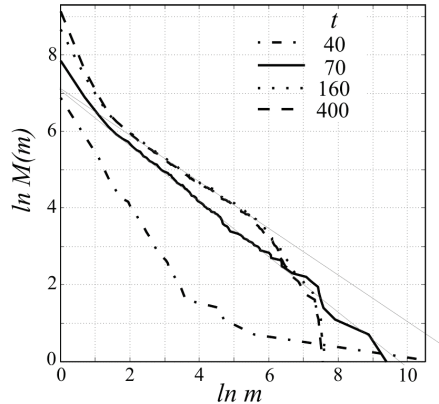


коју је предложио Кампи приликом изучавања фазних прелаза у нуклеарној мултифрагментацији (Campi, 1988). У изразу (2.32),  $n^j(m, t)$  је број фрагмената масе  $m$  у временском тренутку  $t$  током удара  $j$ , а сабирање се врши коришћењем свих фрагмената изузев највећег. Треба уочити да се удари при истој брзини међусобно разликују по углу заокрета кружног пројектила око геометријског средишта домена коме се задају почетне брзине (коришћено је 10 статистичких реализација по свакој брзини удара).

Коришћењем Кампијевог аналитичког поступка, Мјагков и Шумикин су израчунавали средњу вредност  $\langle M_2^j / M_1^j \rangle$  која представља вредност просечне масе фрагмента осредњену на основу 10 статистичких реализација. Анализирајући зависност  $\langle M_2^j / M_1^j \rangle$  од изабраног контролног параметра за различите величине система, показали су да она има изражен максимум при критичној вредности контролног параметра, чије су постојање поистоветили са манифестацијом фазног прелаза. Једна од типичних одлика фазних прелаза је да са повећавањем величине система област у околини критичне тачке постаје све оштрије изражена, што је праћено и малим смањивањем одговарајуће критичне вредности контролног параметра. Аутори су истакли да је ово последица коначне величине система и да наведена појава илуструје тренд приближавања сингуларитету око критичне тачке карактеристичном за бесконачне системе. Критична вредност брзине удара је  $v_0 = 0.4 C_0$ .



**Слика 2.16.** Геометрија система ( $D_{pr} = 250$ ) пре удара ( $t = 0$ ) и облак фрагмената настао после удара брзином једнаком брзини звука ( $t = 130$ ). (Љубазношћу др Николаја Мјагкова.)

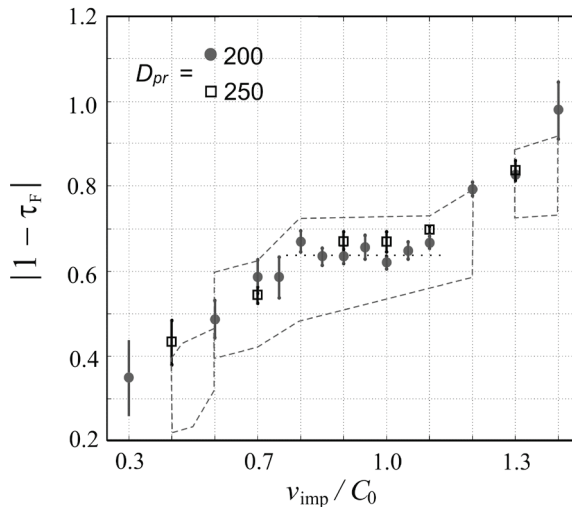


**Слика 2.17.** Кумулативна расподела маса фрагмената у различитим временским тренуцима при удару пројектила  $D_{pr} = 200$  брзином једнаком брзини звука. (Љубазношћу др Николаја Мјагкова.)

Како је наговештено сликом 2.17, стационарна расподела кумулативне масе фрагмената је карактерисана са функцијом облика  $M(m) \propto m^{1-\tau_F}$  у мање или више распрострањеном опсегу маса фрагмената у зависности од брзине удара. Расподела брзо улази у стационарни режим у опсегу средишњих маса, са једва уочљивом променом на реповима расподеле, у областима екстремно малих и великих маса (расподеле у два удаљена временска тренутка  $t = 160$  и  $400$  су међусобно готово неразлучиве). Мјагков и Шумикин су нагласили да се експонент  $\tau_F$  симулираног пројектил–одбојник система повећава са улазном енергијом и то немонотонно. Ова немонотоност повећања  $\tau_F$  при релативно великој промени улазне енергије од безмало два реда величине (приказана шематски на слици 2.18 са пољима овиченим испрекиданим линијама за три различите величине система) представља квалитативу разлику у односу на монотоне логаритамске зависности које су предлагали Чинг и коаутори (Ching, et al., 1999) и Сатор и коаутори (Sator et al., 2008). Овде је важно истаћи са су многе истраживачке групе (Kun and Herrmann, 1999; Diehl et al., 2000;...) училе независност експонента  $\tau_F$  у *околини* критичне тачке (у широј области фазног прелаза из оштећеног у фрагментирано стање). Мјагков и Шумикин су нагласили да је наведена независност од улазне енергије у ограниченом домену у околини критичне тачке ( $v_0 = 0.4 C_0$ ) уочљива на слици 2.18, што су Мјагков и Степанов (Myagkov and Stepanov, 2014) недавно потврдили и просторним симулацијама истог балистичког проблема безмрежном методом хидродинамике изглађених честица (“SPH – smoothed particle hydrodynamics”). На основу овога запажања Мјагков и Шумикин су закључили да се ови резултати очигледно могу тумачити постојањем само-организоване критичности не само у

околини критичне тачке (Oddersedde, 1993) него и у ширем опсегу брзина удара око брзине звука.

На крају, Мјагков и Шумикин су анализирали и однос маса и величина фрагмената у фази стационарне фрагментације и процењивали типичну величину фрагмента коришћењем полупречника инерције. Закључили су да се при средњим и великим масама ( $m > 10$ ) фрагменти могу сматрати за фракталне објекте, што не важи за мале фрагменте. Фрактална димензија фрагмената се благо мења са променом величине система и брзином удара у суперкритичној области. Средња вредност фракталне димензије  $\mathcal{D}_f = 1.88 \pm 0.02$  не разликује се много од одговарајуће величине при перколацији. Аутори су установили, анализом фракталне структуре, постојање сличности међу фрагментима у облаку (илустровано сликом 2.16).



**Слика 2.18.** Зависност експонента кумулативне масе фрагмената,  $1 - \tau_F$ , од нормализоване брзине удара,  $v_{imp}/C_0$ , за две величине кружног пројектила,  $D_{pr}$ . (Љубазношћу др Николаја Мјагкова. Комплетнији сет резултата из референце (Myagkov and Shumikhin, 2005) овде је шематски назначен пољима оивиченим испрекиданим линијама.)

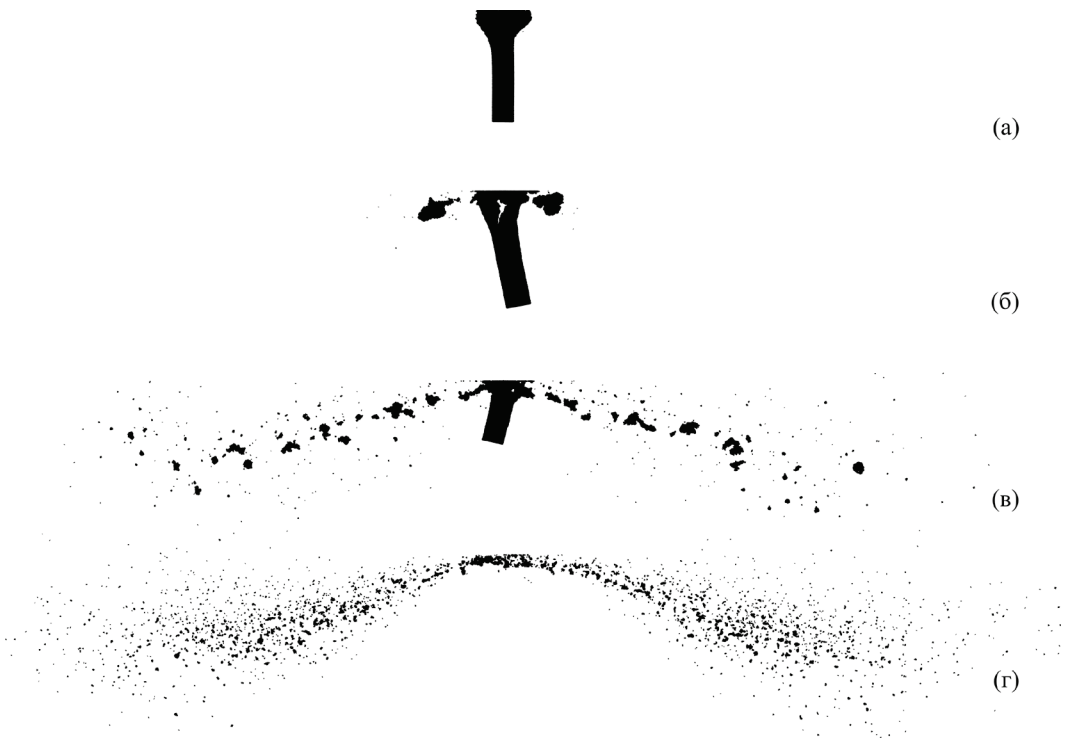
*Мастиловић* (Mastilovic, 2015, 2016, 2017, 2018) је такође изучавао ударну фрагментацију, али симулацијом класичног Тејлоровог балистичког теста (удар витког пројектила равне главе у крути зид). Тејлоров тест (Taylor, 1948) је осведочена метода за испитивање динамичког одзива материјала. Серија 2Д-МД симулација је изведена коришћењем монокристалног нанопроектила са Ленард-Џоунсовим 6-12 потенцијалом (2.5), чији су параметри изабрани да репродукују, колико је могуће, понашање тунгстена ( ${}_{74}\text{W}$ , познат и као волфрамијум): атомска маса  $m_0 = 3.1 \times 10^{-25}$  kg (183.85 u), атомски радијус  $1.4 \text{ \AA}$  ( $\equiv r_0/2$  где је  $r_0$  равнотежно међуатомско растојање), и дубина потенцијалне јаме  $\epsilon_{LJ} = 7.5 \times 10^{-20}$  J.

Једноатомски систем се састоји из атома идентичне масе ( $m_0$ ), распоређених у чворовима идеалне троугаоне мреже без дефеката, који су у међусобном дејству само са најближим суседима. Сходно томе, координациони број у почетној конфигурацији је 6, а потенцијална енергија по атому је  $-2.96 \epsilon_{LJ}$  (изузев атома на ивици пројектила). Верлејев алгоритам (2.3) са временским кораком реда фемтосекунди, коришћен је за интеграцију једначина кретања (2.2). Овај изузетно мали временски корак, у комбинацији са неопходношћу достизања стационарне расподеле фрагмената, чини рачунске симулације изузетно временски захтевним. Витки пројектил ( $l_0 \times d_0 = 110 \times 15 \text{ nm}$ ) се у тренутку удара налази на нултој температури (0 K). (Пречници пројектила су у излагању које следи, ако није другачије наведено, представљени у бездимензионалном облику, нормализацијом са равнотежним међуатомским растојањем,  $\bar{d} = d / r_0$ .) Резултати симулација добијених на нано скали (положај и брзина атома, и интензитет међуатомских сила) користе се за израчунавање макропараметара стања система (температуре и компонената тензора еластичности, напона и релативне деформације) коришћењем израза (2.11, 2.12, 2.15). Веза између два атома се раскида када њихово међусобно растојање прекорачи  $r_{rup} \approx 1.7 r_0$ , дефинисано растојањем првих-најближих и других-најближих суседа у референтној конфигурацији.

Типичне конфигурације забележене током процеса деформације и фрагментације пројектила приказане на слици 2.19 одговарају тренуцима потпуног заустављања нефрагментираног остатка пројектила за три различите брзине удара (са изузетком  $v_{imp} = 3 \text{ km/s}$  која је гранични случај фрагментације пројектила без остатка за брзине удара коришћене у овој анализи; тј.,  $2 \text{ km/s} < v_{i0} < 3 \text{ km/s}$ ). Слика 2.19а приказује карактеристичну печуркасту конфигурацију деформисаних пројектила направљених од жилавих (дуктилних) материјала, која одговара фази деформације ( $v_{imp} < v_0$ ) и представља познату основу за класичне анализе Тејлоровог типа (нпр., Taylor, 1948; Meyers, 1994). Остале конфигурације (слике 2.19б-д) очигледно припадају фази фрагментације ( $v_{imp} > v_0$ ) и, у зависности од интензитета брзине удара, карактеришу се различитим расподелама фрагмената.

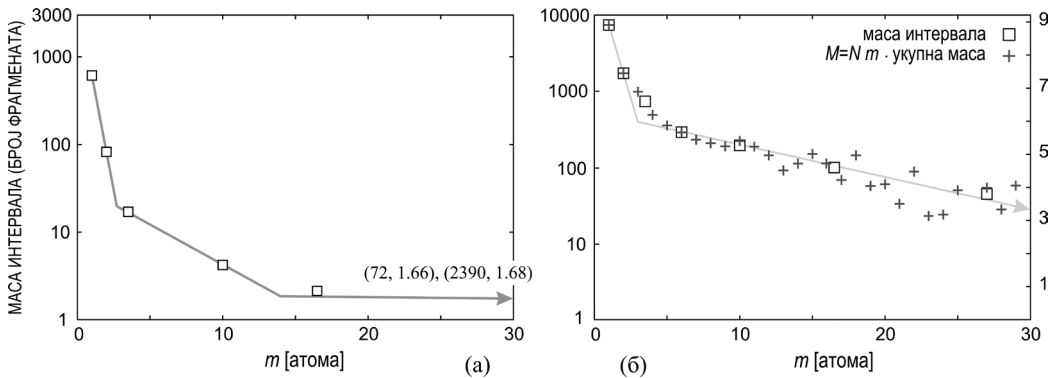
Изабрани статистички приказ стационарне расподеле фрагмената дат је на сликама 2.20 и 2.21, а објашњен у натпису прве од њих (детаљније у изворној референци (Mastilovic, 2015)). Аутор није користио уобичајену кумулативну расподелу фрагмената (2.31) у двоструко-логаритамском простору из два разлога: (i) При малим брзинама удара у околини критичне тачке (тј., фазног прелаза оштећење-фрагментација,  $v_0 = 0.47 \text{ km/s}$ ), огромну већину популације фрагмената чине једноатомски фрагменти, остатком доминирају двоатомски фрагменти, уз тек понеки троатомски и четвороатомски фрагмент и два изразито

велика фрагмента (анализирано детаљно у референцама (Mastilovic, 2015, 2017)); ова оскудност у броју *класа* фрагмената — која произилази из релативно мале ширине витког пројектила ( $\bar{d}_0 = 53$ ) — чини неприкладним представљање расподеле фрагмената коришћењем степене функције. Доминацију једночестичних фрагмената, уз значајан број оних који се састоје из две-три честице, опазили су и разматрали у својим истраживањима и други аутори (нпр., Holian and Grady, 1988; Baker and Warner, 2012). (ii) Расподела маса фрагмената се нужно мења са променом брзина удара у широком опсегу коришћеном у овој анализи [0.27 km/s, 100 km/s]: описани статистички приказ веома је илустративан за све брзине удара и омогућава једноставно и објективно поређење.



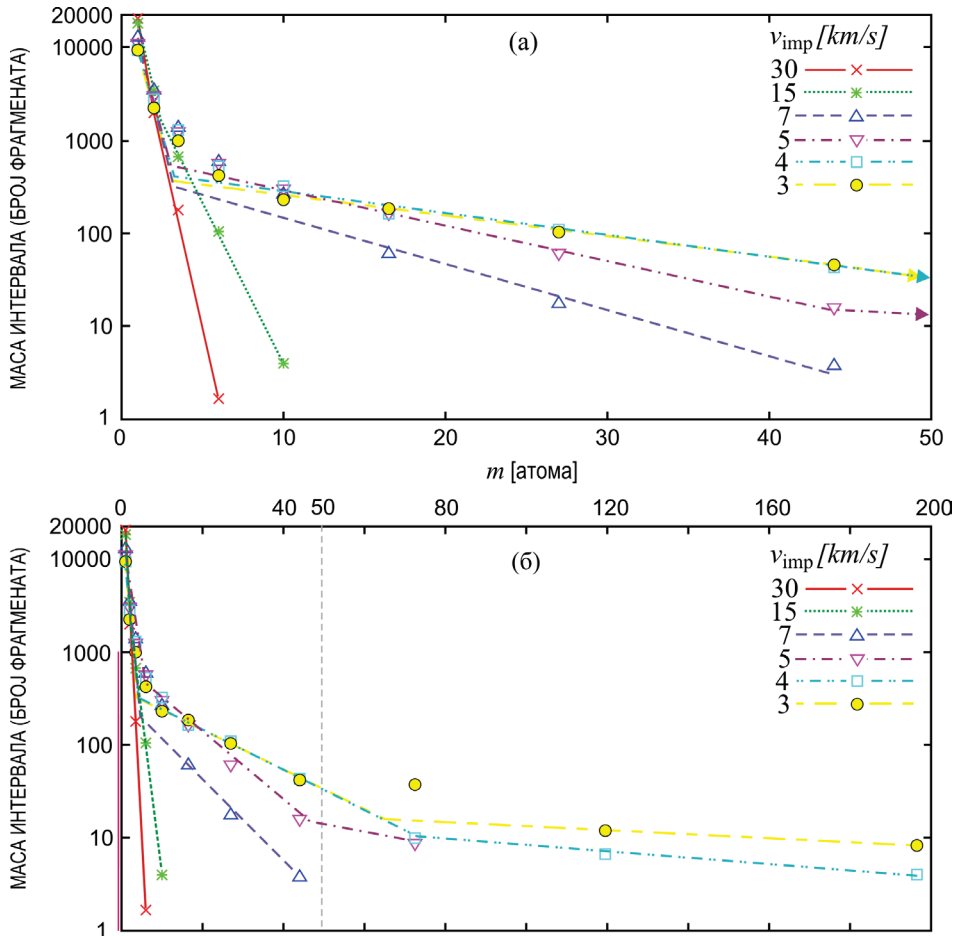
**Слика 2.19.** Конфигурације забележене током процеса деформације и фрагментације пројектила у тренуцима заустављања (нефрагметираног) остатка пројектила при брзинама удара: (а) 0.41 km/s, (б) 0.47 km/s, и (в) 1 km/s. (г)  $v_{\text{imp}} = 3 \text{ km/s} \approx v_{\text{fo}}$ , најнижа брзина удара, коришћена у овој анализи, при којој долази до фрагментације пројектила без остатка. Бочно „распршивање” високотемпературног облака фрагмената подсећа на распад течних капљица приликом судара са зидом коришћен у референци (Timar et al., 2010) у расправи о повећавању ломне жилавости фрагментираних дуктилних материјала услед температуром-изазваног смањења отпорности на смицање. (Mastilovic, 2016).

На слици 2.20а дат је статистички приказ расподеле фрагмената при брзини удара 0.51 km/s (која одговара широј зони фазног прелаза оштећење-фрагментација) коју одликује мали број класа фрагмената, што отежава функционално моделирање расподеле. Сходно томе, уз примерену дозу опреза, условно је прихваћено да се расподела фрагмената илустрована на слици 2.20а може описати билинеарно-експоненцијалном функцијом у целом домену маса фрагмената са изузетком два највећа.



**Слика 2.20.** Статистика фрагмената (повезана са хистограмом) у полулогаритамском (семилогаритамском) простору: број фрагмената ( $N$ ) наспрам масе фрагмента ( $m = n \cdot m_0$ ) при брзинама удара: (а) 0.51 km/s (1.5 Маха, блиско брзини фазног прелаза оштећење-фрагментација,  $v_0 = 0.47$  km/s), и (б) 2 km/s. У циљу појашњавања начина представљања расподеле фрагмената коју је аутор користио (деталји доступни у референци (Mastilovic, 2015)) осврнућемо се на прве три тачке са леве стране слике 2.20а које имају координате (1, 6.415), (2, 4.407), и (3.5, 2.833). Наведене координате резултат су постојања 611 једноатомских фрагмената, 41 биатомског фрагмента, 10 троатомских фрагмената, и једног фрагмента који се састоји од четири атома на основу чега се добија:  $6.415 = \ln(611 \times 1)$ ,  $4.407 = \ln(41 \times 2)$ ,  $2.833 = \ln[(10 \times 3 + 1 \times 4)/2]$ ; треба уочити да је за последњу тачку кумулативна маса свих фрагмената која припада наведеном интервалу ширине 0.5 у логаритамском простору (маса интервала фрагмената) подељена са бројем класа фрагмената које припадају том интервалу (у конкретном случају, подељена са 2 јер трећем интервалу, дефинисаном са  $1 < \ln n \leq 1.5 \Leftrightarrow 2 < n \leq 4$ , припадају фрагменти величина  $n=3$  и  $n=4$ ). Број  $n$ -атомских фрагмената,  $N(m)$ , добија се као количник кумулативне масе свих  $n$ -атомских фрагмената,  $M(m)$ , и одговарајуће масе фрагмента ( $m = n \cdot m_0$ ). Координате представљене на апсциси представљају аритметичку средину маса класа фрагмената које припадају наведеном интервалу; дакле, трећем интервалу припадају троатомски и четвороатомски фрагменти па је просечна маса фрагмента 3.5. (Нефрагментирани остатак пројектила, уочљив на сликама 2.19а-в, не сматра се фрагментом у овој анализи.  $M$  је укупна маса појединачне класе фрагмената: једноатомних, двоатомних, троатомних, итд.). (Преузето из референце (Mastilovic, 2015) са допуштењем издавача. Copyright (2015) by Springer).

Појава два велика фрагмента уско је повезана са фазним прелазом и детаљно анализирана у изворним референцама (Mastilovic, 2015, 2017). Овакви квалитативни трендови у опису расподеле фрагмената уочљиви су не само при  $v_{\text{imp}} = 0.75 \text{ km/s}$  него и у опсегу малих и средњих фрагмената при  $v_{\text{imp}} = 2 \text{ km/s}$  (слика 2.20б). Стационарне расподеле фрагмента које одговарају високобрзинским ударима који превазилазе праг потпуне фрагментације пројектила ( $v_{\text{imp}} \geq v_{f0}$ ) приказане су на слици 2.21. Праве линије, повучене на основу резултата симулација обрађених на описани начин, шематски илуструју главне трендове у расподели фрагмената за шест брзина удара.



**Слика 2.21.** Полулогаритамски приказ стационарне статистике фрагмената: број фрагмената ( $N$ ) наспрам масе фрагмента ( $m = n \cdot m_0$ ) за шест брзина удара у високобрзинском опсегу. (а) Детаљ који одговара малим и средњим масама фрагмената, (б) целокупна расподела. (Преузето из референце (Mastilovic, 2015) са допуштењем издавача. Copyright (2015) by Springer).

Прво опажање у погледу облика расподеле фрагмената је да билинеарно-експоненцијална функција расподеле величина — коју су Холиан и Грејди (1988) уочили при фрагментацији у условима униформног адијабатског ширења — са високим степеном поузданости опстаје и при високобрзинским ударима витких пројектила и то у прилично широком опсегу енергија удара (које према слици 2.21б одговарају интервалу брзина удара  $7 \text{ km/s} \leq v_{\text{imp}} \leq 30 \text{ km/s}$ ). При мањим брзинама удара, уз горепоменути билинеарно-експоненцијални део, истиче се и „реп” расподеле (илустративан је и израз „широко раме” расподеле који се често користи) који одговара великим фрагментима, што доводи до трилинеарно-експоненцијалне расподеле. Појава трилинеарности у опсегу малих и умерених брзина удара,  $v_{\text{imp}} < 7 \text{ km/s}$ , не изненађује када се има у виду да је оригинална билинеарна расподела Холиана и Грејдија (1988) добијена у условима униформног *адијабатског* ширења, које не фаворизује настанак великих фрагманата. При  $v_{\text{imp}} = 7 \text{ km/s}$ , аморфизација материјала индукована ударним таласом, доводи до услова сличних горе наведеном адијабатском ширењу. На основу поређења резултата симулација и података о термодинамичким параметрима стања тунгстена у критичној тројној тачки,  $P_c = (1.1 \pm 0.2) \text{ GPa}$  and  $T_c = (16000 \pm 1000) \text{ K}$ , аутор је увео претпоставку (Mastilovic, 2015) да процес фрагментације при Тејлоровом великобрзинском балистичком тесту ( $v_{\text{imp}} > 3\text{-}4 \text{ km/s}$ ) представља прелаз у хомогени суперкритични флуид, с обзиром на испуњеност услова  $P > P_c$  и  $T > T_c$ . Било како било, уколико се маса фрагмента усвоји за скаларну променљиву, процес насумичне фрагментације се може аналитички описати Поасоновом (Poisson) хипер-експоненцијалном функцијом

$$N(m) = \frac{M(m)}{m} = \sum_{\alpha=1}^n N_{0\alpha} \exp\left(-\frac{m}{\mu_\alpha}\right), \quad N_{0\alpha} = \frac{M_{0\alpha}}{m} \quad (2.33)$$

са циљем да се опишу најупечатљивије особине статистички хетерогене фрагментације. Израз (2.33) је посебни случај хипер-Вејбулове расподеле коју је увео Одинцев (Gradi, 2006 и тамо наведене референце). Коефицијенти расподеле  $\mu_i$  (упоредити са Холиановом и Грејдијевом сликом 2.11 и изразом (2.27)) који се у овој анализи могу проценити на основу нагиба линеарних сегмената у логаритамском простору (слика 2.21) дати су у табели 2-4.

Треба уочити из табеле 2-4 да се коефицијент  $\mu_2$ , који одговара најраспрострањенијем, средњем опсегу класа фрагмената, мења наизглед немонотонно (степенасто), са вредностима које се са протоком времена приближно преполовљавају. Овај интересантни начин промене коефицијента  $\mu_2$



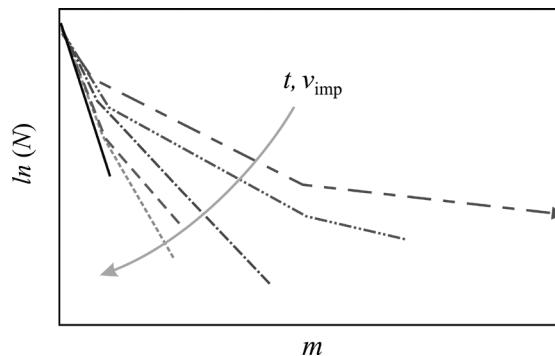
уочен је и при порасту брзине удара, што је шематски приказано на слици 2.22. Узгред, немонотону промену експонента степене функције  $t_F$  у средњем домену маса фрагмената приметили су и Мјагков и Шумикин (Myagkov and Shumikhin, 2005); слика 2.18.

Билинеарно-експоненцијална форма израза (2.33)

$$N(m) = \frac{M(m)}{m} = N_{01} \exp\left(-\frac{m}{\mu_1}\right) + N_{02} \exp\left(-\frac{m}{\mu_2}\right) \quad (2.34)$$

**Табела 2-4.** Еволуција  $\mu$ -коэффицијената за случај расподеле фрагмента при брзини удара 30 km/s илустрованој на слици 2.21. (Преузето из референце (Mastilovic, 2015) са допуштењем издавача. Copyright (2015) by Springer).

$t$ [ps]	$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$
6	0.864	2.30	5.10
7	0.756	2.26	N/A
9	0.594	1.14	N/A
13	0.471	1.13	N/A
18	0.388	0.580	N/A
19	0380	0.540	N/A



**Слика 2.22.** Шематски приказ ефекта повећања дисипације енергије на расподелу фрагмената у процесу ударног сабијања. Тренд повећања, приказан стрелицом, може бити последица повећања брзине удара (упоређивањем раличитих стационарних расподела) или времена трајања процеса фрагментације при произвољно изабраној брзини удара из одговарајућег енергетског опсега (за детаље консултовати (Mastilovic, 2015)). Уочити скоковитост промене нагиба у средњем домену маса фрагмената ( $\mu_2$ ). (Преузето из референце (Mastilovic, 2015) са допуштењем издавача. Copyright (2015) by Springer).

појављује се при брзинама удара  $5 \text{ km/s} < v_{\text{imp}} < 7 \text{ km/s}$  (слика 2.21). Кумулативна расподела фрагмената коју су предложили Холиан и Грејди (1988) за распад при адијабатском ширењу има исти облик.

Сходно резултатима МД симулација представљеним на слици 2.21, повећање енергије удара доводи до трансформације расподеле фрагмената описане следећим трендом

$$\mu_3 \rightarrow \mu_2 \rightarrow \mu_1 \quad (2.35)$$

Дакле, трилинеарна (тримодална) експоненцијална расподела фрагмената прелази, са повећањем енергије удара, у билинеарну (двомодалну) која, опет, тежи линеарној експоненцијалној расподели. Овај тренд конвергира ка потпуном распаду дефинисаном са

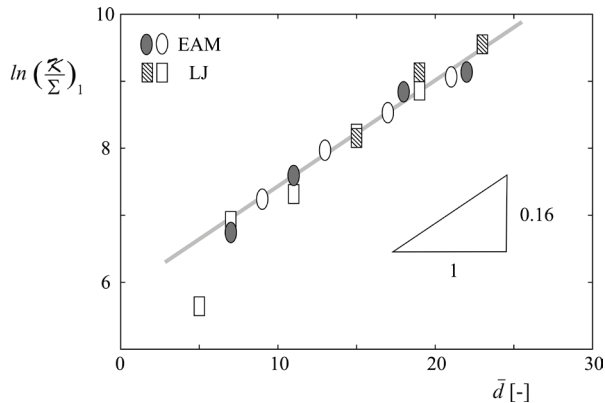
$$v_{\text{imp}} \equiv v_1 \Leftrightarrow m_{\text{max}} \equiv 1 \quad (2.36)$$

односно, прелазу материјала из фрагментиране фазе у фазу једноатомског праха. Сходно томе, терминални фазни прелаз (“shattering transition”; са прагом  $v_{\text{imp}} \equiv v_1$ ) дефинише појава једнообразног облака једноатомских фрагмената (2.36) што одговара детерминистичкој расподели фрагмента. Овај прелаз са стохастичке на детерминистичку расподелу фрагмената, комплетира обрнуто-сигмоидну функционалну зависност  $m_{\text{max}}$  од изабраних макропараметара стања система (слика 2.26), о чему ће бити речи мало касније. Сам енглески израз “shattering” инспирисан је Реднеровом (Redner, 1990) дискусијом математичке патологије (изворни израз), коју је приметио у решењу диференцијалне једначине фрагментације, при којој се маса губи у облаку праха који се састоји од бесконачног броја честица нулте масе (“in which mass is lost to a dust phase consisting of an infinite number of zero mass particles”; Redner, 1990).

Терминална фрагментација, у оквиру постојећих симулација, постигнута је само у случају изузетно малих пројектила при огромним брзинама удара  $v_1$ . Резултати МД симулација приказани су на слици 2.23. Са изузетком најмањег пројектила, све остале процене прага терминалне фрагментације  $(\mathcal{K}/\Sigma)_1$  налазе се прилично близу праве линије назначене у полулогаритамском простору слике 2.23, без обзира на избор међуатомског потенцијала или почетне температуре узорка. На основу ученог тренда може да се предложи следеће релација

$$\left(\frac{\mathcal{K}}{\Sigma}\right)_1 \propto \exp\left(\frac{\bar{d}}{q}\right)$$

у којој  $q$  представља нагиб у полулогаритамском простору, а  $\Sigma$  енергију потребну за раскидање свих међуатомских веза датог система. Претходни израз је заснован на симулацијама са изузетно малим пројектилима због инхерентне немогућности да се терминална фрагментација досегне са већим. Међутим, важно је да се уочи да је то смањење система *суштински* део поступка досезања терминалне фрагментације – *физичка нужност* а не артефакт вођен рачунским погодностима. Нема терминалне фрагментације система чија величина прелази одређену границу. На основу ове анализе постаје јасно зашто се терминална фрагментација тако дуго чинила недостижном. Изузетно велике критичне брзине (нпр.,  $v_1 = 100 \text{ km/s}$  при  $d = 19 r_0 \approx 5.3 \text{ nm}$ ) практично искључују могућност успешних симулација, а још је важније да физичко-хемијски механизми који оперишу при тако екстремним појавама свакако превазилазе оквире применљивости класичне МД.

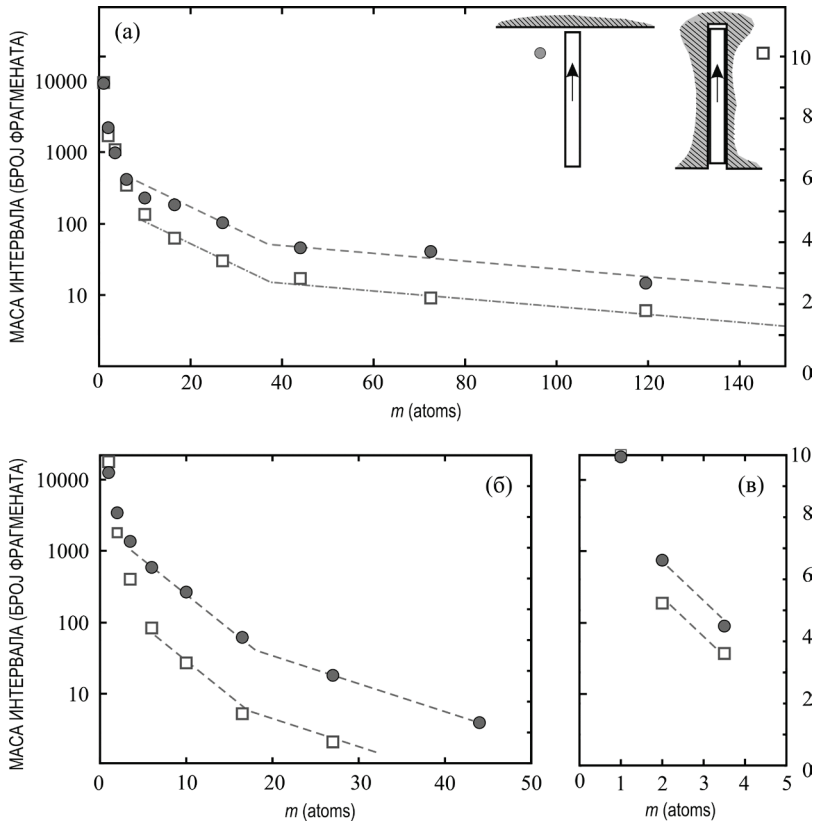


**Слика 2.23.** Полулогаритамски дијаграм зависности нормализоване енергије терминалне фрагментације од пречника пројектила. Симулације су рађене са Ленард-Џоунсовим потенцијалом (LJ, правоугаони симболи) и потенцијалом усађеног атома (EAM, елиптични симболи). Ове поточе су су урађене за две различите почетне температуре: 1 K (празне елипсе) и 1000 K (пуне елипсе). Елиптички симболи означавају просечне вредности осредњене коришћењем резултата пет различитих статистичких реализација Максвел-Болцмановог иницијалног поља брзина атома.

Опсег могућих ударних конфигурација је широк, али спектар њихових ефеката на фрагментацију витког пројектила након управног удара ограничен је са две конфигурације приказане у уметку на слици 2.24а: (i) традиционални Тејлоров тест са неограниченим бочним кретањем атома, и (ii) бочно-стешњени тест. У потоњем случају, пројектил се, са минималним зазором, креће кроз круту рупу без трења дуж бочне границе чиме се опонаша савршено подмазивање. Резултати симулација приказани на слици 2.24 указују да очекивано повећање притиска и температуре узроковано бочном стешњеношћу резултира веома специфичним вертикалним помаком Поасонове хипер-експоненцијалне

расподеле маса фрагмента (2.33) у односу на традиционални Тејлоров тест. Наиме, расподеле маса фрагмента за два ограничавајућа случаја бочне стешњености очигледно су дефинисане практично истим вредностима коефицијената  $\mu_2$  (и  $\mu_3$ , када је применљиво) који квалитативно дефинишу расподелу свих осим најмањих фрагмената. (Ови најмањи фрагменти, дефинисани са  $\mu_1$ , често се занемарују у потпуности у анализама.) Коначно, ефекат бочне стешњености се одражава већим градијентом коначног броја фрагмената са повећањем ударне брзине, о чему ће бити речи касније (слика 2.29б).

Познавање зависности највеће масе фрагмента ( $m_{\max}$ ) од брзине удара је од очигледне важности у инжењерској пракси. Резултати 2Д-МД симулација приказани на слици 2.25а сугеришу да је при значајном опсегу брзина удара које превазилазе праг потпуне фрагментације пројектила ( $v_{f0} \approx 2\div 3 \text{ km/s} < v_{\text{imp}} < 15\div 20 \text{ km/s}$ ), највећа маса фрагмента обрнуто пропорционална енергији удара (кинетичкој енергији пројектила)



**Слика 2.24.** Полулогаритамски дијаграм статистика кластера за две граничне конфигурације удара и три брзине удара из хипербрзинског опсега. Дијаграми броја фрагмената одређене масе одговарају брзинама удара: (а) 3 km/s, (б) 7 km/s, и (в) 30 km/s.

$$m_{\max} \propto v_{\text{imp}}^{-2} \Leftrightarrow m_{\max} \propto \mathcal{K}_0^{-1} \quad (2.37)$$

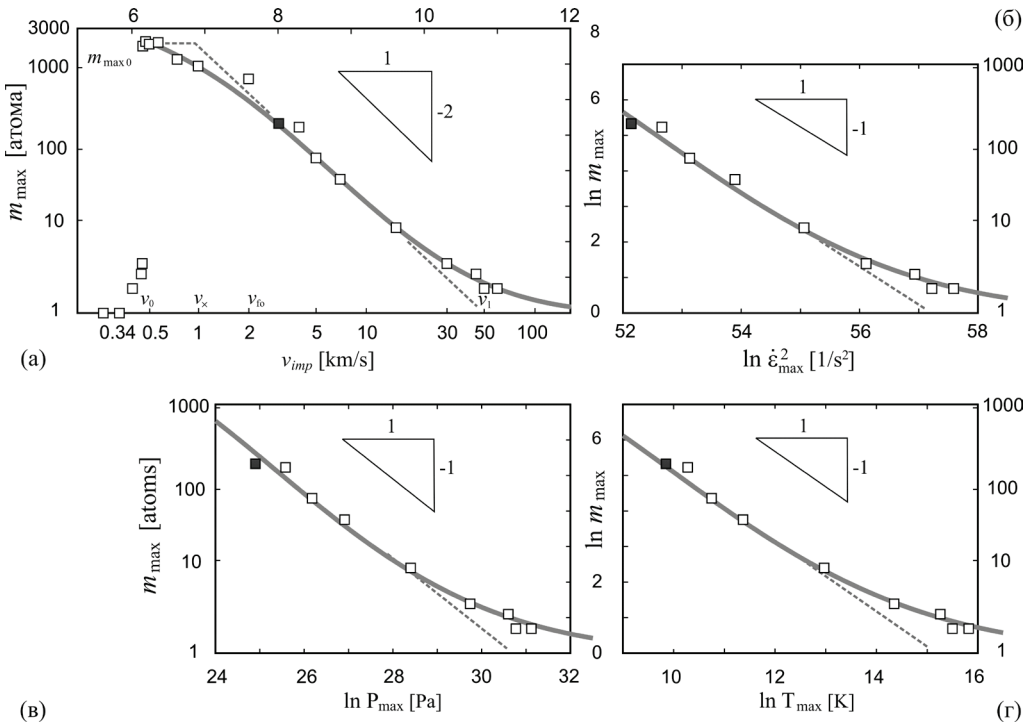
Треба приметити да управо наведени опсег брзина све више добија на важности у балистичкој пракси. Предложен је билинеарни модел (Mastilovic, 2015) који би се, имајући у виду потоња сазнања, могао представити у нешто измењеном облику

$$m_{\max} \begin{cases} \ll m_{\max 0}, & v_{\text{imp}} < v_0 \\ = m_{\max 0}, & v_0 \leq v_{\text{imp}} \leq v_x \\ = m_{\max 0} \cdot \left( \frac{v_{\text{imp}}}{v_x} \right)^{-2}, & v_x < v_{\text{imp}} < 20 \text{ km/s} \end{cases} \quad (2.38)$$

Примена апроксимације (2.38<sub>3</sub>) преко датих граница ваљаности доводи до нереално ниске процене брзине терминалне фрагментације,  $v_1 \approx 45 \text{ km/s}$  (Mastilovic, 2015). Мада су касније анализе показале да при овој брзини удара не долази до терминалног фазног прелаза ( $m_{\max} = 3$ ; Mastilovic, 2017) наведена екстраполација је ипак корисна јер даје грубу процену доње међе за  $v_1$ .

Зависност  $m_{\max}$  од изабраних макропараметара стања система, илустрована на слици 2.25б-г, показује идентичне трендове понашања у области високобрзинских удара. Три макроскопска параметра стања су средњи нормални напон,  $P = (\sigma_x + \sigma_y)/2$  (2.11); тренутна кинетичка температура,  $T$  (2.15); и ефективна релативна деформација,  $\varepsilon_{\text{eff}} = \sqrt{(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2)}/2$ , заснована на природној дефиницији компонената (2.14б). Прва инваријанта напона,  $P$ , представља меру сила интеракције између материјалних честица које се налазе у оквиру површина осредњавања (слика 2.4), док тренутна кинетичка температура,  $T$ , представља меру интензитета подрхтавања, тј. вибрационог, „насумичног” дела, кретања у односу на „систематски” део (Fung, 1977, стр. 4). Пример промена притиска и температуре, на четири површине осредњавања које играју улогу мерних трака (од укупно осам приказаних на слици 2.5), при симулацији Тејлоровог балистичког теста илустрован је на слици 2.6. Слика 2.7 приказује изглед температурног поља у изабраним временским тренуцима. Резултати МД симулација указују да је, у оквиру ваљаности апроксимације (2.38<sub>3</sub>), максимална маса фрагмента обрнуто сразмерна максималним вредностима притиска и температуре:

$$m_{\max} \propto P_{\max}^{-1}, \quad m_{\max} \propto T_{\max}^{-1} \quad (2.39)$$



**Слика 2.25.** Зависност максималне масе фрагмента од брзине удара представљена у логаритамском простору у целом опсегу брзина (а) и од максималних вредности три изабрана макроскопска параметра стања: (квадрата) брзине ефективне релативне деформације (б), притиска (в), и тренутне кинетичке температуре (г) у високобрзинском опсегу удара. (Подаци приказани пуним квадратима одговарају  $v_{\text{imp}} = 3 \text{ km/s}$ , што је нешто мало изнад прага високобрзинског удара,  $v_{f0}$ ; подаци представљени крајње десно одговарају  $v_{\text{imp}} = 60 \text{ km/s}$ . (Случајно или не,  $v_{\times} \approx 1.2 \text{ km/s}$  (Mastilovic, 2015) одговара равнотежи између почетне кинетичке енергије и потенцијалне енергије по атому.) (Mastilovic, 2017)

Максималне вредности изабраних макроскопских параметара стања представљају аритметичке средине одговарајућих вредности забележених на површинама осредњавања распоређеним дуж осе симетрије пројектила ( $\mathcal{A-D}$ ).

Сразмере дате изразом (2.39) индиректно указују на линеарност одговарајућих вредности притиска и температуре у облаку плазматичних фрагмената, што је у складу са законом идеалног гаса.

Класични Грејдијев модел динамичке фрагментације (Grady, 1982) преко механизма унакрсног укрштања смицајних трака у дуктилном материјалу изложеном ударном сабијању, одређује да је просечно растојање смицајних трака обрнуто сразмерно брзини промене релативне деформације. Како је примећено у референци (Mastilovic, 2015), када се овај приступ — заснован на премиси да се енергија међупростора, створена током фрагментације,

уравнотежава са локалном кинетичком енергијом материјала — примени у тренутно разматраном раванском (2Д) оквиру, просечна маса фрагмента бива обрнуто сразмерна квадрату брзине промене релативне деформације. Идентична сразмерност између максималне масе фрагмента и брзине промене максималне релативне деформације

$$m_{\max} \propto \dot{\epsilon}_{\max}^{-2} \quad (2.40)$$

са великим степеном поузданости следи из резултата 2Д-МД симулација приказаних на слици 2.25б, које се односе на добар део опсега високобрзинског удара ( $3 \text{ km/s} \leq v_{\text{imp}} \leq 15 \div 20 \text{ km/s}$ ).

Ако се енергија удара,  $\mathcal{Z} = m v_{\text{imp}}^2 / 2$ , усвоји за контролни параметар, обрнуто-сигмоидна зависност максималне масе фрагмента од групе макроскопских параметара стања (слика 2.25) означене генеричком променљивом стања  $\Xi \in \{\mathcal{Z}, P_{\max}, T_{\max}, \dot{\epsilon}_{\max}^2\}$  у *целокупној* фази фрагментације може да се прикаже изразом (Mastilovic, 2017)

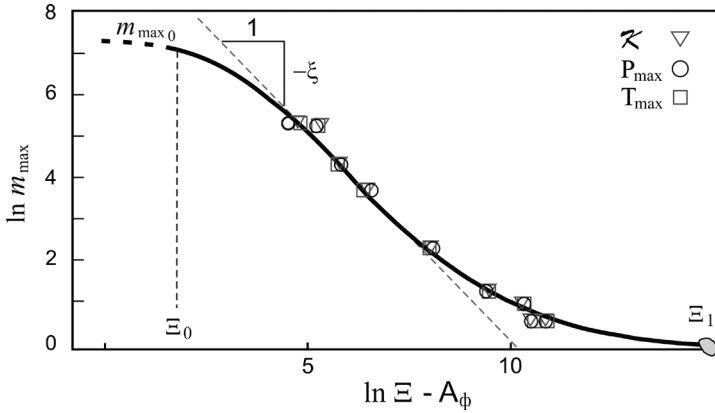
$$\ln m_{\max} = M_0 \cdot \exp \left[ \left( \frac{\ln \Xi_0 - A_\phi}{B_\phi} \right)^{C_\phi} - \left( \frac{\ln \Xi - A_\phi}{B_\phi} \right)^{C_\phi} \right], \quad (\Xi \geq \Xi_0) \quad (2.41)$$

илустрованим на збирној слици 2.26. Феноменолошки модел (2.41) је развијен на основу обрнуто-сигмоидног облика Вејбулове (Weibull) једначине, где ( $A_\phi$ ,  $B_\phi$ ,  $C_\phi$ ) означавају параметре подешавања. Параметри означени са доњим индексом “0” односе се на критичну тачку ( $\Xi_0$ ,  $m_{\max 0}$ ) која одговара прагу прелаза из фазе оштећења у фазу фрагментације о чему ће бити више речи касније. Нелинеарни емпиријски израз (2.41) занемарује откидање минималних фрагмената (већином, једноатомских и двоатомских) у фази оштећења (слика 2.25а) која претходе фази фрагментације ( $v_{\text{imp}} < v_0$ ;  $\Xi < \Xi_0$ ).

У изворној референци (Mastilovic, 2017) је показано, на основу израза (2.41) и слике 2.26, да три параметра подешавања ( $A_\phi$ ,  $B_\phi$ ,  $C_\phi$ ) нису међусобно независни већ морају да задовољавају следеће услове из линеарног домена

$$\xi = \ln m_{\max 0} \cdot \frac{C_\phi}{B_\phi} \cdot \exp \left[ -1 + \frac{1}{C_\phi} + \left( \frac{\ln \Xi_0 - A_\phi}{B_\phi} \right)^{C_\phi} \right], \quad \ln \Xi_\xi = A_\phi + B_\phi \cdot \left( 1 - \frac{1}{C_\phi} \right)^{1/C_\phi} \quad (2.42)$$

Тачка превоја (2.42) је једнозначно одређена из услова да у њој други извод израза (2.41) мора да буде једнак нули.



**Слика 2.26.** Шематски приказ зависности максималне масе фрагмента од генеричке променљиве стања  $\Xi \in \{z, P_{\max}, T_{\max}, \varepsilon_{\max}^2\}$ . Дискретне вредности представљене симболима добијене су са слике 2.25 уз одговарајуће хоризонталне транслације.

Емпиријски израз (2.41) не може формално да обухвати терминалну фрагментацију,  $v_{\text{imp}} = v_1 \Leftrightarrow m_{\text{max}} \equiv 1$ , изузев као асимптоту,  $\lim(m_{\text{max}}) = 1$ , илустровану шематски са апсцисом на слици 2.26. Фитовање резултата симулација изразом (2.41) открива не само да параметри подешавања  $B_\phi$  и  $C_\phi$  имају исте вредности за све четири макроскопске величине представљене генеричком променљивом  $\Xi \in \{z, P_{\max}, T_{\max}, \varepsilon_{\max}^2\}$ , већ и да важе релације

$$B_\phi \approx \ln m_{\text{max}0}, \quad C_\phi \approx 2\xi \tag{2.43}$$

Сходно томе, израз (2.41) може бити написан у следећем облику

$$\ln m_{\text{max}} = \ln m_{\text{max}0} \cdot \exp \left[ 1 + \ln \frac{1}{2} - \frac{1}{2\xi} - \left( \frac{\ln \Xi - A_\phi}{\ln m_{\text{max}0}} \right)^{2\xi} \right] \tag{2.44}$$

Дакле, нелинеарни феноменолошки модел максималне масе фрагмента описан је истом обрнуто-сигмоидном кривом зависности од свих горе наведених макроскопских величина када се генеричка независно променљива,  $\ln \Xi$ , транслира за одговарајуће вредности  $A_\phi$  како је то приказано на слици 2.26 и у референци (Mastilovic, 2017).

Коначно, утицај величине система на праг транзиције из фазе оштећења у фазу фрагментације, опажен у балистичким Тејлоровим тестовима (Mastilovic, 2016), проширен је на витке пројектиле коришћењем зависности критичне брзине удара од пречника пројектила у облику

$$v_0(d) = v_0(\infty) + A\bar{d}^{-1/\nu}, \quad \bar{d}_L \leq \bar{d} \tag{2.45}$$



коју су увели Тимар и сарадници (Timar et al., 2012). На основу резултата 2Д-МД симулација приказаних на слици 2.27, Мاستиловић (2018) је предложио доњу међу ваљаности израза (2.45) имајући у виду да при ударној фрагментацији витких пројектила у области малих величина ( $\bar{d} < \bar{d}_L \approx 29$ ) критична брзина удара постаје неосетљива на пречник пројектила. Вредности критичне ударне брзине пројектила неограничене величине и експонента корелационе дужине фазног прелаза из израза (2.45) одређене су да су  $v_0(\infty) = 0.40 \text{ km/s}$  и  $\nu = 0.77 \pm 0.01$ , тим редом (Mastilovic, 2018).

С обзиром на резултате пионирске студије Куна и Хермана (Kun and Herrmann, 1999) може да се претпостави да: (i) систем пролази кроз континуални фазни прелаз у критичној тачки ( $\mathcal{K}_0, m_{\max 0}$ ), (ii) максимална маса фрагмента ( $m_{\max}$ ) или просечна маса фрагмента ( $m_{ave}$ ) су најпогоднији кандидати за параметар уређености фазног прелаза, и (iii) кинетичка енергија удара пројектила ( $\mathcal{K}_0 = mv_0^2/2$ ) је контролни параметар фазног прелаза (у прегледу који следи у ту сврху је коришћена одговарајућа брзина удара,  $v_0$ , зарад бољег интуитивног осећаја величине). Такође, у даљем излагању, за параметар уређености изабрана је просечна маса фрагмента, дефинисана аритметичком средином вредности количника другог и првог момента маса фрагмената (за одређени број статистичких реализација)

$$m_{ave} = \left\langle \frac{M_2}{M_1} \right\rangle \quad (2.46)$$

У изразу (2.46),  $k$ -ти моменти расподеле фрагмената дефинисани су при свакој појединој реализацији фрагментације као

$$M_k = \sum_i m_i^k - m_{\max}^k, \quad (k=1,2) \quad (2.47)$$

при чему се сабирање врши коришћењем свих фрагмената  $m_i$  док се вредност највеће масе фрагмента одузима од  $M_k$  (Timar et al., 2012). Са слике 2.28а се види да се коришћењем  $m_{ave}$  као параметра уређености (уместо  $m_{\max}$ ) уочљивије истиче праг фазног прелаза, јасно приметним максимумом који постаје све израженији са повећањем величине система, сугеришући тренд ка сингуларитету параметра уређености који је карактеристичан за бесконачне системе.

Просечна маса фрагмента (2.46) одсликава колебања (флукуације) маса фрагмената (Stauffer and Aharoni, 1992; Kun and Herrmann, 1999; Timar et al, 2012). Сходно томе, имајући у виду горе наведену претпоставку да систем показује особине континуалног фазног прелаза, скалирање просечне масе фрагмента за систем коначне величине може се представити у облику

$$m_{ave} = d^{-\gamma/\nu} \mathcal{F} \{ [v_i - v_0(\infty)] d^{1/\nu} \} \quad (2.48)$$

при чему  $\mathcal{F}$  означава функцију (која је предмет) скалирања (нпр., Timar *et al.*, 2012), а  $\gamma$  експонент фазног прелаза оштећење-фрагментација. Слика 2.28б илуструје преклапање („колапс“) скалираних кривих  $m_{ave} = \hat{m}_{ave}(v_{imp}, \bar{d})$  (2.48) за  $\bar{d} \in \{33, 45, 53\}$  при критичној вредности ударне брзине бесконачног система,  $v_0(\infty) = 0.40$  km/s, идентификованој са слике 2.27. Најбоље преклапање се постиже при вредности експонента скалирања  $\gamma = 1.04 \pm 0.02$ . Ова вредност експонента је већа од вредности коју су добили Тимар и коаутори (Timar *et al.*, 2012) у њиховој анализи ударне фрагментације лоптастих пројектила коришћењем просторних модела дискретних елемената (ДЕМ). Ова разлика је у сагласности са опажањем изнетим у истом раду (Timar *et al.*, 2012) да је вредност експонента  $\tau_F$  одређена димензионалношћу система (1Д, 2Д, 3Д).

Детаљан преглед зоне критичне тачке (уметак слике 2.28б) истиче, не само добро преклапање кривих за три изабрана пречника пројектила у полуинтервалу  $\bar{d} \geq \bar{d}_L$ , него и транслирање врха кривих улево при малим вредностима пречника пројектила,  $\bar{d} = 19 < \bar{d}_L$ , које на слици 2.27 одговарају празним правоугаоним симболима. Ово опажање подсећа на тврдњу Крафта и коаутора (Kraft *et al.*, 2010) да нема закона скалирања са једним универзалним експонентом који обухвата сав опсег зависности од величине система (“there is no scaling law with one universal power-law exponent encompassing the entire size-dependent range (of the mechanical strength).”

Конечно, аутор се осврнуо на коначни број фрагмената досегнут на крају процеса фрагментације,  $n_{fin}$ , као важну количинску меру степена распада пројектила (Behara *et al.*, 2005; Sator and Nietala, 2010). У референци (Mastilovic, 2018) је опажено да се појава  $m_{max0}$  (идентификована са критичном тачком фазног прелаза) подудара са симултаним откидањем два велика фрагмента међусобно упоредивих маса, што је праћено што је могуће мањим облаком једноатомских фрагмената. Аутор је извео емпиријски израз за геометријску процену  $m_{max0}$  узимајући у обзир кристалографску оријентацију монокристалног пројектила равне главе и типичне облике простирања ударних таласа и таласа оштећења (Mastilovic, 2017). Резултати 2Д-МД симулација (Mastilovic, 2018) приказани на слици 2.29а подржавају закључак Бехаре и коаутора (Behara *et al.*, 2005) да је број фрагмената сразмеран природном логаритму брзине удара (нормализоване са критичном брзином удара)

$$n_{fin} \propto \ln \left( \frac{v_{imp}}{v_0} \right), \quad v_0 < v_{imp} < v_L \quad (2.49)$$

Према резултатима симулација објављеним у (Mastilovic, 2018), у области фазног прелаза оштећење–фрагментација долази до наглог повећавања  $n_{fin}$ , што је образложено емитовањем великог броја малих фрагмената (доминантно једноатомских; Mastilovic, 2015) које, због индиковане термалне побуде, прати откидање пара великих фрагмената. Сходно томе, изгледа да укупни број фрагмената,  $n_{fin}$ , може да се сматра кандидатом за параметар уређености тог фазног прелаза. Са слике 2.29 је очигледно да  $n_{fin}$  почиње да одступа од сразмерности наглашене изразом (2.49) при изузетно високим брзинама удара које се приближавају терминалној фрагментацији

$$\lim_{v_i \rightarrow v_l} \left( \frac{n_{fin}}{N_{at}} \right) = 1 \quad (2.50)$$

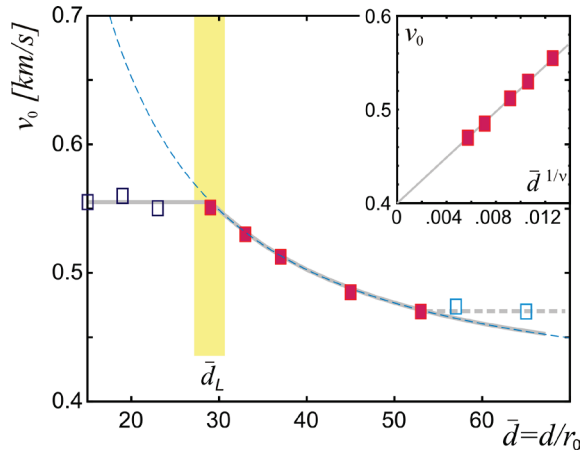
Дакле, процес фрагментације се асимптотски приближава терминалној фрагментацији дефинисаној детерминистичком расподелом фрагмената (2.31). На основу слике 2.29а, брзина удара  $v_L$ , која одговара одступању од линеарности (2.49) је осетљива на величину пројектила. Гранична вредност  $v_L \approx 30 \text{ km/s}$ , за  $\bar{d} = 53$ , подудара се прилично добро са горњом међом ваљаности линеарне апроксимације (2.38) (Mastilovic, 2015).

Сатор и Хиетала (Sator and Nietala, 2010) су, приликом истраживања оштећења насталог током ударне фрагментације 2Д кружних дискова, приметили линеарну сразмерност

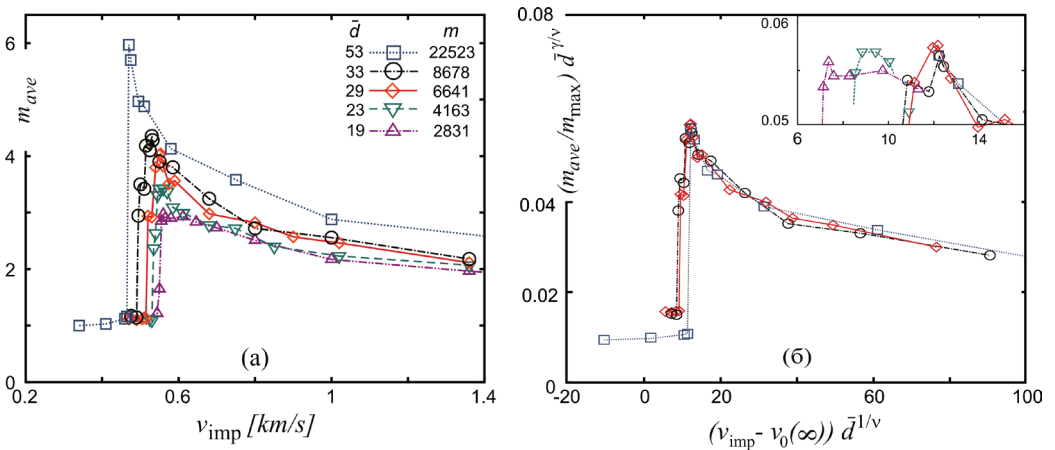
$$D_{fin} \propto n_{fin} \quad (2.51)$$

између коначне вредности скаларног параметра оштећења,  $D_{fin}$ , и укупног броја фрагмената у стационарном режиму,  $n_{fin}$ . Из (2.51) очигледно следи да је процес дефинисан са (2.50) аналоган асимптотском прилазу граничној вредности оштећења,  $D_{fin} = 1$ . Важност овог опажања произлази из чињенице да, за разлику од евалуације укупног броја фрагмената, експериментално мерење еволуције оштећења још увек представља изазов, поготово у случају динамичког оштећења жилавих материјала; (Mastilovic, 2018) и тамо наведене референце.

Ефекат бочне стешњености се на слици 2.29б одражава стрмијим нагибом линеарног дела кривих (2.49) што је у складу са повишеним нивоима притиска и температуре који одговарају ударној фрагментацији у условима бочне стешњености. Интересантно је да брже повећање укупног броја фрагмената у условима бочне стешњености подсећа на ефекат смањења димензија пројектила (слика 2.29а). Без обзира на оскудност расположивих деформационих механизма у садашњем симулационом оквиру, ова кореспонденција између смањења величине узорка и пораста бочне стешњености има физичког смисла, јер је у оба случаја пластична деформација потиснута, што погодује настанку оштећења.

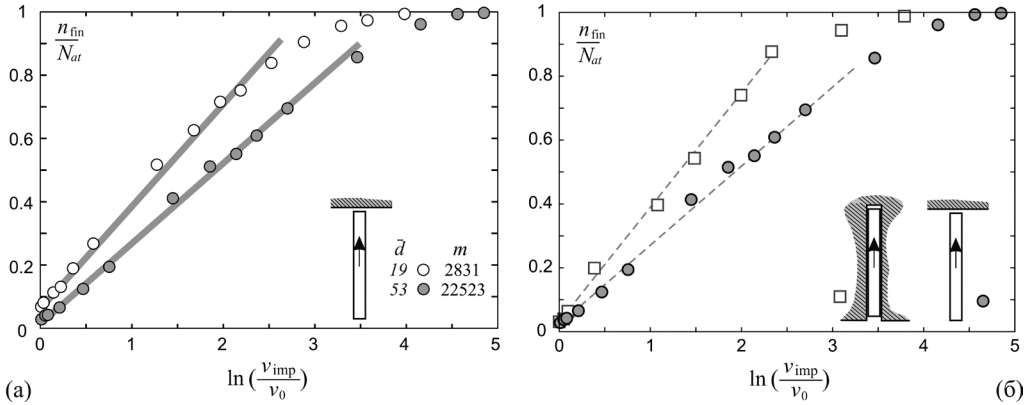


**Слика 2.27.** Промена критичне брзине удара (прага фазног прелаза оштећење-фрагментација) у зависности од пречника пројектила. Уметак: Функционална зависност  $v_0$  наспрам  $\bar{d}^{1/\nu}$  добијена за вредност експонента  $1/\nu = 1.30$  одређеног на основу израза (2.45); пет тачака (означених пуним црвеним правоугаоницима), које припадају делу главне слике са функционалном зависношћу у облику степене функције, указују на критичну вредност ударне брзине бесконачног система,  $v_0(\infty) = 0.40$  km/s (Mastilovic, 2018).



**Слика 2.28.** (а) Просечна маса фрагмента у зависности од брзине удара за пет различитих пречника пројектила исте виткости ( $\lambda \approx 7.5$ ). (б) Преклапање кривих  $m_{ave} = \hat{m}_{ave}(v_{imp})$  које одговарају трима различитим пречницима пројектила ( $\bar{d} \in \{29, 33, 53\}$ ) који припадају домену на слици 2.27 аналитички описаном са степеном функцијом; пуну црвени правоугаоници) које се добија скалирањима брзине удара ( $v_{imp}$ ) и просечне масе фрагмента ( $m_{ave}$ ) коришћењем израза (2.45) односно (2.48) (Mastilovic, 2018). Уметак: детаљ главне слике под (б) који наглашава положај врхова кривих за  $\bar{d} \in \{19, 23\}$  додатих ради илустрације хоризонталне translације врха кривих које припадају хоризонталном платоу малих ударних брзина видљивом на слици 2.27 (празни тамно-плави правоугаоници). (Mastilovic, 2018)

Ова супресија у случају "пластичности у ограниченим димензијама" је одавно уочена за квази-статичка оптерећења и детаљно се разматра у литератури као нова тема експерименталних напора усмерених на понашање материјала при малим димензијама (нпр., Kraft et al., 2010).

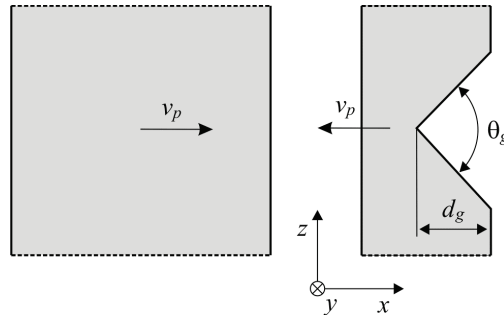


**Слика 2.29.** Укупни број фрагмената (нормализован са укупним бројем атома система) наспрам природног логаритма брзине удара (нормализоване са критичном брзином удара): (а) за два пречника пројектила (Mastilovic, 2018), (б) за два гранична нивоа бочне стешњености.

Хе и коаутори су користили МД за симулацију фрагментације наномлазова насталих када се: (i) монокристална бакарна плоча са зарезом оптерети ударним таласом (He et al., 2015), или (ii) нанофолија оптерети линеарним једноосним градијентом брзина (He et al., 2016).

У првом случају, атоми узорака су распоређени у кубну површински-центрирану ("FCC – face-centered cubic") решетку. Конфигурација овог виртуелног експеримента шематски је приказана на слици 2.30: судар ударне плоче (лево) и два пута тање плоче са зарезом, која представља мету, доводи до настанка ударних таласа. Ударни таласи се, потом, простиру кроз плоче у правцу  $x$  (који одговара  $[100]$  кристалографском правцу) релативном брзином удара ( $v_{imp} = 2 v_p$ ), док су у друга два правца ( $y$  и  $z$  који одговарају, редом, кристалографским правцима  $[010]$  и  $[001]$ ) успостављени периодични гранични услови (поглавље 2.3). Тренутак доласка ударног таласа на леву границу мете (врх зареза) дефинише референтно нулто време после кога, по одбијању ударног таласа од слободне површине, у мету продире затезни талас који доводи до фрагментације. Ради смањења рачунарског оптерећења и спречавања контаминарајућег ефекта потоњег одбијања таласа кроз узорак, рачунски домен се редукује у наставку симулације тако што се у обзир узимају само атоми (у области слободне површине мете) који су се у виду млаза отргли од главног

дела бакарне мете. Међуатомска дејства одређене су потенцијалом усађеног атома типа (2.8) који је развио Вотер са сарадницима (Mishin et al., 2001).



**Слика 2.30.** Шематски приказ модела судара плоче коришћен у (He et al., 2015). После судара и простирања ударних таласа, највећи део плоче са зарезом остаје у чврстом агрегатном стању али, због настанка високе температуре у танком слоју материјала чија вредност значајно превазилази температуру топљења, гранични слој плоче на бочној страни са зарезом прелази у течно агрегатно стање и бива избачен у виду млаза.

За интеграцију једначина кретања употребљен је Верлејев алгоритам (2.3) са временским кораком  $\delta t = 1$  fs. Пре наношења ударног оптерећења, узорак је уравнотежен на одређеној температури (2.15а) насумичним избором интензитета вибрационих брзина (2.16) из Максвел-Болцманове расподеле (2.17). За три различите димензије плоче ( $108.9 \times 36.3 \times 36.3$  nm,  $108.9 \times 36.3 \times 54.4$  nm, и  $245 \times 54.4 \times 72.6$  nm) коришћени су, истим редом, зарези дефинисани следећим параметрима:  $(d_g, \theta_g) = (10$  nm,  $60^\circ)$ ,  $(10$  nm,  $120^\circ)$ , и  $(50$  nm,  $60^\circ)$ .

Типична еволуција наномлаза при притиску 120 GPa води ка развоју 2Д наномлаза који се у виду танке плоче „растеже” у  $xu$  равни услед постојања градијента брзина у  $x$ -правцу. Услед неравномерног простирања млаза настаје мрежа случајно-распоредених 2Д пора у  $xu$ -равни које се временом шире и међусобно срастају чиме, коначно, настају фрагменти у виду капљица облика који све више и више, због деловања површинских сила, постаје лоптаст. Хе и коаутори (He et al., 2015) су детаљно приказали еволуцију расподеле фрагмената из које, на крају, произилази стационарна расподела шематски приказана на слици 2.31а. Расподелу одликује препознатљива комбинација две степене функције облика

$$N(V) \propto V^{-\tau_f} \quad (2.51)$$

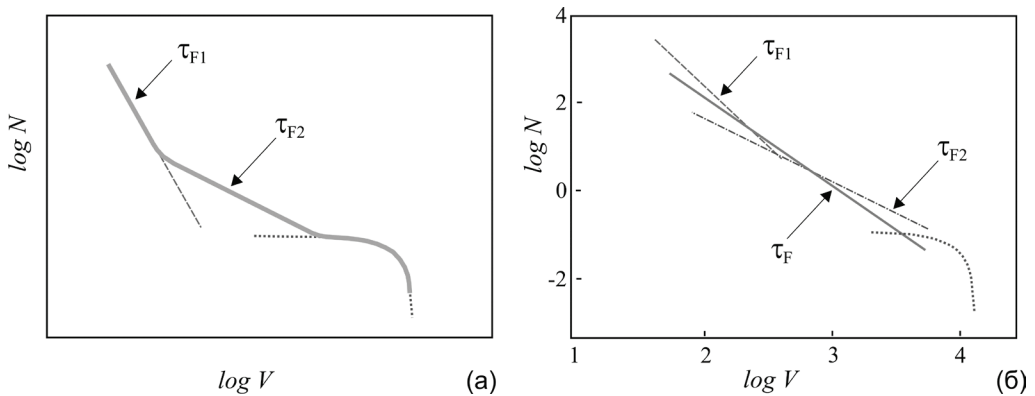
(где су  $N$  и  $V$ , редом, број и запремина фрагмената) и „широко раме” расподеле у опсегу највећих фрагмената (слика 2.31а).

Хе и сарадници су у овој анализи занемарили област најмањих фрагмената приписаних испаравању на високо-температурним површинама (описаних степеном функцијом дефинисаном на слици 2.31а са експонентом  $\tau_{F1}$ ). Експонент степене расподеле у другој области  $\tau_{F2} \approx 1.15$  у сагласности је са 2Д

моделом перколације веза (Staufer and Aharoni, 1992) што се тумачи опажањем да је стварање фрагмената комплементарни исход процеса 2Д перколације пора. Детаљна дискусија дата је у изворном раду (He et al., 2015). У овом сажетку биће наглашене само следећа најосновнија опажања:

(i) фрагменти средњих величина веома рано у процесу распада поприме стабилан лоптаст облик и након тога се углавном не мењају; одговарајућа расподела фрагмената у облику степене функције нема карактеристичну димензију. Насупрот томе,

(ii) велики фрагменти су сложеног, квази-цилиндричног облика те су подложни даљем распаду до постизања стационарне расподеле. Овај процес секундарне фрагментације издужених, великих фрагмената има елементе једнодимензионалног Поасоновог процеса случајног распада који се у теорији поистовећује са експоненцијалном (или, у случају малих величина статистичких узорака, биномном) расподелом (Grady, 2006). За разлику од степених расподела, ове расподеле имају карактеристичну дужинску скалу која је, сходно Грејдијевој анализи енергетске равнотеже, резултат надметања између унутрашње енергије и површинске енергије фрагмента.



**Слика 2.31.** Шематски приказ стационарне расподеле запремина фрагмената у наномлазу насталом из зареза  $(d_g, \theta_g) = (10 \text{ nm}, 60^\circ)$  приликом ударног таласа од: (а) 120 GPa и, највећим делом, 280 GPa, и (б) 420 GPa (расподела одговара само чеоном сегменту млаза у коме се одвија 3Д распршивање). (Репродуковано на основу података из референце (He et al., 2015).)

Резултати симулација указују на поступност промене расподеле фрагмената са повећањем интензитета удара. При ударном таласу од 280 GPa, шематика расподеле фрагмената је — упркос очекиваном повећању њиховог броја у односу на 120 GPa — још увек, у највећој мери, квалитативно слична, укључујући и готово идентичне вредности експонената ( $\tau_{F1} \approx 3.3 \div 3.6$  и  $\tau_{F2} \approx 1.15$ ). Ово је јасно видљиво са илустрација типичних плочастих наномлазова

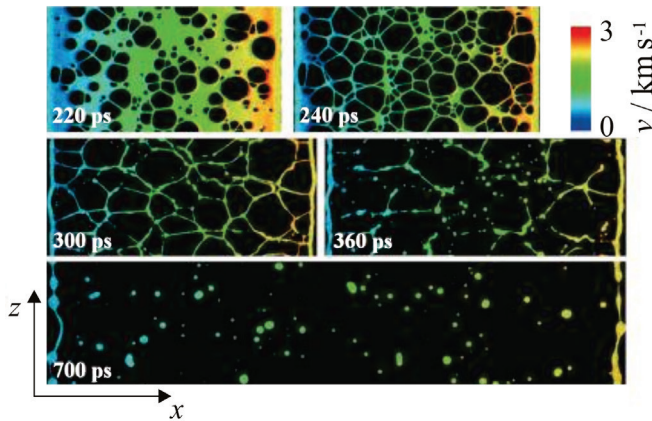
насталих интеракцијом ударног таласа са површинским зарезом доступних у изворној референци (He et al., 2015). Међутим, са даљим повећавањем интензитета ударног таласа (420 GPa) долази и до повећања енергије попречног кретања услед његове интеракције са површином зареза што усложњава облик наномлаза, механизме фрагментације а тиме и расподелу фрагмената. Основна разлика је да у чеоном делу млаза долази по просторног (3Д) расипања малих фрагмената (“у облику рекета за лакрос”; слике 2 и 5 у изворној референци (He et al., 2015)) док је у задњем делу облик млаза и даље плочаст и фрагментација је практично и даље у потпуности везана за  $x$ -раван (2Д). Овако хетерогена морфологија, условљена утицајем брзине деформисања односно повећањем попречне количине кретања, одсликава се на расподели фрагмената приказаној на слици 2.31. Конкретно, расподела фрагмената у задњем, плочастом делу млаза (He et al., 2015) у суштини одговара шематском приказу на слици 2.31а (за 120 GPa и доминантни део 280 GPa) укључујући и горе наведене вредности експонената степених функција што одсликава идентичну морфологију распада. С друге стране, у чеоном делу млаза, 3Д распршивање доводи до тенденције  $\tau_{F2} \rightarrow \tau_{F1}$  (слика 2.31б;  $\tau_{F1} \approx 2.7$  и  $\tau_{F2} \approx 1.4$ ) која подсећа на тренд трансформације расподеле фрагмената (2.35). Мада се на слици 2.31а назире троделна расподела (две степене функције и експоненцијално/биномно раме), Хе и коаутори (He et al., 2015) су, имајући у виду усвојено занемаривање степене расподеле која одговара најмањим фрагментима (што у овом случају због тренда стапања две степене функције и није нарочито значајно), расподелу малих и средњих фрагмената апроксимирали са  $N(V) \propto V^{-2.0}$ , у којој је експонент  $\tau_F (\approx 2.7)$ , на слици 2.31б) конзистентан са истим у 3Д моделу перколације веза.

Што се тиче утицаја геометрије зареза, Хе и коаутори су установили да смањивање угла зареза (слика 2.30) доводи до повећавања степена расипања (односно, броја фрагмената или интензитета фрагментације). У овом контексту, дакле, повећавања угла зареза и интензитета ударног таласа имају супоротан ефекат. Повећавање дубине зареза највише утиче на просечну величину великих фрагмената описаних експоненцијалном (или биномном) расподелом. Уопште узев, повећавање дубине и угла зареза доводи до повећања просечне величине великих фрагмената (око које се центрира „широко раме” расподеле).

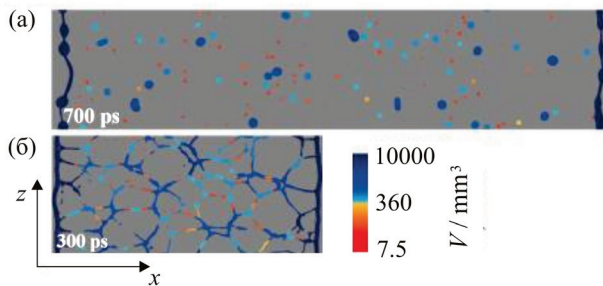
У другом раду (He et al., 2016), аутори су изучавали динамичко ширење нанофолије (192×3×308 nm) од течног бакра (иницијално загрејане на 2000 K) изложене линеарном градијенту брзина у  $x$ -правцу. Детаљно су анализирани еволуција нанотекстуре и настанак фрагмената што је илустровано на сликама 2.32 и 2.33. Фрагментација система настаје услед раста и каснијег срастања пора, разградње мреже у фина влакна (филаменте), и даљег распадање тих



vlakana у лоптасте кластере (слика 2.32). Детаљно је проучаван и процес развоја хетерогене фрагментације нанофолије од металне течности. На слици 2.33а капљичасти фрагменти ( $t = 700$  ps) се могу грубо поделити на мале и велике (боје одговарају величини кластера). На слици 2.33б, материјални извори малих фрагмената (светлих) налазе се углавном на рубовима мреже који су нагнути у смеру наметнутог градијента брзине ( $x$  осе), док се у случају великих фрагмената (тамних) налазе првенствено на ивицама скоро управно на  $x$  осу и око мрежних чворова. Аутори су тумачили описане појаве на основу Грејдијевог модела фрагментације заснованог на енергетској равнотежи (Grady, 1988). Анализа расподела фрагмената обављена је на сличан начин као у (He et al., 2015).



**Слика 2.32.** Еволуција нанотекстуре и настанак фрагмената. Боје тумача односе се на брзине атома. Раст пора и њихово срастања (220 ps, 240 ps), разградња у мреже финих влакана (300 ps, 360 ps) и каснија кидања тих мрежа у влакна, и коначно распадање нестабилних влакана у стабилне капљичасте фрагменте (700 ps).



**Слика 2.33.** (а) Образац распрострањања фрагмената у  $t = 700$  ps. (б) Делови мреже влакана из којих су настали фрагменти под (а). (Обе горње слике преузете су из референце (He et al., 2016) са допуштењем издавача. Copyright 2016 Chinese Physical Society and IOP Publishing Ltd).

## 3 Методе решетки

У основним цртама, методе решетки се заснивају на концепту дискретизације материјала (димензионалности веће од један) са мрежом линијских носећих елемената (линијских опруга, штапова, греда) које одликују елементарне конститутивне релације и критеријуми кидања. Прва примена ове методе приписује се руско-канадском инжењеру Александру Хреникову (Hrennikoff, 1941), утемељивачу методе коначних елемената, који ју је осмислио за потребе решавања раванског стања напона у танкој еластичној плочи оптерећеној силама које леже у њеној равни. Метод је потом пао у заборав све до 80-их година прошлог века када су физичари уочили његове изванредне могућности увођења нехомогености у рачунски модел на једноставан и природан начин. За ову монографију је од нарочитог значаја за изучавање механичког лома материјала коришћењем различитих врста решеткастих модела заснованих на мрежама опруга који су нужно били феноменолошког карактера. Хронолошки развој и адаптације решеткастих модела на различите врсте материјала и типове оптерећења представљени су у сажетом облику. За почетак треба истаћи да се континуум може дискретизовати решеткастим моделима на разне начине. Могу се узети у разматрање раванске или просторне решетке, правилне или неправилне (насумичне) геометрије, са преклапајућим или непреклапајућим елементима. Решеткасти модели се, такође, могу разликовати и по броју степени слободе по чвору што се показало као извор великих разлика у њиховим способностима да реалистично репродукују физичке појаве. Временом се дошло до закључка да су решеткасти модели неправилне геометрије са гредним међудејствима најпогоднији за симулације лома, поготово код материјала који се истичу изразито хетерогеном структуром. Чворови решетке могу да се генеришу насумично, према датој величини расподеле зрна, при чему се Деланејева триангулација користи за одређивање веза решетке и њихових ефективних геометријских особина попречног пресека.

Када се решеткасти модели користе за анализу лома (на макроскопској просторној скали) (Pan et al., 2018) мора претходно да се дефинише критеријум раскидања основног линијског структурног елемента (дакле, критеријум лома на микро / мезо просторној скали). Опет, у зависности од врсте материјала који је предмет моделирања, може да се примени неколико критеријума раскидања заснованих на механици лома, дисипацији енергије, теорији чврстоће. У ову последњу групу спадају, нпр., критеријум максималног напона у чвору, Мор-Кулонов (Mohr-Coulomb) критеријум, итд. Даља дискусија овог важног аспекта, не само решеткастих него дискретних модела у целини, остављена је за конкретне врсте модела који ће бити разматрани у даљем тексту.

### 3.1 Решетке са централним међудејствима ( $\alpha$ модели)

Решетке са централним међудејствима су најједноставнији облик решетке код којих елементарни носећи елементи (нпр., штапови) могу да носе само аксијалну силу чији интензитет зависи од промене дужине линијског носача. Приликом формулисања решеткастог модела неопходно је дефинисати однос између параметара решетке и механичких особина материјала који се симулира. Различити приступи су предложени у том погледу. Кузатис и сарадници (Cusatis et al., 2003a, 2006) су користили Деланајеву триангулацију ради одређивања веза решетке и додељивања одговарајућих ефективних површина попречних пресека. Козицки и Тејхман (Kozicki and Tejchman, 2008) су изводили нормалну и тангенцијалну крутост коришћењем експерименталних кеофицијената. Међутим, овде ће бити коришћен методолошки приступ за дефинисање механичких особина модела решетке заснован на истоветности деформационих енергија јединичне ћелије решетке и њој-одговарајуће елементарне запремине непрекидног материјала, како је изложен у изворним радовима Остоја-Старжевског и сарадника (Ostoja-Starzewski, 2002; Ostoja-Starzewski and Wang, 2006; Wang et al., 2009a). Сажети преглед који следи прати веома блиско методолошки приступ и излагање у наведеним референцама.

Основна замисао успостављања репрезентативности решетке је у обезбеђивању еквивалентности енергије садржане у деформисаној јединичној ћелији решетке са истом у придруженој структури континуума (запремине  $V$ )

$$U_{cell} = U_{continuum} \quad (3.1)$$

Деформациона енергија је у механици континуума дефинисана изразом

$$U_{continuum} = \frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} dV = \frac{1}{2} \int_V (\sigma_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}) dV. \quad (3.2)$$

У 2Д поставци, запремина је површина јединичне дебљине. Ако се ограничимо на просторно линеарна померања (тј., униформно поље релативне деформације  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ) једначина (3.2) постаје

$$U_{continuum} = \frac{V}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{V}{2} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\delta}. \quad (3.3)$$

Први корак је дефинисање јединичне ћелије решетке на основу специфичних периодичних аранжмана честица и међучестичних дејстава.

Решетка са међудејствима централних сила (позната и као  $\alpha$  модел) представља основни модел у смислу да свака међучестична веза преноси *само* аксијалну (нормалну) силу  $\mathbf{F} = F_n \mathbf{n}$  усмерену дуж правца везе дефинисаног јединичним вектором  $\mathbf{n}$ . Деформациона енергија садржана у јединичној ћелији решетке (илустрованај, нпр., осенченим шестоугловима и квадратом на сликама 3.1 и 3.2, редом) са централним међудејствима је

$$U_{cell} = \sum_b E^{(b)} = \frac{1}{2} \sum_b^{N_b} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{u})^{(b)} \quad (3.4)$$

где је  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$  резултантно померање везе (опруге) која спаја честице  $i$  и  $j$ ,  $b$  је индекс везе ( $b$ -та веза), а  $N_b$  је укупни број веза. Ако се ограничимо на линеарно еластичне опруге ради репрезентовања просторно линеарних померања (3.3), једначина (3.4) може се написати као

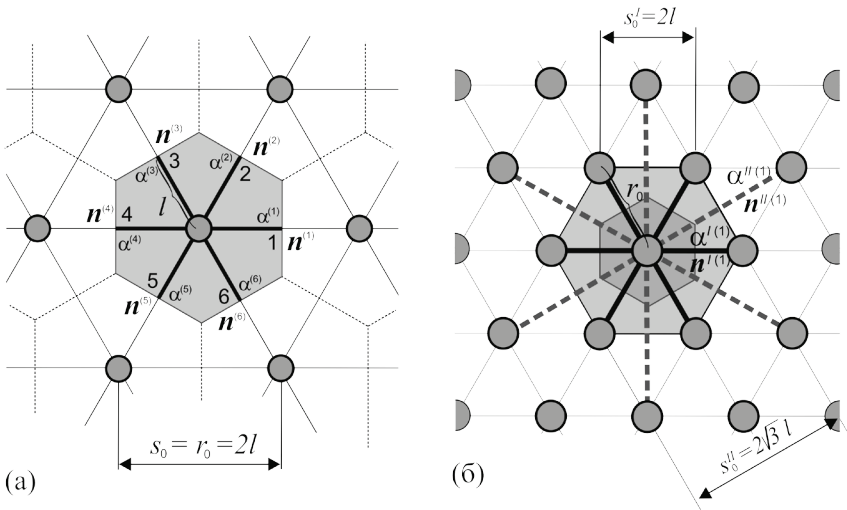
$$U_{cell} = \frac{1}{2} \sum_b^{N_b} (k \mathbf{u} \cdot \mathbf{u})^{(b)} \quad (3.5)$$

где  $k = k^n$  означава константу (коэффициент крутости) опруге.

На овом месту неопходно је да се дефинише јединична ћелија решетке. Онда се померање сваког чвора решетке изједначава са померањем одговарајуће тачке континуалног система. Извођење једначина везе између константи опруге и компонената тензора еластичности заснива се на еквивалентности (3.1): деформациона енергија ускладиштена у изабраној периодично-понављајућој јединичној ћелији решетке изједначава се са деформационом енергијом садржаном у јединичној ћелији континуум модела (3.3). Кључни корак у овом поступку чини успостављање везе између  $\mathbf{u}$  и  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , што зависи од конкретне геометрије ћелије решетке и конкретног модела међучестичне интеракције.

### 3.1.1 Троугаона решетка са централним међудејствима

Прва решетка која ће бити разматрана је једнакостранична троугаона мрежа са интеракцијом централним силама између честица најближих суседа ( $\alpha$  модел). Мрежа илустрована на слици 3.1 заснива се на опрузи дужине  $l$ , једнаке половини равнотежног међучестичног растојања  $r_0$ , који дефинише равнотежну геометрију решетке. Површина јединичне шестоугаоне ћелије је  $V = 2\sqrt{3}l^2$ . Свака веза  $b$  која припада датој јединичној ћелији окарактерисана је са константом опруге  $\alpha^{(b)}$  и јединичним векторима веза  $\mathbf{n}^{(b)}$  дуж њихових одговарајућих праваца  $\theta^{(b)} = (b-1)\pi/3$ .



Слика 3.1. Правилна троугаона решетка са централним међудејствима ( $\alpha$  модел) између: (а) првих, и (б) првих и других суседа.

Деформациона енергија ускладиштена у јединичној шестоугаоној ћелији која се састоји од шест равномерно истегнутих веза је

$$U_{cell} = \frac{1}{2} \sum_{b=1}^6 (\alpha \mathbf{u} \cdot \mathbf{u})^{(b)} = \frac{l^2}{2} \sum_{b=1}^6 \alpha^{(b)} n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\delta} \quad (3.6)$$

На основу једначине (3.1), компоненте тензора еластичности могу се извести у следећем облику

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \sum_{b=1}^6 \alpha^{(b)} n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} \quad (3.7)$$

што се у случају једнаких константи опруга,  $\alpha^{(b)} = \alpha$  ( $b = 1, \dots, 6$ ), своди на

$$C_{1111} = C_{2222} = \frac{9}{8\sqrt{3}}\alpha = \frac{E}{1-\nu^2} \quad C_{1122} = C_{2211} = \frac{3}{8\sqrt{3}}\alpha = \frac{E\nu}{1-\nu^2} \quad C_{1212} = \frac{3}{8\sqrt{3}}\alpha = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (3.8)$$

Треба приметити да изрази (3.8) задовољавају услов изотропности материјала

$$C_{1212} = \frac{1}{2}(C_{1111} - C_{1122}) \quad (3.9)$$

Поред тога, пошто је вредност раванског Поасоновог коефицијента фиксирана, константа опруге дефинише само равански модул еластичности јединичне ћелије решетке

$$\nu = \frac{C_{1122}}{C_{1111}} = \frac{1}{3}, \quad E = \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \quad (3.10)$$

За све врсте решетке, горња међа раванског Поасоновог коефицијента дефинисана је вредношћу (3.10)<sub>1</sub>. (Видети и решетке у поглављима 3.1.1.1 и 3.1.2.) Уколико је неопходно да се овај опсег прошири могуће је дефинисати, тзв., „троструку саћасту мрежу” (некада се користи и израз  $\alpha$ - $\beta$ - $\gamma$  модел) (Ostoja-Starzewski, 2002) у којој је у основи јединичне ћелије правилни шестоугао (слика 3.1) али су вредности константи крутости различите за опруге са почетним угловима 0 и  $\pm 60^\circ$ ; односно, у нотацији коришћеној на слици 2,  $\alpha^{(1)} = \alpha^{(4)} \neq \alpha^{(2)} = \alpha^{(5)} \neq \alpha^{(3)} = \alpha^{(6)}$ . Деј и сарадници (Day et al., 1992) су за потребе моделирања вишефазних 2Д композита са неуређеном мезоструктуром извели, за овај тип решетке, следеће изразе за раванске еластичне константе

$$\nu = 1 - \frac{2}{\left[ 1 + \frac{2}{9}(\alpha^{(1)} + \alpha^{(2)} + \alpha^{(3)}) \left( \frac{1}{\alpha^{(1)}} + \frac{1}{\alpha^{(2)}} + \frac{1}{\alpha^{(3)}} \right) \right]},$$

$$E = \frac{2\sqrt{3}(\alpha^{(1)} + \alpha^{(2)} + \alpha^{(3)})}{3 \left[ 1 + \frac{2}{9}(\alpha^{(1)} + \alpha^{(2)} + \alpha^{(3)}) \left( \frac{1}{\alpha^{(1)}} + \frac{1}{\alpha^{(2)}} + \frac{1}{\alpha^{(3)}} \right) \right]}$$

Претходни изрази се за  $\alpha^{(1)} = \alpha^{(4)} = \alpha^{(2)} = \alpha^{(5)} = \alpha^{(3)} = \alpha^{(6)} = \alpha$  свде на (3.10), али треба уочити да могу да репродукују вредност Поасоновог коефицијента у опсегу 1/3 до 1.

### 3.1.1.1 Троугаона решетка са централним међудејствима између првих и других суседа

Претходни  $\alpha$  модел се може надоградити суперпозицијом додатне структуре са централним међудејствима (три троугаоне мреже са међудејствима између других суседа). Првобитна структура (структура I) је сада представљена са троугаоном решетком и шестоугаоном јединичном ћелијом дефинисаном са:

$$\alpha^{I(b)} = \alpha^I, \quad \theta^{I(b)} = (b-1) \frac{\pi}{3}, \quad \mathbf{n}^{I(b)} = (n_1^{I(b)}, n_2^{I(b)}) = (\cos \theta^{I(b)}, \sin \theta^{I(b)}), \quad b=1, 2, 3 \quad (3.11)$$

Димензија одговарајуће јединичне ћелије решетке је  $r_0^I = 2l$  (слика 3.1a). Надограђена структура (структура II) је представљена са три троугаоне мреже са следећим константама опруга:

$$\alpha^{II(b)} = \alpha^{II}, \quad \theta^{II(b)} = (2b-1) \frac{\pi}{3}, \quad \mathbf{n}^{II(b)} = (n_1^{II(b)}, n_2^{II(b)}) = (\cos \theta^{II(b)}, \sin \theta^{II(b)}), \quad b=1, 2, 3 \quad (3.12)$$

и димензијом јединичне ћелије  $r_0^{II} = 2\sqrt{3}l$ . У резултујућем структурном систему, свака честица је у локалној интеракцији са шест првих суседа преко структуре I, и у нелокалној интеракцији са шест других суседа преко структуре II. Површина јединичне ћелије је  $V = 2\sqrt{3}l^2$ .

У условима униформне релативне деформације, еквивалентност деформационих енергија ускладиштених у јединичној ћелији решетке и одговарајућем моделу ефективног континуума (3.1) доводи до следећих веза између компонената тензора еластичности и константи опруга

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{2}{\sqrt{3}} \alpha^I \sum_{b=1}^3 n_\alpha^{I(b)} n_\beta^{I(b)} n_\gamma^{I(b)} n_\delta^{I(b)} + \frac{6}{\sqrt{3}} \alpha^{II} \sum_{b=1}^3 n_\alpha^{II(b)} n_\beta^{II(b)} n_\gamma^{II(b)} n_\delta^{II(b)} \quad (3.13)$$

Према томе, компоненте тензора еластичности различите од нуле су

$$\begin{aligned} C_{1111} = C_{2222} &= \frac{3}{4\sqrt{3}} (3\alpha^I + 9\alpha^{II}) = \frac{E}{1-\nu^2} \\ C_{1122} = C_{2211} &= \frac{3}{4\sqrt{3}} (\alpha^I + 3\alpha^{II}) = \frac{E\nu}{1-\nu^2} \\ C_{1212} &= \frac{3}{4\sqrt{3}} (\alpha^I + 3\alpha^{II}) = \frac{E}{2(1+\nu)} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Равански Поасонов коефицијент је поново независан од константи опруга

$$\nu = \frac{C_{1122}}{C_{1111}} = \frac{1}{3}, \quad E = \frac{2}{\sqrt{3}}(\alpha^I + 3\alpha^{II}) \quad (3.15)$$

Израз за равански модул еластичности (3.15б) редукује се на  $E = 8\alpha/\sqrt{3}$  у поједностављеном случају када важи  $\alpha^I = \alpha^{II} = \alpha$ .

### 3.1.2 Квадратна решетка са централним међудејствима

Квадратна решетка са централним међудејствима илустрована је на слици 3.2. Честица у центру јединичне квадратне ћелије решетке у интеракцији је са четири прва суседа и са четири друга (дијагонална) суседа, са одговарајућим константама крутости половина опруга  $\alpha^I$  and  $\alpha^{II}$ . Запремина јединичне ћелије решетке је  $V = 4l^2$ . Углови веза  $\theta^{(b)}$  и одговарајући јединични вектори  $\mathbf{n}^{(b)}$  су

$$\alpha^{I(b)} = \alpha^I, \quad \theta^{I(b)} = (b-1)\pi/2, \quad \mathbf{n}^{I(b)} = (n_1^{I(b)}, n_2^{I(b)}) = (\text{Cos}\theta^{I(b)}, \text{Sin}\theta^{I(b)}) \quad b = 1, 2, 3, 4 \quad (3.16)$$

$$\alpha^{II(b)} = \alpha^{II}, \quad \theta^{II(b)} = (2b-9)\pi/4, \quad \mathbf{n}^{II(b)} = (n_1^{II(b)}, n_2^{II(b)}) = (\text{Cos}\theta^{II(b)}, \text{Sin}\theta^{II(b)}) \quad b = 5, 6, 7, 8$$

Изрази за ефективне компоненте тензора еластичности

$$\begin{aligned} C_{1111} = C_{2222} &= \frac{1}{2}\alpha^I + \alpha^{II} = \frac{E}{1-\nu^2} \\ C_{1122} = C_{2211} &= \alpha^{II} = \frac{E\nu}{1-\nu^2} \\ C_{1212} &= \alpha^{II} = \frac{E}{2(1+\nu)} \end{aligned} \quad (3.17)$$

изведене су на исти начин као у 3.1.1.

Поасонов коефицијент и модул еластичности су, по дефиницији

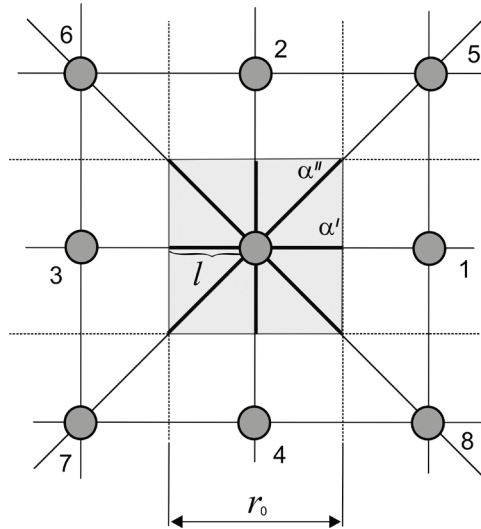
$$\nu = \frac{C_{1122}}{C_{1111}} = \frac{2\alpha^{II}}{\alpha^I + 2\alpha^{II}}, \quad E = \frac{\alpha^I}{2} \left( \frac{\alpha^I + 4\alpha^{II}}{\alpha^I + 2\alpha^{II}} \right) \quad (3.18a)$$



Директним увидом у једначине (3.17) и (3.18a) добијају се следећи изрази за раванске модуле

$$\nu = \frac{1}{3}, \quad E = \frac{2}{3} \alpha' \quad (3.18б)$$

уз услов  $\alpha'' / \alpha' = 1/4$ , који мора да буде задовољен у овом решеткиастом систему.



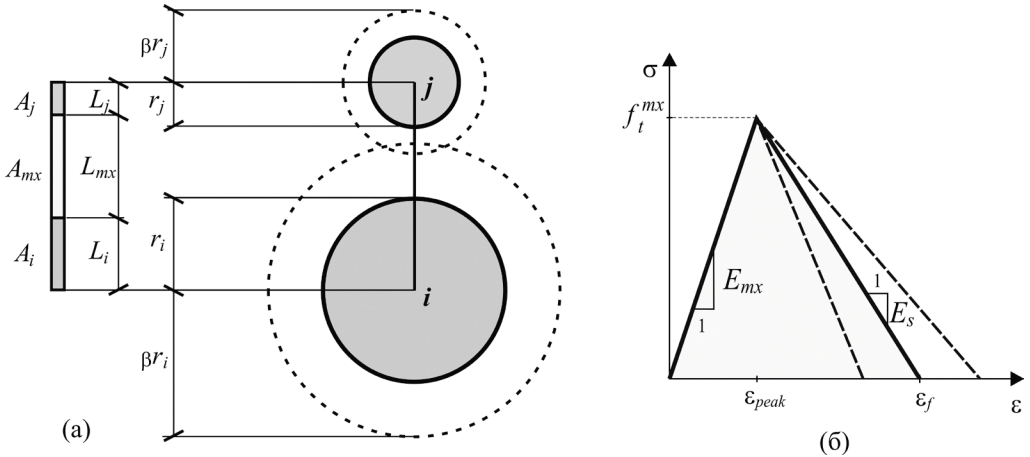
Слика 3.2. Правилна квадратна решетка са квадратном јединичном ћелијом и првим и другим (дијагоналним) суседима са централним интеракцијама.

### 3.1.3 Хронологија развоја и примери примене метода решетки са централним међудејствима

Решетке са централним међудејствима су као најједноставније методе ове врсте (добро познате из првих година на основним студијама свих техничких факулета) врло рано стекле популарност у моделирању хетерогених материјала са неуређеном микроструктуром. Мада су почеле да се користе и раније, нпр. (Schorn and Rode, 1987), највећи замах ове методе су стекле посредством радова Бажанта (Bažant) и његових сарадника. Шланген и ван Мир (нпр., Schlangen and van Mier, 1992a) су веома рано уочили могућности  $\alpha$  модела за симулацију процеса оштећења и лома бетонских контрукција. Међутим, треба имати у виду да ови једноставни модели по својој физичкој природи нису у стању да потпуно реалистично симулирају сложеније обрасце распрострањања прелина и облике лома који настају комбинацијом основних модова (Herrmann et al., 1989; Curtin and Scher, 1990; Jagota and Benison, 1994; Monette and

Anderson, 1994; Cusatis et al., 2003a). Нпр., ако су калибрисане да репродукују прелине услед затезања и лома првим модом, решетке са централним међудејствима ће то учинити веома верно; међутим, у том случају ће значајно да претерају у процени притисне чврстоће и неће верно репродуковати криву напон-деформација у посткритичном режиму омекшавања. Такође,  $\alpha$  модели нису у могућности да тачно предвиде обвојнице лома при сложеним напонским стањима (нпр., при хидростатичком притиску) (Cusatis et al., 2003a). И поред свега наведеног, захваљујући једноставности и рачунској ефикасности, ови модели су — и поред обиља софистициранијих метода — још увек популарни међу истраживачима за симулације облика оптерећења при којима ови недостаци не долазе до изражаја у пуној мери (Spagnoli, 2009; Rinaldi, 2009).

*Бажант и коаутори* (Bažant et al., 1990; Jirásek and Bažant, 1995) користили су решеткасти модел са неправилном геометријом (неједнаким дужинама штапова) и централним међудејствима за моделирање кртог хетерогеног материјала. Насупрот решеткастим моделима код којих је растојање између чворова произвољни улазни параметар, Бажант и коаутори (Bažant et al., 1990) су их одређивали на основу стварне мезо-структуре материјала. Наиме, положај чворова решетке подудара се са центрима агрегата (уопштено, зрна) па топологија решетке одсликава текстуру (подструктуру) материјала. Основни циљ аутора је био изучавање ефеката величине узорка на максимално оптерећење, понашање материјала у режиму омекшавања, и прогресивно ширење оштећења зоном микропрелина. Модел који узима у обзир неправилну насумично-генерисану решетку са централним међудејствима могао би бити класификован и у поглавље 4.2, али пошто су интеракције савијањем и смицањем између честица у контакту занемарене овде је наведен као илустративни пример неправилне решетке са централним међудејствима. Овај модел је био изузетно утицајан на развој нумеричких техника за наведене класе материјала (нпр., Cusatis et al., 2006; Riera et al., 2014; Rodrigues et al., 2016, Djordjevic et al., 2017; Iturrioz, 2018). Рафинирани модел Зубељевича и Бажанта (Zubelewich and Bažant, 1987) узимао је такође у обзир и интеракције силама смицања. Међутим, треба истаћи да су непрестани напори у истраживачкој заједници да се изнађе стандардни тест за одређивање параметара омекшавања за сада још увек безуспешни (Van Mier, 2007). Услед тога, параметри омекшавања се или произвољно усвајају или одређују накнадном (инверзном) анализом експерименталних резултата.



**Слика 3.3.** (а) Кружне честице и параметри штапова, и (б) шематски приказ конститутивног закона везивне матрице ( $mx$ ). Енергија лома материјала матрице  $G_f^{mx}$  пропорционална је величини освенчене површине док је коефицијент микропластичности материјала ( $1 \leq \gamma_{pl} \leq \infty$ ) дефинисан количником  $\epsilon_f / \epsilon_{peak}$ .

Класични модел Бажанта и коаутора (1990) имао је за циљ моделирање бетона подвргнутог дејству квази-статичких оптерећења. Модел је заснован на међудејствима централним силама неправилно распоређених еластичних честица (тј., агрегата) кружног облика обухваћених матрицом (нпр., цементном пастом) инфериорне чврстоће (слика 3.3а). Као што се види са слике 3.3б, у почетном стању и првој фази деловања оптерећења, матрица је еластична са модулом еластичности  $E_{mx}$ ; модул еластичности агрегата означен је са  $E_a$ . Честице, означене на слици 3.3 са  $i$  и  $j$ , су у међудејству преко штапа који повезује њихове геометријске центре а чија је крутост,  $S = (S_i^{-1} + S_{mx}^{-1} + S_j^{-1})^{-1}$ , дефинисана редном везом три сегмента штапа (слика 3.3а). Појединачна крутост сваког сегмента одређена је на уобичајени начин (нпр.,  $S_{mx} = E_{mx} A_{mx} / L_{mx}$ ) узимајући у обзир емпиријски модификоване дужине појединих сегмената које одговарају честицама агрегата у контакту. Средњи сегмент штапа дужине  $L_{mx}$  (који симулира цементну пасту), представља додирну зону матрице и претпоставља се да може да моделира и омекшавање материјала илустровано карактеристичним троугаоним обликом конститутивног закона (слика 3.3б). Релативна деформација на крају омекшавања (када долази до комплетног раздвајања међуграничне површи) и тангенцијални модул омекшавања дефинисани су следећим изразима

$$\epsilon_f = \frac{2G_f^{mx}}{L_{mx} f_t^{mx}}, \quad E_s = -\frac{f_t^{mx}}{\epsilon_f - \epsilon_p} \quad (3.19a)$$

Вредност ових параметара модела може да се варира са променом  $L_m$  (као што је илустровано на слици 3.3б) док се енергија лома

$$G_f^{mx} = \left( \frac{f_t^{mx} \varepsilon_f}{2} \right) L_{mx} \quad (3.19б)$$

сматра за физичку особину везивне матрице чиме се усваја *претпоставка* да је омекшавање унутрашња (суштинска, „интринсична“) особина материјала. Ово омекшавање је, дакле, индиректно дефинисано енергијом лома међучестичне везе. Неправилна геометрија решетке (дефинисана насумично изабраним вредностима  $L_{mx}$ ) захтева одговарајуће измене модула омекшавања  $E_s$  у циљу очувања енергије лома.

Резултати рачунарских симулација добијених коришћењем овога модела откривају изражену зависност оптерећења при коме долази до лома од величине узорка, која је истакнута последица хетерогености која се испољава и са аспекта механике лома и са становишта вероватноће. Криве сила-померање, које представљају одзив узорака без зареза оптерећеног на једноосно затезање, откривају реалистично репродуковано омекшавање карактерисано са нагибом који постаје све стрмији са повећањем величине узорка. Резултати симулација показују изражен ефекат величине узорка и наглашено расипање података. Номинална затезна чврстоћа такође испољава наглашен ефекат величине (дефинисане, нпр., пречником  $d$ ) у сагласности са Бажантовом (Ваžант, 1984) емпиријском формулом за материјале подложне прогресивном расту прслина

$$\sigma_N = \frac{B_N f_u}{\sqrt{1 + \frac{d}{d_0}}} \quad (3.20)$$

а у супротности са предвиђањима модела локалног континуума. Израз (3.20), у коме су  $B_N$  и  $d_0$  параметри подешавања, апроксимативно дефинише поступни прелаз између критеријума течења (инваријантног у односу на величину узорка) и линеарно-еластичне механике лома (у којој је ефекат величине најизраженији,  $\sigma_N \propto d^{-1/2}$ ). Сходно томе, Бажант и сарадници су устврдили да ефекат величине узорка (3.20), примећен у симулацијама и експериментима, представља карику која повезује критеријум чврстоће (течења) и линеарно-еластичну механику лома. Аутори су, фитовањем одговарајућих резултата симулација са емпиријском формулом за ефекат величине, уочили идентичну узрочно-последичну везу и код узорака са зарезом. Резултати рачунарских симулација једноосног затезања приказују појаву асиметричног одзива у области омекшавања који је у

сагласности са експерименталним опажањима. Појавни облици прогресивног раста прслина као што су искривљења напонског профила, нестанак симетрије и локализације оштећења, примећени на лабораторијским узорцима, репродуковани су прилично верно.

Јирасек и Бажант (Jirasek and Bažant, 1995) су користили описану технику рачунарске симулације заједно са ефектом величине у циљу одређивања односа између макроскопских особина лома (енергије лома и величине ефективне процесне зоне) и статистика микроскопских особина дефинисаних на нивоу међучестичних веза (као што су микрочврстоћа, микропластичност, просечно међучестично растојање). Посебан акценат је стављен на везу између микроструктуре и две основне макроскопске особине квази-кртих<sup>7</sup> материјала са становишта лома (енергије лома и ефективне дужине процесне зоне лома). Аутори су сматрали да наведени модел може да се користи не само код кохезивних грануларних материјала (као што је бетон) него и за моделирање квази-кртих материјала који немају тако изражену честичну микроструктуру те величине честица модела одражавају растојања између доминантних нехомогености у микроструктури (стенске масе). Микроскопски параметар који, несумњиво, има највећи утицај на макропластичност материјала је енергија лома међучестичних веза (штапова). Како се види из израза (3.196) (уз занемаривање горњег индекса  $m$  који у датом изразу указује на везивну матрицу), енергија лома је сразмерна микрочврстоћи веза. Коефицијент микропластичности (дуктилности на микроскопском нивоу) дефинисан је односом  $\gamma_{pl} = \varepsilon_f / \varepsilon_{peak}$ , који у граничним случајевима идеалног микрокртог модела и идеалног еластопластичног модела има вредности 1 и  $\infty$ , тим редом. Јирасек и Бажант (1995) су испитивали како овако дефинисани коефицијент микропластичности утиче на макроскопску енергију лома; који други фактори утичу на енергију лома; шта одређује величину процесне зоне лома? Резултати њихових рачунарских симулација указују на то да реалистично моделирање, нарочито у случају удаљених (“far-field”) притисних оптерећења, захтева од линијских носећих елемената решетке способност преношења међудејстава не само централним силама него и силама смицања (угаона међудејства). Јирасек и Бажант су понудили емпиријске релације између макроскопских параметара

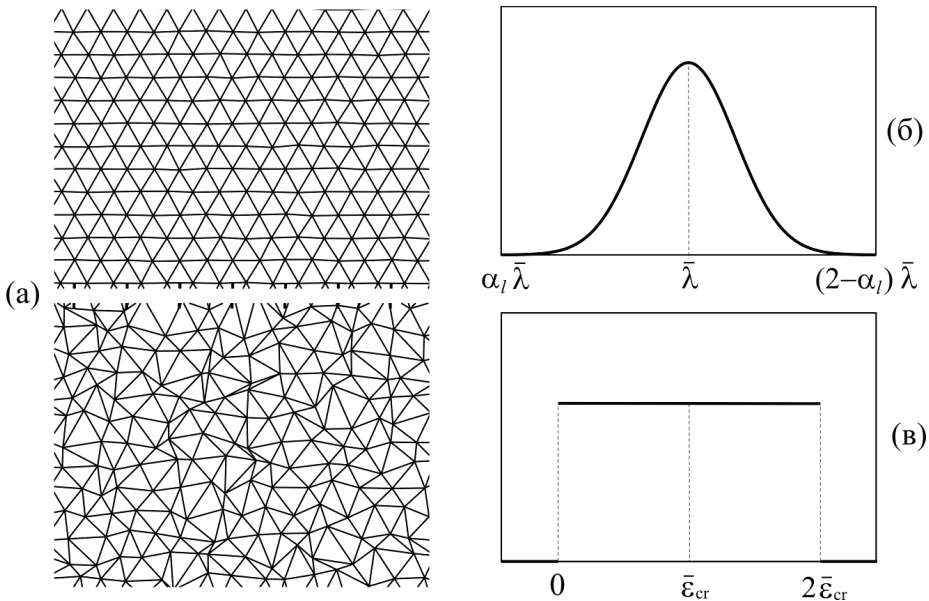
<sup>7</sup> Квази-кртим (или квази-дуктилним/квази-жилавим) називају се материјали инфериорне затезне чврстоће са хетерогеном, стохастичком структуром чија је дефинишућа особина посткритично омекшавање (стене, бетон, керамике) (Крајсковић, 1996). Мада наглашавање разлике између кртости и квази-кртости често нема значаја у инжењерској пракси разлика је важна зарад истицања широког опсега унутрашњих дисипационих механизма (Landis and Bolander, 2009). Не треба заборавити да омекшавање не може да се сматра унутрашњом особином материјала (својственом његовој природној структури) јер гранични услови имају огромног утицаја на посткритични одзив.

(просечне енергије лома и величине процесне зоне) и статистичких расподела микроструктурних параметара (микрочврстоћа и микропластичност међучестичних веза). Показали су како енергија лома на макро скали опада са повећањем коефицијента варијабилности микрочврстоће, а расте са повећањем микропластичности. При фиксним просечним вредностима ова два мезо-параметра, енергија лома на макроскали је сразмерна просечном међучестичном растојању.

*Крајчиновић, Риналди и сарадници* (Krajinovic and Rinaldi, 2005a, 2005b; Rinaldi et al., 2006; Rinaldi and Lai, 2007; Rinaldi, 2009) су у циљу изучавања деформације и лома генеричких квази-кртих материјала подстицали коришћење фракталне анализе у спрези са решеткастим моделима. При малим и умереним брзинама затезања, квази-крти лом одликује поступна акумулација оштећења, прво углавном у облику дифузно зачетих микропрслина које потом срастају у јасно-изражену макропрслину чији ненаговештени, муњевити раст доводи, коначно, до лома. Математички третман квази-кртог лома стекао је истакнуто место у истраживањима у последњих неколико деценија (Mazars and Bažant, 1989; Bažant and Planas, 1998; Bažant, 2005) захваљујући првенствено: (i) насушној потреби да се резултати лабораторијских експеримената екстраполирају за потребе прорачуна много већих структура које се сусрећу у инжењерској пракси, и (ii) уочавању чињенице да чврстоћа квази-кртих структура може значајно да опада са повећавањем величине изван уобичајеног опсега примене. Сходно томе, проблем ефекта величине је најприсутнији у грађевинарству где су екстраполације величина неизбежне. Што се конкретних аспеката теоријског моделирања тиче, међу најсложеније спадају зависност од величине узорка прага локализације деформације и начина еволуције оштећења. У недостатку аналитичког модела ефекта величине (у форми закона скалирања), тешко је предвидети понашање великих грађевинских структура на основу лабораторијских експеримената на истоветно обликованим узорцима. Овде ће бити скренута пажња на приступ Крајчиновића, Риналдија и сарадника који је нудио могућност хватања у коштац са ефектима величина коришћењем напредне фракталне шеме засноване на оригиналној секвенцијалној примени Фамили-Вишчековог (Family-Vicsek) скалирања на броју догађаја оштећења  $n(\varepsilon; L)$  и то одвојено у преткритичним (зачеће оштећења, очвршћавање) и посткритичним (срастање и локализација оштећења и раст прслина, омекшавање) режимима. У горе наведеној изворној литератури, процедура је демонстрирана на неправилним решеткастим  $\alpha$  моделима квази-кртих система оптерећених једноосним статичким затезањем. Вреди напоменути да је тест на једноосно затезање (већ помињан приликом прегледа радова Бажанта и

сарадника) — мада концептуално веома једноставан — веома сложен за експериментално извођење у случају квази-дуктилних (квази-жилавих) материјала (Landis and Bolander, 2009). Због тога се често замењује тестовима савијања код којих се до особина материјала при затезању долази инверзном анализом. Насупрот томе, извођење теста на једноосно затезање не представља никакав посебан проблем у оквиру виртуелних експеримената (чак ни при екстремно великим брзинама деформисања) што је очигледно из учесталости његовог појављивања у овој монографији.

Решеткасти  $\alpha$  модел који су аутори користили за добијање података неопходних за статистичку анализу је био тополошки уређен а геометријски и структурно неуређен (слика 3.4). Геометријска неуређеност заснивала се на случајно одабраној дужини иницијалних веза из нормалне расподеле приказане на слици 3.4б а илустроване на доњем сегменту слике 3.4а.



**Слика 3.4.** (а) Геометријски неуређена троугаона мрежа:  $\alpha_l = 0.9$  (горе) и  $\alpha_l = 0.1$  (доле) која је коришћена у  $\alpha$  моделу решетке Крајчиновића и Риналдија. Расподела: (б) дужина веза у референтној конфигурацији, и (в) деформација раскидања веза сходно критеријуму (3.24<sub>2</sub>).

Структурна неуређеност произилазила је из насумично одабраних релативних деформација кидања везе из униформне расподеле илустроване на слици 3.4в, које су коришћене у критеријуму кидања (3.24<sub>2</sub>). Силе у штаповима решетке дефинисане су хармонијским потенцијалом таквим да проистичу

коэффициентом крутости  $k^n$  идентичним за све везе. У симулацијама су коришћени само  $\alpha$  модели велике геометријске неуређености (доња слика 3.4а; решетка мале неуређености, приказана на горњој слици 3.4а, дата је само ради илустрације).

Еволуција оштећења је — од ране појаве разуђених микропрслина до коначног лома растом доминантних(е/их) макропрслина(е/а) — стохастички процес који зависи од интензитета и начина деловања оптерећења и микроструктурне неуређености материјала (нпр., слика 3.4). Сходно томе, скаларни параметар оштећења  $D$  (дефинисан количником броја раскинутих веза,  $n(\varepsilon; L)$ , и укупног броја веза у неоштећеном систему) је случајна променљива те је проблем боље дефинисан — кад год осредњавање има физичког смисла — коришћењем репрезентативне средње вредности  $\langle D \rangle$  (Rinaldi, 2009). Последично, напонско-деформациони ( $\sigma$ - $\varepsilon$ ) одзив на макроскали оштећеног квази-кртог материјала подвргнутог квази-статичком, једноосном затезању контролисањем деформације (илустрован на слици 3.5) изражен је следећом релацијом

$$\langle \sigma(\varepsilon) \rangle = E_0 (1 - \langle D(\bar{\varepsilon}; L) \rangle) \varepsilon \quad (3.21)$$

у којој је  $\langle \sigma \rangle$  осредњени напонски одзив повезан са наметнутим нивоом деформација  $\varepsilon$  (слика 3.5б),  $E_0$  је модул еластичности неоштећеног материјала, а очекивана вредност параметра оштећења  $\langle D(\bar{\varepsilon}; L) \rangle$  зависи од историје оптерећивања  $\bar{\varepsilon}$  и величине узорка  $L$ . Адекватност разматраног модела за одређену примену зависи од нивоа апроксимације који имплицира релација (3.21), што ће рећи, од тога у којој мери конкретни процес лома може да се опише осредњеним величинама неосетљивим на детаље расподеле микропрслина. Ефекат оштећења може да се опазе на макроскали праћењем смањења секантног модула  $\langle E(\varepsilon) \rangle = E_0 (1 - \langle D(\bar{\varepsilon}; L) \rangle)$  који је по својој природи одраз процеса настанка микропрслина (Lemaitre, 1985).

Камен темељац овде-поменутог дела истраживања физике оштећења квази-кртих материјала Крајчиновића, Риналдија и коаутора је Фамили-Вишчеково скалирање примењено на иновативан начин. Резултати статистичке примене симулација решеткастим  $\alpha$  моделима коришћени су на особит начин у смислу да предмет скалирања нису били директно подаци о  $\sigma$ - $\varepsilon$  одзиву, како је уобичајено (нпр., Rinaldi and Lai, 2007), него је секвенцијално Фамили-Вишчеково скалирање примењено на  $n$ - $\varepsilon$  криве. При томе треба истаћи да није могуће  $n$ - $\varepsilon$  скалирање једном применом Фамили-Вишчек шеме јер процес оштећења обухвата две физички различите фазе дефинисане различитим

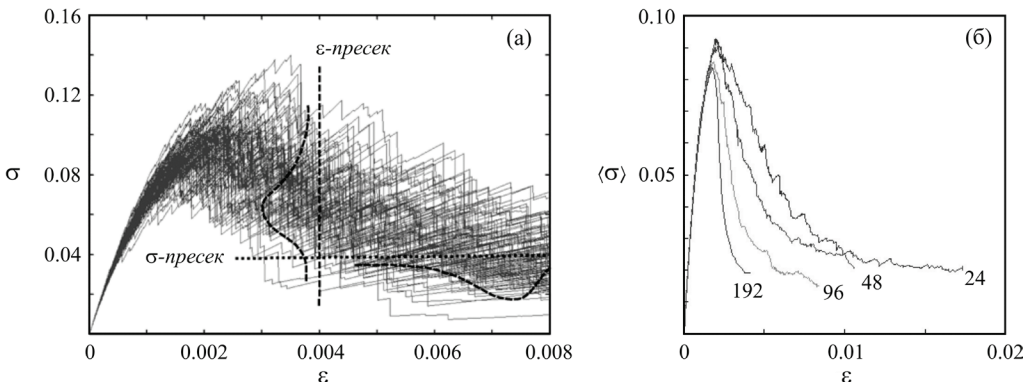


фракталним величинама. Методолошки приступ је овде, више наглашен него изложен, у најсажетијем облику.

- Циљ приступа је: (i) формулација закона скалирања за  $n(\varepsilon; L)$  мапирањем података функцијом која је инваријатна од скале, односно, важи за произвољно  $L$ ; и (ii) повезивање ове функције скалирања са параметром оштећења  $D$  (овај други део овде није разматран).
- Практична процедура се састоји од примене Фамили-Вишчековог скалирања два пута у каскади, одвојено за стање оштећења пре и после критичне тачке (одређене начином развоја оштећења која се често одражава постојањем максимума  $\sigma$ - $\varepsilon$  криве) препознајући да је природа квази-крте деформације раздвојена у две фазе.

*Први корак – Преткритични режим очвршћавања:* Примена Фамили-Вишчековог скалирања на број микропрслина,  $n$ , усвајањем експонента скалирања  $a_\phi = d + \beta_\phi$  (где је  $d$  одговарајућа Еуклидска димензија проблема), тј., идентификацијом јединог независног фракталног експонента  $\beta_\phi$  који доводи до преклапања скалираних података “ $n(\varepsilon; L) = L^{d+\beta_\phi}$ ” насупрот  $\varepsilon/L^{\beta_\phi}$ ” за свако  $L$  у преткритичном режиму ( $\varepsilon < \varepsilon_{peak}$ ), чиме се добија функција  $g(\varepsilon/L^{\beta_\phi})$  инваријатна од скале, таква да важи

$$n(\varepsilon; L) = L^{d+\beta_\phi} g\left(\frac{\varepsilon}{L^{\beta_\phi}}\right) \quad (3.22)$$

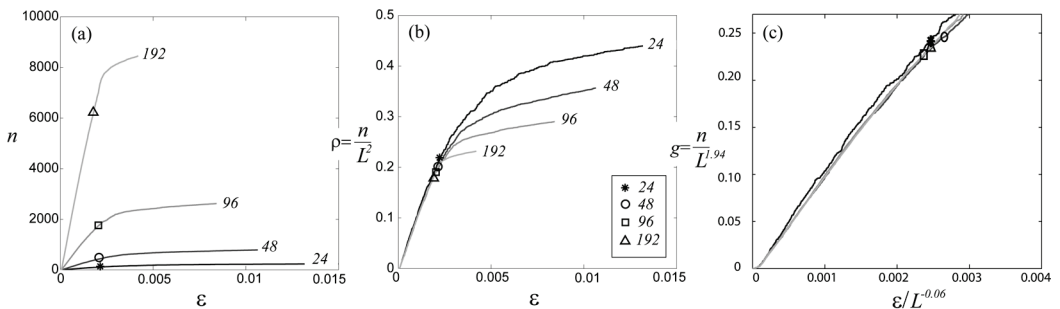


**Слика 3.5.** Макроскопски  $\sigma$ - $\varepsilon$  одзив стохастичког, кртог узорка при симулацији теста на једноосно затезање контролисаним померањем: (а) 100 случајно одабраних реплика (изражено расипање резултата поспешено је и малом величином узорка,  $L = 24$ ) (Rinaldi et al., 2007); (б)  $\langle \sigma \rangle$ - $\varepsilon$  криве за четири различите величине квадратног ( $L \times L$ ) узорка при чему је средњи напон добијен осредњавањем 10 реплика по величини. (Преузето из референце (Rinaldi and Mastilovic, 2014) са допуштењем издавача. Copyright (2014) by Elsevier)

Конкретан поступак је илустрован сликом 3.6 за четири различите величине квадратног ( $L \times L$ ) узорка. Прво треба уочити да из нормализације у међукораку,  $n$  са  $L^2$  (слика 3.6б), проистиче средња густина микропрслина ( $n/L^2$ ) али и прилично добро преклапање  $n$ - $\varepsilon$  изворних кривих (слика 3.6а) у линеарном делу. Овај међукорак је у сагласности са ранијим феноменолошким опажањима (Hansen et al., 1989) а Риналди и Лаи (Rinaldi and Lai, 2007) су показали и да је потребан са теоријске тачке гледишта. Међутим, добијање истоветних нагиба кривих је још увек недовољно за постизање скалирања независног од величине јер су критичне деформације ( $\varepsilon_{peak}$ ; обележене симболима на слици 3.6) још увек раштркане. Због тога је неопходно накнадно Фамили-Вишчеково скалирање (слика 3.6б на слику 3.6в), које доводи до преклапања критичних тачака (идентификованих са почетком локализације односно максимумом  $\sigma$ - $\varepsilon$  криве; види слику 3.5б), коришћењем експонента скалирања  $\alpha_\phi = \beta_\phi = -0.06$  (уочити да слика 3.6в представља детаљ те је раштрканост критичних тачака пренаглашена у односу на слику 3.6б).

У сагласности са основном хипотезом Фамили-Вишчековог скалирања (Staufer and Aharoni, 1992), успешно преклапање кривих илустровано сликом 3.6в имплицира да су број микропрслина у критичној тачки ( $n_{peak}$ ) и одговарајућа релативна деформација ( $\varepsilon_{peak}$ ) фракталне величине које се скалирају на следећи начин  $n_{peak} \propto L^{d-\beta_\phi}$  и  $\varepsilon_{peak} \propto L^{\beta_\phi}$ .

Следећи важан корак, који ће овде бити изостављен, је одређивање облика параметра оштећења  $D$  за разматрани систем који важи до критичне тачке (Rinaldi and Mastilovic, 2014).

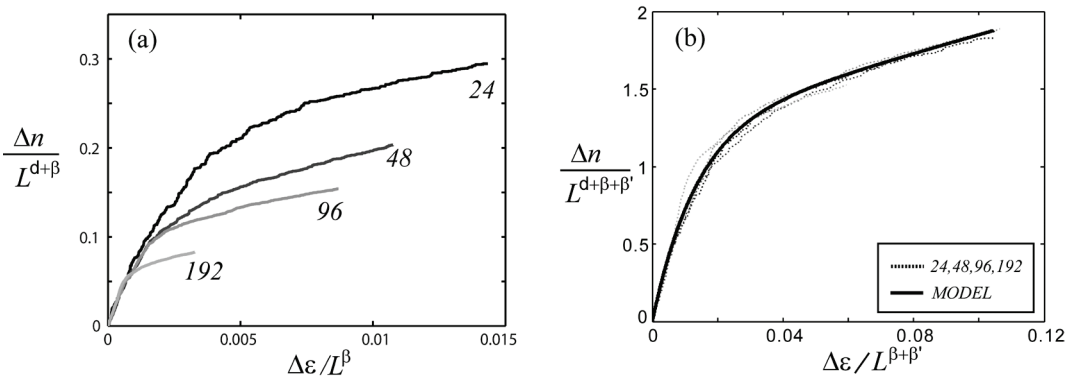


**Слика 3.6.** Криве (а)  $n$ - $\varepsilon$ , (б)  $n/L^2$ - $\varepsilon$ , (в)  $g$ - $\varepsilon$ . Густина микропрслина  $\rho$  је добијена нормализацијом  $n$  са  $L^2$ , што доводи до првог значајног преклапања кривих независно од  $L$  у преткритичној фази. Из накнадне примене скалирања од (б) до (в) проистиче преклапање података закључно са критичном тачком и са  $\beta_\phi = -0.06$  комплетира Фамили-Вишчеково скалирање у изразу (3.21) за  $n(\varepsilon, L)$ . (Преузето из референце (Rinaldi and Mastilovic, 2014) са допуштењем издавача. Copyright (2014) by Elsevier)

Други корак – Посткритични режим омекшавања: Угњеждена примена Фамили-Вишчековог скалирања на посткритично повећање броја микропрслина  $\Delta n$  и идентификација експонента  $\beta'_\phi$  који обезбеђује функцију  $g'(\Delta\varepsilon/L^{\beta_\phi+\beta'_\phi})$  инваријантну од скале. Из наведеног поступка произилази преклапање посткритичних података све до лома за било коју вредност  $L$

$$\Delta n(\varepsilon; L) = L^{d+\beta_\phi+\beta'_\phi} g' \left( \frac{\Delta\varepsilon}{L^{\beta_\phi+\beta'_\phi}} \right) \quad (3.23)$$

Дакле, што се тиче другог корака, процедура Крајчиновића, Риналдија и сарадника наставља се на аналоган начин, али се фокусира искључиво на посткритичне податке  $\Delta n$  наспрам  $\Delta\varepsilon$ , где су  $\Delta n = n - n_{peak}$  и  $\Delta\varepsilon = \varepsilon - \varepsilon_{peak}$ , док доњи индекс *peak* означава вредности у критичној тачки која одговара максимуму  $\sigma$ - $\varepsilon$  криве. За детаље консултовати (Rinaldi and Mastilovic, 2014) и тамо наведене изворне референце у којима је детаљно изложен и поступак обликовања модела оштећења за режим омекшавања.



**Слика 3.7.** (а) Посткритични подаци после трансформације коришћењем израза (AP2) са  $\beta_\phi = -0.06$ , и (б) преклапање података као резултат посткритичног скалирања у другом кораку коришћењем функције  $g'(\Delta\varepsilon/L^{\beta_\phi+\beta'_\phi})$  инваријантне од скале у изразу (3.23) са експонентима  $\beta_\phi = -0.06$  и  $\beta'_\phi = -0.54$ . (Преузето из референце (Rinaldi and Mastilovic, 2014) са допуштењем издавача. Copyright (2014) by Elsevier).

У овом прегледу ће бити само напоменуто да је други корак подложнији пажљивом преиспитивању пошто просторна расподела микропрслина није више униформна (услед појаве локализације) и представљање оштећења скаларним параметром је све више доведено у питање (Крајчиновић and Mastilovic, 1995). Заправо, релативно је мали број проблема при којима скаларни параметар оштећења представља потпуно адекватан избор. Примери оваквих појава (које се типично јављају при великим вишеосним притисцима те, последично, и

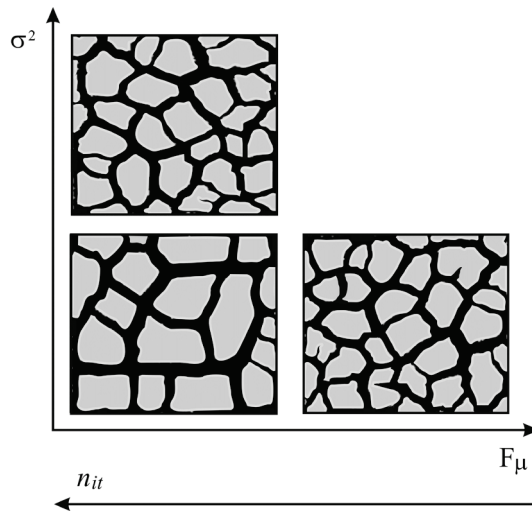
великим густинама микропрелина; нпр., у стенским масама) илустровани су сликама 4.7.7 и 4.7.8 у (Krajinovic, 1996).

*Фогел и коаутори* (Vogel et al., 2005) су користили тополошки и геометријски правилну решетку (слика 1.2а) са међучестичним дејствима заснованим на еластичним опругама насумично изабраних затезних чврстоћа. Сваки чвор троугаоне решетке повезан је са свих шест првих суседа (координациони број је  $z = 6$ ), свака веза има исту равнотежну дужину и крутост (константу опруге), док су мезочврстоће дефинисане насумичним бирањем деформације лома опруге из нормалне расподеле. Превасходни циљ овога модела је да репродукује основне физичке процесе који се јављају приликом настанка и раста прелина у глиненом тлу током сушења. Одговарајуће оптерећење настаје квази-статичким скупљањем (“shrinkage”) узорка услед испаравања воде (смањивања влажности услед сушења).

Скупљање 2Д глиненене површине услед сушења је симулирано сукцесивним смањивањима почетних дужина еластичних опруга што доводи до појаве сила контракције и повећења укупне деформационе енергије решетке. Оног тренутка када релативна деформација везе између два суседна чвора досегне критичну вредност ( $3.24_2$ ), одговарајућа еластична опруга се раскида уз ослобађање еластичне енергије која се, потом, расподељује међу суседним везама у процесу транзиције система ка новом равнотежном положају. Промена положаја чвора зависи од резултанте сила које на њега делују, али до померања чвора долази само уколико вредност резултантне силе у чвору премаши граничну вредност статичке адхезије. Хетерогеност је уведена у систем насумичним избором вредности релативних деформација лома из нормалне расподеле  $\mathcal{N}(\bar{\epsilon}_{cr}, \sigma^2)$ . Према томе, параметри модела су просечна (средња) критична релативна деформација  $\bar{\epsilon}_{cr}$ , њена варијанса  $\sigma^2$ , и сила трења  $F_\mu$ .

Додатни параметар, максимални број итерација  $n_{it}$ , неопходно је дефинисати зарад поступка итеративне релаксације (уравнотежења) решетке до које долази после сваког раскидања опруге. У зависности од  $n_{it}$ , решетка можда неће бити у *потпуности* уравнотежена (релаксирана) пре лома следеће опруге. Према томе, релаксациони параметар не представља само произвољно изабрани симулациони параметар пошто може бити доведен у везу са брзином сушења. Фогел и сарадници (Vogel et al., 2005) тврде да  $n_{it}$  може да буде интерпретиран као бездимензиона величина која повезује карактеристична времена појаве спољних сила,  $t_{ext}$ , са карактеристичним временима интерне динамике одзива система,  $t_{int}$ , преко релације  $n_{it} = t_{ext} / t_{int}$ .

Описана троугаона решетка са централним међудејствима успешно репродукује истакнуте појавне облике нелинеарне динамике развоја мреже прслина у исушеној глини, попут специфичних облика комада насталих фрагментацијом и одговарајућих карактеристичних углова бифуркације. Фогел и коаутори (Vogel et al., 2005) су квантитативно потврдили да модел репродукује не само типичне облике образаца распрострањања прслина<sup>8</sup> примећених у природи него и особену динамику еволуције тих образаца, што је утврђено еволуцијом густина Минковског (Minkowski) током зачећа прслина (Vogel et al., 2005). Ефекат параметара модела на обрасце распрострањања прслина шематски су илустровани на слици 3.8 на основу изворних резултата. Важно је да се нагласи да параметри модела имају директно физичко значење те могу бити повезани са физичким особинама материјала и контурним условима скупљања услед сушења и настајања прслина.



**Слика 3.8.** Шематски приказ ефеката утицајних параметара решеткистог модела Вогела и сарадника (критичне микро-деформационе варијансе ( $\sigma^2$ ), чворног трења ( $F_\mu$ ) и релаксације дефинисане бројем итерација ( $n_{it}$ )) на обрасце распрострањања оштећења. (Трендови су квалитативно репродуковани на основу података из референце (Vogel et al., 2005))

<sup>8</sup> Терминолошко појашњење: у материји која је предмет разматрања у овој монографији често се среће енглески израз “pattern” у различитим појмовима попут “crack pattern”, “damage pattern”, “fragmentation pattern”. У недостатку бољег, у свим наведеним случајевима ће бити коришћен идиом “образац распрострањања” као сажет терминолошки синоним од “образац просторне расподеле” који се, као предугачак, често чини рогобатним приликом употребе у сложенијим реченицама. Дакле, кроз цео текст ће за, нпр., “damage pattern” бити коришћен “образац распрострањања оштећења” као краће облик за “образац просторне расподеле оштећења”.

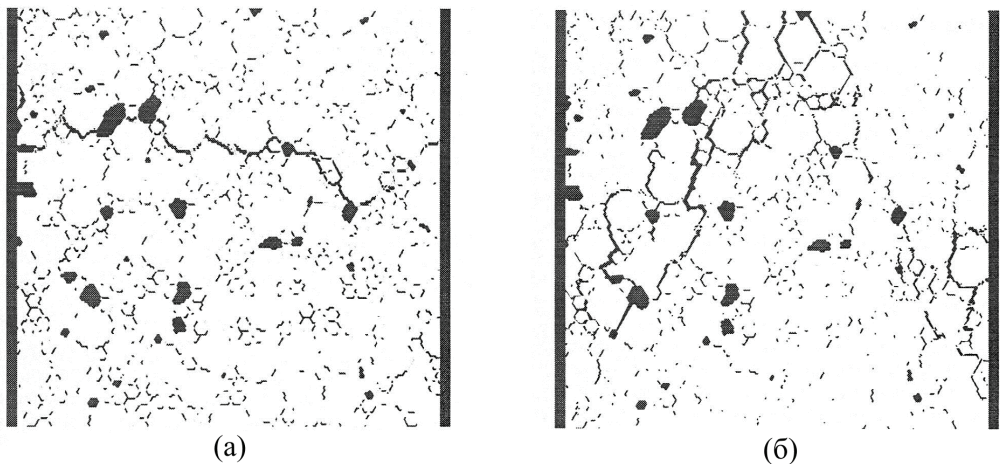
*Топен и коаутори* (Topin et al., 2007) вршили су дискретизацију на потчестичној скали, коришћењем троугаоне решетке са централним међудејствима, у циљу анализирања чврстоће и начина оштећења цементираних зрнастих материјала у функцији од запреминског удела везива,  $\rho_{\text{mх}}$  (општије, матрице или испуне; “the matrix volume fraction”; структурни параметар) и адхезије између агрегата и везива (параметар материјала). Њихов циљ је био да рашчлани улоге поменутих параметара у карактеристикама лома (крутост, затезна чврстоћа), акумулацији оштећења (деградација крутости, лом честице) и преноса напона (статистичке расподеле, напони у појединим фазама).

Решетка коришћена у овоме  $\alpha$  моделу састоји се из линеарних, еластично-кртих опруга дефинисаних константама крутости и граничним силама раскидања (3.24<sub>1</sub>). С обзиром да појединачне везе преносе само аксијалне силе, глобални отпор на смицање и дисторзију обезбеђен је високим нивоом повезаности чворова решетке. Постоји пет различитих типова веза које представљају три фазе (агрегат, везивна матрица и шупљина) и два међупростора (агрегат-агрегат и агрегат-везиво). Квадратна решетка слободних бочних страна оптерећена је алтернативно на једноосно затезање или притисак, задавањем померања на горњу ивицу узорка.

Криве напон-деформација откривају изражену асиметрију између оптерећења на затезање и притисак, коју аутори повезују са појавом оштећења приликом саме израде материјала (која се рефлектује кроз постојање некохезивних контаката између појединих парова агрегата; тзв. „голих контаката”). Глобални одзив у режиму омекшавања карактерише простирање доминантне прелине неправилног облика и поступно опадање ефективне еластичности услед акумулације оштећења у хетерогеном материјалу. Мапе напонских поља у правцу оптерећења затезање-притисак коришћене су за изучавање ефекта заглављивања честица (“jamming of the particles”) који доводи до концентрације напона дуж ланца агрегата (тзв. укочена кичма – “jammed backbone”).

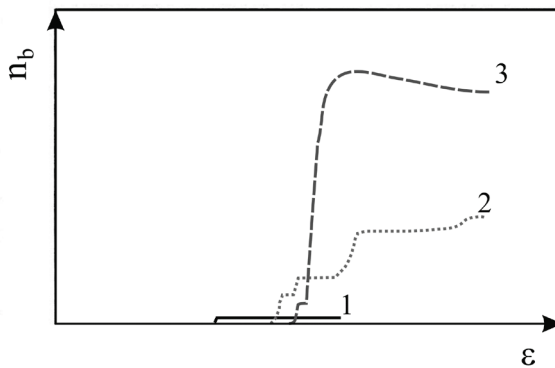
Разматран је утицај запреминског удела везивне матрице на ефективну крутост приликом оптерећења на затезање и притисак; добијени резултати су, такође, упоређени са теоријским предвиђањима Мори-Танака модела за ефективну крутост трофазног композита. Показано је да се ефективна крутост при затезању повећава линеарно са запреминским уделом везивне матрице због њене улоге као испуне којом се смањује број „голих контаката”, тј. шупљина. Такође су испитивани како површински тако и запремински (“bulk”) ефекти везивне матрице (у смислу њиховог одражавања на смањење порозности и броја „голих контаката”).

Појавни обрасци распрострањања оштећења за случајеве једноосног оптерећења на затезање и притисак у вертикалном правцу (слика 3.9) у близини фазног прелаза из хомогеног у хетерогени мод оштећења откривају дифузну нуклеацију прслина која је доминантна у режиму оптерећења које претходи критичној тачки (која одговара максималној вредности напона) и локализовано оштећење које преовлађује потом. Овим појавним обрасцима распрострањања оштећења при једноосним оптерећењима одговарају добро познати облици кривих напон-деформација са мање (затезање) или више (притисак) израженом режимом омекшавања и нивоом макроскопске чврстоће. Пошто је чврстоћа међуповрши агрегат-везиво по правилу инфериорна у поређењу са појединачним чврстоћама самих фаза (агрегата и везивне матрице; Landis and Bolander, 2009), прслина готово да прати контуре агрегата у сагласности са ранијим опажањима Мاستиловића и Крајчиновића (1999с) при симулацијама судара бетонских плоча малим брзинама. У случају оптерећења на затезање, пропација главне (доминантне) прслине је нагла и практично управна на правац оптерећења. Њена појава доводи до наглог скока попустљивости узорка. Насупрот томе, у случају притисног оптерећења, простирање главних прслина је закривљено под оштрим углом у односу на правац оптерећења а доминантне прслине су наизглед дебље јер укључују секундарне прслине које се гранају у односу на главне. Може да се примети са слике 3.9 да геометрија решетке контролише правац раста прслина и да мапа (образац распрострањања) оштећења одражава правилну геометријску структуру одговарајуће решетке.



**Слика 3.9.** Појавни обрасци распрострањања оштећења у случају оптерећења на (а) затезање, и (б) притисак у вертикалном правцу. (Преузето из референце (Torin et al., 2007) са допуштењем издавача. Copyright (2007) by Springer)

Еволуција оштећења одражава се кроз деградацију чврстоће која је индиректно илустрована на слици 3.10 преко промене удела раскинутих веза у фази агрегата у укупном броју раскинутих веза,  $n_b$ , наспрам нивоа релативне деформације у правцу наношења оптерећења,  $\varepsilon$ . Вредно је труда да се овој аналогiji посвети извесна пажња. Као што је већ било речи, уврежена је пракса да се у решеткастим моделима број раскинутих веза користи као мера (скаларни параметар) оштећења материјала (Herrmann and Roux, 1990; Крајсковић, 1996). Међутим, Топен и коаутори су удео раскинутих веза у фази агрегата грубо поистовећивали са уделом оштећених агрегата за који су, онда, сматрали да, у одређеним ситуацијама, одражава меру ефективне тврдоће (Torin et al., 2007). При релативно слабом нивоу адхезије између агрегата и везивне матрице ( $A^{p-mx}$ ), представљеним кривом 1 на слици 3.10, оштећење агрегата је маргинално без обзира на запремински удео матрице,  $\rho_{mx}$ , јер преовладава кидање веза дуж међуграничног простора те је релативно мало прслина у самом агрегату. При довољно високом нивоу адхезије (криве означене са 2 и 3), при малим деформацијама удео оштећења агрегата је и даље маргиналан, али по преласку одређеног прага деформације долази до више или мање израженог повећања  $n_b$ , у зависности од вредности  $\rho_{mx}$ , до достизања стационарних вредности (слика 3.10).

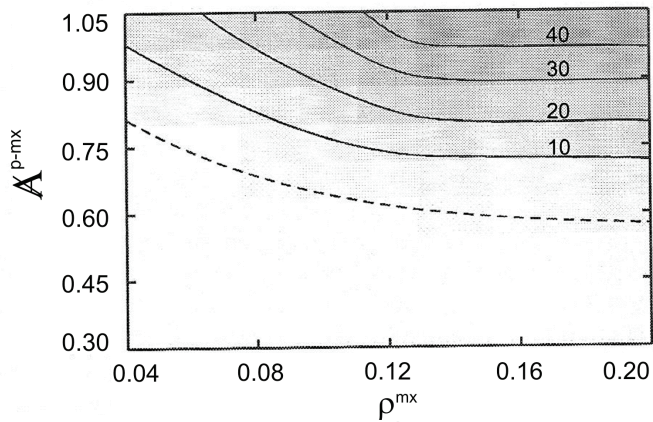


**Слика 3.10.** Шематски приказ промене броја раскинутих веза у фази агрегата нормализован са укупним бројем раскинутих веза (удео раскинутих веза агрегата у укупном броју раскинутих веза целог система),  $n_b$ , у функцији аксијалне релативне деформације у правцу оптерећења,  $\varepsilon$ . Три криве означавају различите комбинације параметара. Топен и коаутори (Torin et al., 2007) су у својим симулацијама користили: (1)  $A^{p-mx} = 0.6$ ,  $\rho_{mx} = 0.08$ ; (2)  $A^{p-mx} = 1$ ,  $\rho_{mx} = 0.08$ ; (3)  $A^{p-mx} = 1$ ,  $\rho_{mx} = 0.18$ ; где  $A^{p-mx}$  означава меру адхезије између честице и матрице у односу на затезну чврстоћу саме честице (која представља и теоријску затезну чврстоћу система). (Репродуковано на основу података из референце (Torin et al., 2007).)



Нагла деградација чврстоће у случају једноосног затезања је сликовито упоређена са поступнијом природом еволуције оштећења у случају притисног оптерећења, што одражава раније поменути разлику у физичкој природи и појавним облицима оштећења. Топен и коаутори (Torin et al., 2007) открили су да запремински удео везивне матрице и чврстоћа везе агрегат-везиво играју готово идентичну улогу у затезној чврстоћи цементног зрнастог материјала. Са друге стране, та два параметра контролишу на различите начине карактеристике оштећења композитног материјала што је изражено процентом раскинутих веза у фази агрегата *непосредно по лому* узорка (слику 3.11). Може се приметити да билинеарна граница омеђује параметарски простор у коме долази до појаве оштећења агрегата. Ово значи да се, у овом опсегу вредности параметара, прелине простиру или у везиву или дуж међуповрши (интефејса). Аутори су истакли да је оштећење агрегата наизглед осетљивије на чврстоћу пријањања (адхезије) честице и везива него на запремински удео везива. Интересантно је да запремински удео везива  $\rho_{\text{mx}} = 0.12$ , који представља граничну вредност утицаја на  $l_b$ , одражава праг перколације везивне матрице, са потпуно прекривеним агрегатима свуда сем на местима „голих контаката”.

Коначно, аутори су предложили да је граница оштећења агрегата контролисана једним јединим параметром — релативном јачином међуповрши агрегата и везива — који представља комбинацију запреминског удела везива и пријањања агрегат-везиво.



**Слика 3.11.** Параметарска мапа процента раскинутих веза у функцији чврстоће пријањања (адхезије) честице и везивне матрице ( $A^{\text{p-mx}}$ ) и запреминског удела везива ( $\rho_{\text{mx}}$ ). (Преузето из референце (Torin et al., 2007) са допуштењем издавача. Copyright (2007) by Springer).

Хоу (Hoу, 2007) је унапредио троугаону решетку са централним међудејствима и шестоугаоном јединичном ћелијим уводећи у модел теорију еластичности великих деформација. Модел решетке са великим деформацијама коришћен је за симулацију неколико репрезентативних проблема еластичности великих деформација: квадратни равански узорак оптерећен на једносно затезање, узорак са жљебом оптерећен затезућом силом, и равански узорак са прслином оптерећен на мод I затезање. Поређење аналитичких резултата са резултатима нумеричких симулација коришћењем горе описане решетке откривају изузетно слагање и такође демонстрирају да решеткасти модели са великим деформацијама могу да репродукују прилично добро сингуларитет великих деформација.

Претпостављени критеријум кидања веза коришћен је у циљу описивања процеса лома у оквиру еластичности великих деформација код композита изложених великим деформацијама. Повећавање деформације решетке праћено је повећавањем истезања појединачних веза све док критеријум кидања није достигнут у једној или више веза које се у том случају уклањају из мреже. Критеријум кидања везе може бити дефинисан на више начина, на пример у смислу критичних вредности

$$f^{(b)} = f_{cr}, \quad \varepsilon^{(b)} = \varepsilon_{cr}, \quad E^{(b)} = E_{cr} \quad (3.24)$$

везе на силу, истезање, односно, еластичну деформациону енергију. Хоу се одлучио на критеријум чврстоће везе на кидање (3.24<sub>1</sub>). Овај процес напредује док решетка у потпуности не изгуби своју носећу способност перколацијом прслине. Две конфигурације са два ивична жљеба оптерећена на мод I коришћене су за симулације до лома узорка услед великих деформација и то: равански узорак од хомогног изотропног материјала и равански узорак од композита великих деформација.

Осим елементарних критеријума кидања везе (3.24) развијени су и многи други сложенији критеријуми од којих ће неки бити поменути у каснијем излагању. Што се тиче критеријума лома у рачунској механици прекидних средина, детаљна разматрања могу да се нађу, нпр., у (Davie and Bicanic, 2003; Tavarez i Plesa, 2007; Pan et al., 2018).

## 3.2 Решетке са централно-угаоним међудејствима ( $\alpha$ - $\beta$ модели)

Решетка са централно-угаоном интеракцијом (позната и под именом  $\alpha$ - $\beta$  модел), настала је надоградњом  $\alpha$  модела додавањем угаоне опруге између суседних веза које се сучељавају у истом чвору (Ostoja-Starzewski, 2002; Wang et al., 2009a).

Троугаони  $\alpha$ - $\beta$  модел су детаљно разматрали Кале и Остоја-Старжевски (Kale and Ostoja-Starzewski, 2015) у контексту изучавања оштећења материјала.

### 3.2.1 Троугаона решетка са централно-угаоним међудејствима

Троугаона решетка са централно-угаоном интеракцијом добија се увођењем угаоних опруга на начин илустрован сликом 3.12. Крутост угаоних опруга дефинисана је константом опруге  $\beta^{(b)}$ . Еластичне особине јединичне ћелије у потпуности су одређене са шест независних константи опруга  $\{\alpha^{(b)}, \beta^{(b)}, b = 1, 2, 3\}$  сходно условима симетрији јединичне ћелије у односу на припадајућу честицу,  $\alpha^{(b)} = \alpha^{(b+3)}$  и  $\beta^{(b)} = \beta^{(b+3)}$  за  $b = 1, 2, 3$  (изотропни Кирквудов модел).

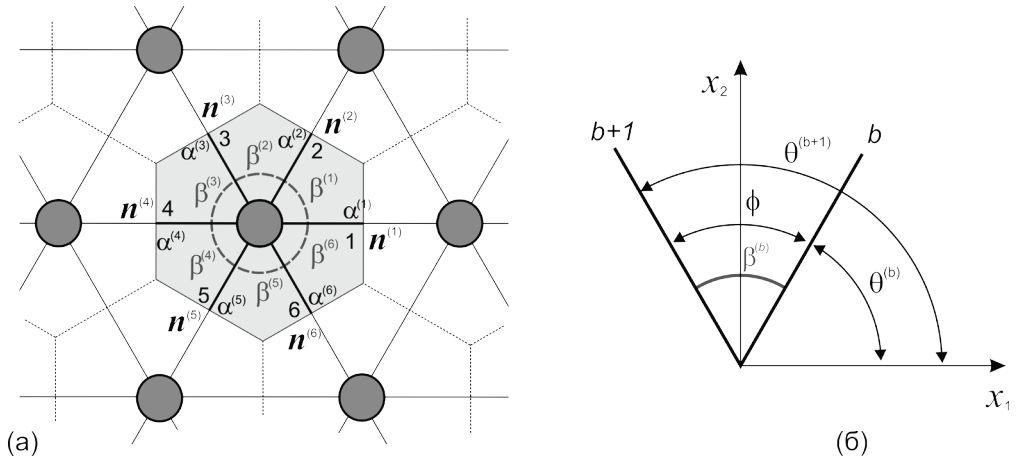
Инфинитезимална промена угла везе означене са  $b$  у односу на референтну конфигурацију која је илустрована сликом 3.12б представља се у облику

$$\Delta\theta_\gamma^{(b)} = e_{\gamma\alpha\beta} \varepsilon_{\beta\delta} n_\alpha n_\delta \quad \alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, 2$$

уз напомену да је  $\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} = \mathbf{1}$  а  $e_{\gamma\alpha\beta}$  је пермутациони симбол. Имајући у виду слику 3.12б, инфинитезимална промена угла између две суседне везе ( $b$  и  $b+1$ ) је  $\Delta\phi = \Delta\theta^{(b+1)} - \Delta\theta^{(b)}$  па је стога деформациона енергија ускладиштена у угаоној опрузи  $\beta^{(b)}$

$$\mathbf{E}_B^{(b)} = \frac{1}{2} \beta^{(b)} |\Delta\phi|^2 = \frac{1}{2} \beta^{(b)} \left\{ e_{\gamma\alpha\beta} \varepsilon_{\beta\delta} \left[ n_\alpha^{(b+1)} n_\delta^{(b+1)} - n_\alpha^{(b)} n_\delta^{(b)} \right] \right\} \quad (3.25)$$

Компоненте тензора ефективне еластичности троуганог  $\alpha$ - $\beta$  модела могу се извести сабирањем деформационих енергија централних интеракција (3.6) и свих шест угаоних опруга (3.25)



Слика 3.12. Правилна троугаона решетка са шестоугаоном јединичном ћелијом и централно-угаоном међучестичном интеракцијом између првих суседа ( $\alpha$ - $\beta$  модел).

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \underbrace{\frac{1}{2\sqrt{3}} \sum_{b=1}^6 \alpha^{(b)} n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b)}}_{\alpha \text{ интеракција}} + \underbrace{\frac{1}{2\sqrt{3}l^2} \sum_{b=1}^6 \{ (\beta^{(b)} + \beta^{(b+1)}) \delta_{\alpha\gamma} n_{\chi}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\chi}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} - (\beta^{(b)} + \beta^{(b+1)}) n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} - \beta^{(b)} \delta_{\alpha\gamma} n_{\chi}^{(b)} n_{\beta}^{(b+1)} n_{\chi}^{(b+1)} n_{\delta}^{(b)} + \beta^{(b)} n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b+1)} n_{\gamma}^{(b+1)} n_{\delta}^{(b)} - \beta^{(b)} \delta_{\alpha\gamma} n_{\chi}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\chi}^{(b+1)} n_{\delta}^{(b+1)} + \beta^{(b)} n_{\alpha}^{(b+1)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b+1)} \}}_{\beta \text{ интеракција}}$$

Ово обезбеђује основу за моделирање изотропног материјала коришћењем решетке. Корисно је упростити овај израз додељивањем истих константи свим аксијалним односно угаоним опругама (тј.,  $\alpha^{(b)} = \alpha$  и  $\beta^{(b)} = \beta$  за  $b = 1, \dots, 6$ ), што се своди на специјалан случај Кирквудовог модела.

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{\alpha}{2\sqrt{3}} \sum_{b=1}^6 n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} + \frac{\beta}{2\sqrt{3}l^2} \sum_{b=1}^6 \{ 2\delta_{\alpha\gamma} n_{\beta}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} - 2n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} - \delta_{\alpha\gamma} n_{\chi}^{(b)} n_{\beta}^{(b+1)} n_{\chi}^{(b+1)} n_{\delta}^{(b)} + n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b+1)} n_{\gamma}^{(b+1)} n_{\delta}^{(b)} - \delta_{\alpha\gamma} n_{\chi}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} n_{\chi}^{(b+1)} n_{\delta}^{(b+1)} + n_{\alpha}^{(b+1)} n_{\beta}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} n_{\delta}^{(b+1)} \}$$

Сходно томе следи да су све компоненте ефективног тензора еластичности које су различите од нуле

$$\begin{aligned}
 C_{1111} = C_{2222} &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left( \frac{9}{4} \alpha + \frac{9}{4} \frac{\beta}{l^2} \right) = \frac{E}{1-\nu^2} \\
 C_{1122} = C_{2211} &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left( \frac{3}{4} \alpha - \frac{9}{4} \frac{\beta}{l^2} \right) = \frac{E\nu}{1-\nu^2} \\
 C_{1212} &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left( \frac{3}{4} \alpha + \frac{9}{4} \frac{\beta}{l^2} \right) = \frac{E}{2(1+\nu)}
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

С обзиром на изразе (3.26), може се показати да је задовољен услов изотропности материјала (1.7), тако да остају само две независне еластичне константе. На основу једначина (3.26), равански модул еластичности и Поасонов коефицијент могу бити изражени у функцији константи опруга  $\alpha$  и  $\beta$  на следећи начин

$$\nu = \frac{C_{1122}}{C_{1111}} = \frac{\frac{1}{3} - \frac{\beta}{\alpha l^2}}{1 + \frac{\beta}{\alpha l^2}}, \quad E = \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \left[ \frac{1 + 3 \frac{\beta}{\alpha l^2}}{1 + \frac{\beta}{\alpha l^2}} \right] \tag{3.27}$$

Уношењем  $\beta = 0$  у једначине (3.27) добијају се равански модули  $\alpha$  модела дефинисани једначинама (3.10). Комплетан опсег дефинисаности Поасоновог коефицијента за случај раванског стања деформација (раванског Поасоновог коефицијента)

$$-1 < \nu < \frac{1}{3} \tag{3.28}$$

може се добити из израза (3.27а) за два гранична случаја:  $\beta/\alpha \rightarrow \infty$  ( $\beta$  модел) и  $\beta/\alpha \rightarrow 0$  ( $\alpha$  модел).

Равански модули компресије и клизања дефинисани су у функцији крутости аксијалних ( $\alpha$ ) и угаоних ( $\beta$ ) опруга преко следећих израза

$$K = \frac{\sqrt{3}}{4} \alpha, \quad G = \frac{\sqrt{3}}{8} \alpha \left( 1 + 3 \frac{\beta}{\alpha l^2} \right)$$

који показују да угаоне опруге немају утицаја на промену запремине.

### 3.2.2 Квадратна решетка са централно-угаоним међудејствима

Квадратна решетка са централно-угаоном интеракцијом је развијена уођењем угаоних опруга у решетку са централним силама анализирану у поглављу 3.1.2. Према томе, конфигурација јединичне ћелије је идентична оној илустрованој на слици 3.2 са додатком угаоних опруга између суседних веза које се сустичу у истој честици. Аналогно са претходно уведеним упрошћењима  $\alpha$  модела  $\alpha^{(b)} = \alpha^I$  и  $\alpha^{II(b)} = \alpha^{II}$ , константама свих угаоних опруга додељује се иста вредност,  $\beta^{(b)} = \beta$ . Углови између веза и јединични вектори дефинисани једначином (3.16) остају непромењени. После поступка извођења, истоветног ономе коришћеном у поглављу 3.1.1, компоненте тензора ефективне еластичности које су различите од нуле добијају се у следећем облику

$$\begin{aligned} C_{1111} = C_{2222} &= \frac{1}{2} \alpha^I + \alpha^{II} = \frac{E}{1-\nu^2}, \\ C_{1122} = C_{2211} &= \alpha^{II} = \frac{E\nu}{1-\nu^2}, \quad C_{1212} = \alpha^{II} + \frac{\beta}{l^2} = \frac{E}{2(1+\nu)} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Пре наставка анализирања квадратне решетке са централно-угаоним међудејствима упутно је да се размотри специјални случај када дијагоналне везе нису укључене у  $\alpha$ - $\beta$  модел. Према томе, ако се  $\alpha^{II}=0$  унесе у израз (3.29), одговарајуће компоненте тензора ефективне еластичности постају

$$C_{1111} = C_{2222} = \frac{1}{2} \alpha^I = \frac{E}{1-\nu^2}, \quad C_{1122} = C_{2211} = 0 = \frac{E\nu}{1-\nu^2}, \quad C_{1212} = \frac{\beta}{l^2} = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (3.30)$$

што значи да је Поасонов коефицијент једнак нули а константе опруге имају вредности  $\alpha = 2E$  и  $\beta = E l^2 / 2$ .

Упоредивање израза за компоненте тензора еластичности  $\alpha$  модела (3.17) и одговарајућег  $\alpha$ - $\beta$  модела (3.29) указује на то да угаоне интеракције утичу само на модул смицања ( $C_{1212}$ ). Област дефинисаности Поасоновог коефицијента је, последично, проширена због утицаја угаоних опруга на модул смицања. Сходно томе, аксијалне и дијагоналне ( $\alpha$ ) константе опруга остају непромењене

$$\alpha^I = \frac{2E}{1+\nu}, \quad \alpha^{II} = \frac{E\nu}{1-\nu^2}, \quad \beta = \frac{(1-3\nu)El^2}{2(1-\nu^2)} \quad (3.31)$$

Еластични коефицијенти за раванско стање деформација су, по дефиницији

$$\nu = \frac{C_{1122}}{C_{1111}} = \frac{2\alpha''}{\alpha' + 2\alpha''}, \quad E = \frac{\alpha'}{2} \left( \frac{\alpha' + 4\alpha''}{\alpha' + 2\alpha''} \right) \quad (3.32)$$

Изрази (3.30) и (3.31) упућују на опсег дефинисаности Поасоновог коефицијента

$$-1 < \nu \leq \frac{1}{3} \quad (3.33)$$

који је идентичан претходно добијеном за троугаону решетку са централно-угаоним међудејствима.

Комбиновање израза (3.31) и (3.32) са неједначином (3.33) даје ограничени опсег односа аксијалних и дијагоналних  $\alpha$ -опруга

$$\frac{\alpha''}{\alpha'} \leq \frac{1}{4} \quad (3.34)$$

који представља наставак одговарајућег услова физички наметнутог квадратној решетки са централним међудејствима.

### 3.2.3 Хронологија развоја и примери примене метода решетки са централно-угаоним међудејствима

*Граф и коаутори* (Grah et al., 1996) дају илустративан пример добро промишљене примене троугаоне решетки са централно-угаоним интеракцијом (поглавље 3.2) симулацијом кртог интергрануларног лома лимова од поликристалног алуминијума (Al) повећане кртости услед деловања галијума (Ga). У фази припреме за рачунске симулације, аутори су произвели алуминијумске лимове и обавили квази-статичке двоосне (биаксијалне) лабораторијске тестове на затезање како би добили експерименталне податке за валидацију свога решеткастог модела. Рачунски домен је дискретизован коришћењем правилне троугаоне решетки на просторној скали мањој од величине кристалног зрна. Вредности константи и кртости аксијалних опруга додељене су у зависности од њиховог положаја на узорку, тј., према зрну којем су придружене одговарајуће везе, поређењем са стварним микрографима. Везама међуповрши (које одговарају границама кристалних зрна) — које су нарочито важне јер представљају структурне елементе инфериорне чврстоће — додељене су константе аксијалних опруга у складу са правилом редно (серијски) везаних опруга са фактором утицајности одмереним у зависности од њихових одговарајућих парцијалних дужина

$$\alpha = \left( \frac{l_1}{l\alpha_1} + \frac{l_2}{l\alpha_2} \right)^{-1}, \quad l = l_1 + l_2 \quad (3.35)$$

Пошто ова расподела за све опруге које *пресецају* границе двају суседних кристалних зрна (као приближну илустрацију погледати слику 1.2в и уочити кратке испрекидане линије које пресецају границе међуповрши (интерфејса)) представља *кључни* аспект у рачунским симулацијама ове врсте, треба уочити да су Грах и коаутори овде то учинили комбиновањем које узима у обзир припадајуће дужине опруга оба суседна кристала. С обзиром на то да је граница зрна много слабија од самог кристала, усвојен је фактор умањења чврстоће од 0.01 и примењен на сваку  $\alpha$  опругу међуповрши. Овим је узето у обзир повећање *кртости* дуж граница кристалних зрна због преференцијалног деловања галијума у тим областима. Додељивање константи угаоних опруга природно није скопчано са тако сложеним разматрањима али јесте са одређеном дозом произвољности.

Решеткасти узорак квадратног облика квази-статички је оптерећен на двоосно затезање *контролисаним померањем* граничних чворова

$$u_\alpha = \bar{\varepsilon}_{\alpha\beta} x_\beta = \bar{\varepsilon} \delta_{\alpha\beta} x_\beta \quad (3.36)$$

дефинисаним преко макроскопске релативне деформације  $\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta} = \bar{\varepsilon} \delta_{\alpha\beta}$  (где  $\delta_{\alpha\beta}$  представља Кронекеров симбол). Према томе, пре лома узорка, све границе су изложене само првом моду (мод I) оптерећења. Са повећавањем деформације решетке, повећава се истезање појединачних веза све док се у некој од веза коначно не испуни критеријум кидања, што доводи до њеног уклањања из мреже. Аутори су користили критеријум критичне силе кидања (3.24<sub>1</sub>). Треба да се нагласи да је повећање оптерећења у износу од  $\Delta \bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}$  извођено тако што се прво растерети цела решетка а потом се поново оптерети са  $\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta} + \Delta \bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}$ . Овај поступак се понавља све док оштећење не перколира кроз решетку што доводи до глобалног лома узорка.

Обрасци распростирања прслина, проистекли из рачунарске симулације двоосног оптерећивања 2Д узорка кртог поликристалног материјала са инфериорном чврстоћом међуповрши кристалних зрна, веома добро се слажу са онима добијеним у одговарајућим лабораторијским експериментима. Аутори су детаљно разматрали нека одступања од експериментално добијених образаца и указали на њихове узроке.



*Џубота и коаутори* (Tsubota et al., 2006) користили су рачунарске симулације прекидних средина у циљу истраживања микроциркулације црвених крвних зрнаца (у даљем тексту, еритроцита) у вискозној плазми. Деформабилност и еластичност еритроцита потичу од скелетне архитектуре њихове мембране. Троугаона мрежа опруга са централно-угаоном интеракцијом (поглавље 3.2) коришћена је за моделирање деформабилне мембране еритроцита. Модел мреже опруга — који су Џубота и сарадници (Tsubota et al., 2010) проширили касније на 3Д проблеме — састоји се од честица еритроцита са централно-угаоним међудејствима којима се репрезентује еластични одзив мембранске структуре током нестишљивог вискозног струјања. Релевантни параметар, чији је ефекат на микроциркулацију крви истраживан, је хематокрит (Hct), дефинисан као запремни однос еритроцита и крви, који има изузетно велики утицај на реолошке карактеристике крви. Ефекат хематокрита на отпор циркулације крви је од очигледног интереса као и механички фактори попут деформације и облика еритроцита и њихова механичка интеракција са плазмом.

Укупна деформациона енергија мембране еритроцита је

$$E = E_A + E_B = \frac{1}{2} \alpha \sum (\lambda - 1)^2 + \frac{1}{2} \beta \sum \tan^2 \left( \frac{\theta - \theta_0}{2} \right) \quad (3.37)$$

где су  $\alpha$  и  $\beta$  константе аксијалних, односно угаоних, опруга;  $\lambda = \Delta l / l_0$  релативно истезање везе; а  $\theta$  и  $\theta_0$  тренутни, односно почетни, угао између узастопних веза. На основу принципа виртулног рада, сила која делује на честицу  $i$  мембране еритроцита је

$$F_i = - \frac{\partial E}{\partial r_i} \quad (3.38)$$

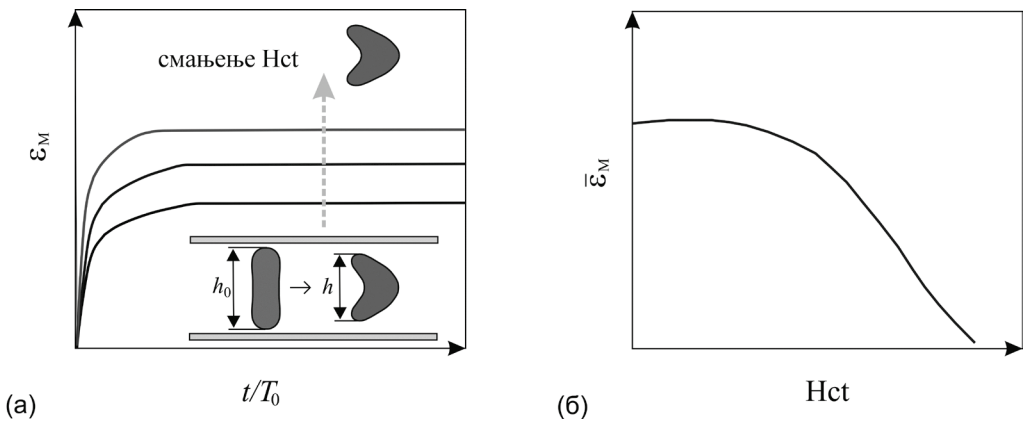
где је  $r_i$  вектор положаја честице  $i$ .

Дефиниција средње вредности индекса деформације

$$\varepsilon_M = \left| \frac{h - h_0}{h_0} \right|$$

дата је у зависности од геометријских величина дефинисаних на слици 3.13а. На истој слици шематски је приказана и еволуција  $\varepsilon_M$  за три различите вредности Hct. Криве приказују да се  $\varepsilon_M$  монотонно повећава док у тренутку засићења не досегне горњи ниво који је функција Hct. Карактеристично време коришћено за нормализацију је  $T_0 = v_0 / L$ , где  $v_0 = 0.011 \text{ m/s}$  представља константну униформну брзину на уласку у капилар, док је  $L = 90 \text{ }\mu\text{m}$  дужина капилара.

Слика 3.13б илуструје функционалну зависност просечне  $\bar{\epsilon}_M$  вредности од  $Hct$  у временском интервалу  $t/T_0 \in [1.0, 3.0]$ . Резултати симулација методом решетки недвосмислено су показали да је смањење вредности  $Hct$  праћено са већим деформисањем еритроцита током циркулације крви као што је илустровано на слици 3.13а. Ово опажање показује да механичка интеракција између еритроцита ограничава њихову деформацију. Резултати симулација добијени коришћењем модела на бази мреже аксијалних опруга у веома доброј су сагласности са *in vitro* експерименталним опажањима. Цубота и коаутори (Tsubota et al., 2006, 2010) су детаљно илустровали промену облика мембране еритроцита током времена у функцији вредности  $Hct$ .

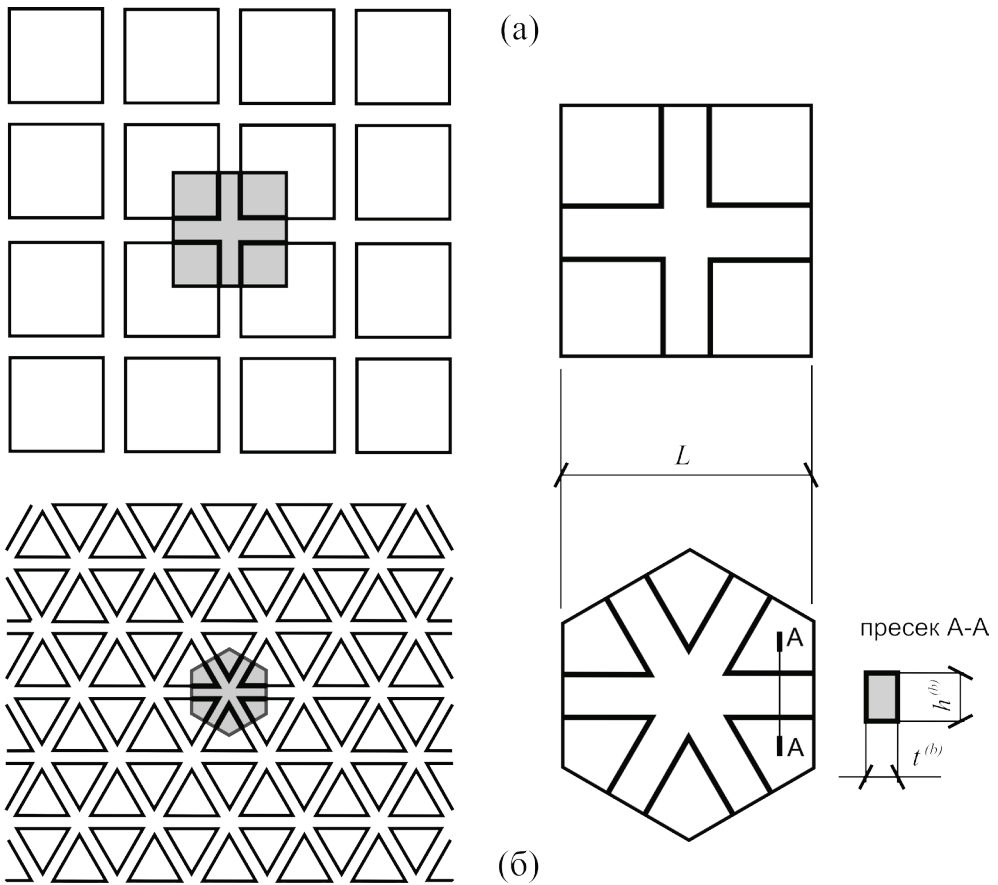


**Слика 3.13.** 2Д симулације протока крви између паралелних плоча обављене су са различитим вредностима хематокрита ( $Hct$ ). Шематски приказ промене: (а) индекса деформације,  $\epsilon_M$ , у средњем делу канала са променом  $Hct$  вредности, и (б) средње вредности индекса деформације,  $\bar{\epsilon}_M$ , у функцији  $Hct$ . (Репродуковано на основу података из референце (Tsubota et al., 2006).)

Сличан 2Д модел мреже еластичних опруга користили су Ванг и коаутори (Wang et al., 2009b) за истраживање скелетне структуре мембране еритроцита и изучавање динамичких понашања агрегата еритроцита у микроканалима. Агрегација и дисоцијација различито деформисаних еритроцита испитивани су при различитим токовима узимајући у обзир реологију ћелија и кинетику њиховог међудејства. Нумерички резултати су показали квантитативно/квалитативну сличност са експерименталним опажањима и резултатима других истраживача.

### 3.3 Решетке са гредним међудејствима

Решетка са гредним међудејствима (гредна решетка) резултат је надоградње  $\alpha$  модела (мреже опруга) заменом линијских структурних елемената способних за пренос само подужне (аксијалне) силе са гредним носећим елементима који могу да преносе и попречне (трансверзалне) силе и моменте. Презентација гредних решетки која следи заснована је претежно на радовима Остоје-Старжевског, Карихалуа и сарадника, и Љуа и сарадника (Ostoja-Starzewski, 2002; Karihaloo et al., 2003; и Liu et al., 2008).



Слика 3.14. (а) Квадратна гредна решетка са квадратном јединичном ћелијом; (б) Трогона гредна решетка са шестоугаоном јединичном ћелијом.

### 3.3.1 Троугаона Бернули-Ојлерова гредна решетка

Бернули-Ојлерове греде које преносе подужне и попречне силе и моменте се уобичајено користе у моделима гредних решетки у циљу симулације простирања прслина и лома бетона (нпр., Schlangen and Garboczi, 1997; van Mier, 1997; Lilliu and van Mier, 2003). Кинематика гредне решетки описана је са три функције  $u_1$ ,  $u_2 = w$ , и  $\varphi$ , које дефинишу померања и обртања у чворовима решетки уз претпоставку да пресеци греда по савијању остају равни и управни на неутралну линију. Усвајање претпоставке о *линеарности* функција чворних померања и обртања доводи до израза за локалну специфичну деформацију,  $\gamma$ , и кривину,  $\kappa$ , у следећој форми

$$\gamma_{\gamma\delta} = u_{\delta,\gamma} + e_{\delta\gamma 3} \varphi, \quad \kappa_\alpha = \varphi_{,\alpha} \quad (3.39)$$

Просечна подужна релативна деформација у полугреди (означеној са  $b$ ) јединичне ћелије решетки је

$$\gamma^{(b)} = n_\gamma^{(b)} n_\delta^{(b)} \gamma_{\gamma\delta}. \quad (3.40)$$

што ће рећи да је  $\gamma^{(b)} L^{(b)}$  просечна промена дужине греде. Разлика између угла обртања тетиве греде и обртања њених крајњих чворова је

$$\tilde{\gamma}^{(b)} = n_\gamma^{(b)} \tilde{n}_\delta^{(b)} \gamma_{\gamma\delta} = n_\gamma^{(b)} \tilde{n}_\delta^{(b)} u_{\delta,\gamma} - \varphi \quad (3.41)$$

где су са  $n_\gamma^{(b)}$  и  $\tilde{n}_\gamma^{(b)}$  означене, редом, компоненте јединичног вектора у правцу осе греде и управно на њу.

Према томе, разлика између углова обртања крајева греде је

$$\kappa^{(b)} \equiv n_\gamma^{(b)} \kappa_\gamma \quad (3.42)$$

Елементарна теорија гредних носача подразумева да су релације између сила и померања, односно момента и углова обртања, у сваком чвору следећег облика

$$F^{(b)} = E^{(b)} A^{(b)} \gamma^{(b)}, \quad Q^{(b)} = \frac{12 E^{(b)} I^{(b)}}{(L^{(b)})^2} \tilde{\gamma}^{(b)}, \quad M^{(b)} = E^{(b)} I^{(b)} \kappa^{(b)} \quad (3.43)$$

У изразу (3.43) коришћене су познате релације за површину,  $A^{(b)} = t^{(b)} h^{(b)}$ , и аксијални моменат инерције,  $I^{(b)} = t^{(b)} [h^{(b)}]^3 / 12$ , попречног пресека греде (имајући у виду ознаке коришћене на слици 3.14). За троугаону

гредну решетку са шестоугаоном јединичном ћелијом и униформно задатим дужинама полугреда  $L^{(b)}$  (слика 3.14), деформациона енергија јединичне ћелије је

$$U_{cell} = \frac{1}{2} \sum_{b=1}^6 [F^{(b)} \gamma^{(b)} + Q^{(b)} \tilde{\gamma}^{(b)} + M^{(b)} \kappa^{(b)}] L^{(b)} \quad (3.44)$$

Деформациона енергија еквивалентног микрополарног континуума је

$$U_{continuum} = \frac{1}{2} (\gamma_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \gamma_{\gamma\delta} + \kappa_{\alpha} D_{\alpha\beta} \kappa_{\beta}) V \quad (3.45)$$

где  $V = (\sqrt{3}/2)L^2t$  означава запремину континуума који одговара јединичној ћелији (слика 3.14б), где је  $t$  дебелина (коју, у општем случају, треба разликовати од дебелине полугреде  $t^{(b)}$  управне на раван решетке, приказне на слици 3.14б).

Услов еквивалентности (3.1) деформационих енергија, (3.44) и (3.45), доводи до следећих израза

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_{b=1}^6 n_{\alpha}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} [n_{\beta}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} R^{(b)} + \tilde{n}_{\beta}^{(b)} \tilde{n}_{\delta}^{(b)} \tilde{R}^{(b)}], \quad D_{\alpha\beta} = \sum_{b=1}^6 n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} S^{(b)} \quad (3.46)$$

где су

$$R^{(b)} = \frac{E^{(b)} A^{(b)}}{Lt\sqrt{3}}, \quad \tilde{R}^{(b)} = \frac{12E^{(b)} I^{(b)}}{L^3 t \sqrt{3}}, \quad S^{(b)} = \frac{E^{(b)} I^{(b)}}{Lt\sqrt{3}} \quad (3.47)$$

Уведене скраћенице (3.47) прате нотацију коју су користили Карихалу и сарадници (Karihaloo et al., 2003). Остоја-Старжевски (2002, 2007) је користио идентичну нотацију али са дуплираним вредностима у односу на (3.47). Вредности компонената тензора еластичности и еластичних константи које следе (3.49-3.51) су, наравно, идентичне.

Позивајући се на особине јединичне ћелије

$$\begin{aligned} \theta^{(b)} &= (b-1)\pi/3, \quad \mathbf{n}^{(b)} = (n_1^{(b)}, n_2^{(b)}) = (\cos \theta^{(b)}, \sin \theta^{(b)}), \\ \tilde{\mathbf{n}}^{(b)} &= (\tilde{n}_1^{(b)}, \tilde{n}_2^{(b)}) = (-\sin \theta^{(b)}, \cos \theta^{(b)}) \quad b = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \end{aligned} \quad (3.48)$$

уз претпоставку идентичности греда ( $R^{(b)} = R, \dots$ ), компоненте еластичности које су различите од нуле добијају се у следећем облику

$$C_{1111} = C_{2222} = \frac{3}{4} R \left( 3 + \frac{\tilde{R}}{R} \right), \quad C_{1122} = C_{2211} = \frac{3}{4} R \left( 1 - \frac{\tilde{R}}{R} \right), \quad C_{1212} = \frac{3}{4} R \left( 1 + 3 \frac{\tilde{R}}{R} \right),$$

$$C_{1221} = C_{2112} = \frac{3}{4}R \left(1 - \frac{\tilde{R}}{R}\right), \quad C_{2121} = \frac{3}{4}R \left(1 + 3\frac{\tilde{R}}{R}\right), \quad D_{11} = D_{22} = 2S \quad (3.49)$$

Према томе, троугаона Бернули-Ојлерова гредна решетка представља изотропни микрополарни континуум.

Одговарајући ефективни модул компресије и Ламеови коефицијенти су

$$\begin{aligned} \mu' &= \frac{3}{4}R \left(1 + \frac{\tilde{R}}{R}\right) = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} (1 + \bar{h}^2) E^{(b)}, & \lambda' &= \frac{3}{4}R \left(1 - \frac{\tilde{R}}{R}\right) = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} (1 - \bar{h}^2) E^{(b)}, \\ K' &= \frac{3}{2}R = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} E^{(b)}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

а модул еластичности и Поасонов коефицијент

$$E' = 6R \left( \frac{1 + \tilde{R}/R}{3 + \tilde{R}/R} \right) = 2\sqrt{3} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} \left( \frac{1 + \bar{h}^2}{3 + \bar{h}^2} \right) E^{(b)}, \quad \nu' = \frac{1 - \tilde{R}/R}{3 + \tilde{R}/R} = \frac{1 - \bar{h}^2}{3 + \bar{h}^2} \quad (3.51)$$

У изразима (3.50) и (3.51), ширина греде нормализована са њеном дужином (слика 3.14),  $\bar{h} = h^{(b)}/L^{(b)} = h^{(b)}/L$ , представља геометријски параметар једнак реципрочной вредности виткости гредног елемента. Имајући у виду уведенe ознаке (3.47) и изразе за геометријске особине попречног пресека греде, лако је показати да је  $\tilde{R}/R = \bar{h}^2$  што указује да је  $\bar{h}$  показатељ утицајности савијања смичућим силама. За витке греде савијање смичућим силама губи на важности и вредност Поасоновог коефицијента (3.51<sub>2</sub>) се приближава горњој међи 1/3. Имајући у виду претпоставку о виткости греда, својствену Бернули-Ојлеровој формулацији, доња међа Поасоновог коефицијента је  $\approx 0.2$  (Karihaloo et al., 2003).

### 3.3.2 Квадратна Бернули-Ојлерова гредна решетка

За Бернули-Ојлерову решетку са квадратном јединичном ћелијом (слика 3.14а) из једнакости деформационих енергија јединичне ћелије и одговарајућег континуума произилазе следећи изрази

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_{b=1}^4 n_{\alpha}^{(b)} n_{\gamma}^{(b)} \left[ n_{\beta}^{(b)} n_{\delta}^{(b)} R^{(b)} + \tilde{n}_{\beta}^{(b)} \tilde{n}_{\delta}^{(b)} \tilde{R}^{(b)} \right], \quad D_{\alpha\beta} = \sum_{b=1}^4 n_{\alpha}^{(b)} n_{\beta}^{(b)} S^{(b)} \quad (3.53)$$

где

$$R^{(b)} = \frac{E^{(b)} A^{(b)}}{2Lt}, \quad \tilde{R}^{(b)} = \frac{E^{(b)} I^{(b)}}{L^3 t}, \quad S^{(b)} = \frac{E^{(b)} I^{(b)}}{2Lt} \quad (3.54)$$

Имајући у виду особине јединичне ћелије

$$\begin{aligned} \theta^{(b)} &= (b-1)\pi/4, \quad \mathbf{n}^{(b)} = (n_1^{(b)}, n_2^{(b)}) = (\cos \theta^{(b)}, \sin \theta^{(b)}), \\ \tilde{\mathbf{n}}^{(b)} &= (\tilde{n}_1^{(b)}, \tilde{n}_2^{(b)}) = (-\sin \theta^{(b)}, \cos \theta^{(b)}) \quad b = 1, 2, 3, 4 \end{aligned} \quad (3.55)$$

могу се израчунати компоненте тензора еластичности које су различите од нуле

$$C_{1111} = C_{2222} = 2R, \quad C_{1212} = 2\tilde{R}, \quad D_{11} = D_{22} = 2S \quad (3.56)$$

Сходно томе, квадратна Бернули-Ојлерова гредна решетка представља ортотропни микрополарни континуум неподесан за моделирање изотропног континуума (Ostoja-Starzewski, 2002).

### 3.3.3 Троугаона Тимошенкова гредна решетка

За разлику од Бернули-Ојлерове, Тимошенкова теорија савијања греда узима у обзир и утицај смичуће силе те је стога опсег њене примене проширен и на греде мање виткости. Приликом стварне деформације греде, попречни пресеци (наравно, у зависности од материјала, више или мање) нити остају равни нити управни на неутралну линију. Тимошенко је задржао претпоставку о равном пресеку али је увео угаону деформацију као последицу смицања те попречни пресек није више управан на неутралну линију. Тимошенкова теорија греда подразумева следеће релације

$$F^{(b)} = E^{(b)} A^{(b)} \gamma^{(b)}, \quad Q^{(b)} = \frac{12E^{(b)} I^{(b)}}{(1 + \zeta_T)(L^{(b)})^3} L^{(b)} \tilde{\gamma}^{(b)}, \quad M^{(b)} = E^{(b)} I^{(b)} \kappa^{(b)} \quad (3.57)$$

између оптерећења на попречном пресеку греде и одговарајућих деформација. Треба обратити пажњу да се у једначини (3.57) попречна (смичућа) сила  $Q^{(b)}$  и одговарајуће померање  $L^{(b)}\tilde{\gamma}^{(b)}$  разликују од Бернули-Ојлерове формулације, док су односи подужне силе и померања и момената и одговарајућих углова обртања идентични. У једначини (3.57<sub>2</sub>)

$$\zeta_T = \frac{12E^{(b)}I^{(b)}}{G^{(b)}A^{(b)}(L^{(b)})^2} = \frac{E^{(b)}}{G^{(b)}}\bar{h}^2 \quad (3.58)$$

представља бездимензиони параметар у Тимошенкој теорији греда дефинисан количником крутости на савијање и крутости на смицање. У изразу (3.58) коришћене су раније дефинисане геометријске особине попречног пресека греде одакле следи  $\bar{h} = h^{(b)}/L^{(b)}$  где је  $h^{(b)}$  ширина греде (слика 3.14б). Када је крутост на смицање доминантна,  $\zeta_T \rightarrow 0$ , угибање услед смицања је релативно мало и добијају се изрази за витку Бернули-Ојлерову греду. Насупрот томе, при малој крутости на смицање,  $\zeta_T > 1$ , угибање услед смицања доминира и неопходно је коришћење Тимошенкове теорије.

Из једнакости двају деформационих енергија (3.1) проистичу идентични изрази као за Бернули-Ојлерову греду

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_{b=1}^6 n_\alpha^{(b)} n_\gamma^{(b)} [n_\beta^{(b)} n_\delta^{(b)} R^{(b)} + \tilde{n}_\beta^{(b)} \tilde{n}_\delta^{(b)} \tilde{R}^{(b)}], \quad D_{\alpha\beta} = \sum_{b=1}^6 n_\alpha^{(b)} n_\beta^{(b)} S^{(b)} \quad (3.59)$$

с тим што су

$$R^{(b)} = \frac{E^{(b)}A^{(b)}}{Lt\sqrt{3}}, \quad \tilde{R}^{(b)} = \frac{12E^{(b)}I^{(b)}}{L^3t\sqrt{3}} \frac{1}{(1+\zeta_T)}, \quad S^{(b)} = \frac{E^{(b)}I^{(b)}}{Lt\sqrt{3}} \quad (3.60)$$

За случај када све греде јединичне ћелије имају исте димензије (дужину  $L^{(b)}$  и правоугаони попречни пресек  $h^{(b)} \times t^{(b)}$ ) добијају се следећи изрази за компоненте тензора еластичности различите од нуле

$$C_{1111} = C_{2222} = \frac{3}{4}R \left( 3 + \frac{\tilde{R}}{R} \right), \quad C_{1212} = \frac{3}{4}R \left( 1 + 3\frac{\tilde{R}}{R} \right), \quad C_{1122} = C_{2211} = \frac{3}{4}R \left( 1 - \frac{\tilde{R}}{R} \right), \quad (3.61)$$

$$C_{1221} = C_{2112} = \frac{3}{4}R \left( 1 - \frac{\tilde{R}}{R} \right), \quad C_{2121} = \frac{3}{4}R \left( 1 + 3\frac{\tilde{R}}{R} \right), \quad D_{11} = D_{22} = 2S$$

где је



$$\frac{\tilde{R}}{R} = \frac{12 I^{(b)}}{(L^{(b)})^2 A^{(b)}} \frac{1}{(1 + \zeta_T)} = \left( \frac{h^{(b)}}{L^{(b)}} \right)^2 \frac{1}{1 + \zeta_T} = \frac{\bar{h}^2}{1 + \zeta_T} \quad (3.62)$$

Ламеове константе и модул компресије добијају се у следећем облику

$$\begin{aligned} \mu' &= \frac{3}{4} R \left( 1 + \frac{\tilde{R}}{R} \right) = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} \left( 1 + \frac{\bar{h}}{1 + \zeta_T} \right) E^{(b)}, & \lambda' &= \frac{3}{4} R \left( 1 - \frac{\tilde{R}}{R} \right) = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} \left( 1 - \frac{\bar{h}}{1 + \zeta_T} \right) E^{(b)}, \\ K' &= \frac{3}{2} R = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} E^{(b)}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

а модул еластичности и Поасонов коефицијент

$$E' = 2\sqrt{3} \frac{t^{(b)}}{t} \bar{h} \left( \frac{1 + \frac{\bar{h}^2}{1 + \zeta_T}}{3 + \frac{\bar{h}^2}{1 + \zeta_T}} \right) E^{(b)}, \quad \nu' = \frac{1 - \frac{\bar{h}^2}{1 + \zeta_T}}{3 + \frac{\bar{h}^2}{1 + \zeta_T}}. \quad (3.64)$$

Рачунски пример коришћења израза (3.64) дат је у поглављу 3.3.5 приликом разматрања генералисане гредне решетке (Liu et al., 2008).

### 3.3.4 Процедура рачунарске имплементације за гредне решетке

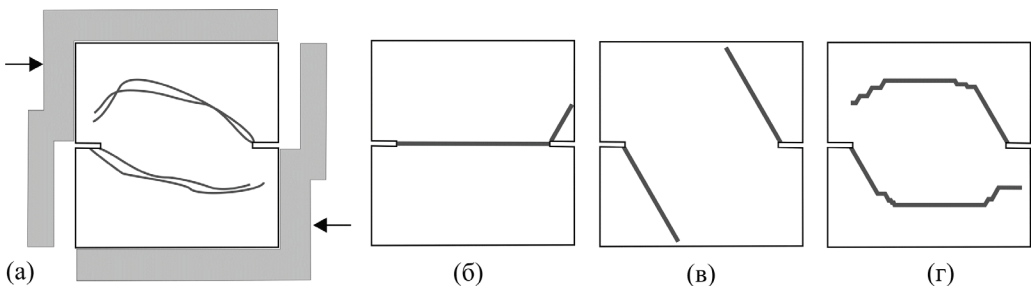
Бернули-Ојлерове греде које преносе подужне и попречне силе и моменте често се користе у моделима гредних решетки за симулацију процеса оштећења и лома бетонских контрукција (Schlangen and van Mier, 1992b; Schlangen and Garboczi, 1997; Lilliu and van Mier, 2003). Процес лома се симулира извођењем линеарно-еластичне анализе за задато оптерећење уз уклањање из мреже оних гредних елемената који задовоље прописани критеријум лома. Подужне и попречне силе и momenti израчунавају се коришћењем конвенционалне теорије греда. Глобална матрица еластичности оформи се за целу решетку, израчуна се одговарајућа инверзна матрица која се затим помножи са вектором оптерећења како би се добио вектор померања. Хетерогеност структуре материјала може се узети у обзир на различите начине: (i) задавањем различитих затезних чврстоћа гредним елементима (коришћењем, нпр., нормалне или Вејбулове расподеле), (ii) претпостављањем насумичне (стохастичке) расподеле димензија попречних пресека и/или дужина гредних елемената, или (iii) пресликавањем (мапирањем) на гредне елементе различитих особина материјала (агрегата, везивне цементне испуне, међуповрши,...). Највећи проблеми се срећу при моделирању међуповрши чија је затезна

чврстоћа, по правилу, за ред величина нижа него код друге две фазе. За добијање мапе расподеле агрегата у оквиру мреже (гредне решетке) често се користи Фулерова крива (Fuller) расподеле кристалних зрна. Количник висине и дужине греде дефинише Поасонов коефицијент. Дужина гредних елемената за бетон треба да испуњава услов  $l^b < d_{min}$  (где је  $d_{min}$  минимални пречник агрегата). Оваквим моделирањем могуће је репродуковати веома сложене обрасце распрострања оштећења. Модел је у стању да идентификује развој микропрслина, гранање прслина, завојитост прслина, међусобно „премошћавање” (срастање, “bridging”) прслина, из чега проистиче комплетна слика макроскопског оштећења и лома. Модел такође омогућава да се „ухвати” ефекат величине узорка (нпр., при затезном оптерећењу види Vidya Sagar, 2004). Предности оваквог приступа су једноставност и непосредан увид у процес лома на нивоу микроструктуре. Коришћење еластичног-идеално кртог модела за локални закон лома на нивоу честице омогућава учачавање глобалног омекшавања материјала. Недостаци конвенционалног модела гредне решетке су следећи: (i) резултати су осетљиви на величину гредних елемената и правац наношења оптерећења, (ii) одзив материјала је претерано крт (због усвојене кртости појединачних гредних елемената), (iii) гредни елементи у зони притиска могу да се преклапају, и (iv) изузетан рачунарски напор је неопходан на структурном нивоу. Први од наведених недостатака може да се отклони претпостављањем хетерогене структуре (неправилне геометрије, Schlangen and Garboczi, 1997). Други може бити умањен 3Д моделирањем, коришћењем веома малих честица (Lilliu and van Mier, 2003), као и коришћењем нелокалног приступа при израчунавању деформација гредних елемената (Schlangen and Garboczi, 1997).

Уопште узев, Тимошенкова греда је исправнија за коришћење од Бернули-Ојлерове греде, поготово када линијски носећи елементи у решетки нису изразито витки (Karihaloo et al., 2003; Lilliu and Van Mier, 2003). У циљу директног укључивања зоне међуповрши у модел, резолуција мреже (тј. распон греда) мора да буде ограничен на исти ред величине као дебљина међуграничне површи. Као последица те неопходности долази до практичних потешкоћа и изузетно великих рачунских напора. Овај проблем је довео до развоја алтернативних решеткастих модела заснованих на генералисаним гредама (Liu and co-workers, 2007, 2008) који ће бити разматрани при крају следећег поглавља.

### 3.3.5 Хронологија развоја и примери примене метода гредних решетки

*Шланген и Гарбоци* (Schlangen and Garboczi, 1996, 1997) извршили су важну, и касније веома утицајну, упоредну анализу симулационих техника коришћењем решетки за рачунарско моделирање хетерогених материјала са стохастичком структуром. Екпериментални образци распрострањања прлина добијени коришћењем бетонског узорка са обостраном ивичном прслином оптерећеног на смицање упоређени су са онима добијеним рачунарским симулацијама коришћењем решеткастих модела са различитим типовима међудејстава (описаних у поглављима 3.1, 3.2, и 3.3) и просторним оријентацијама решетке. Прва група резултата представљена је на слици 3.15.



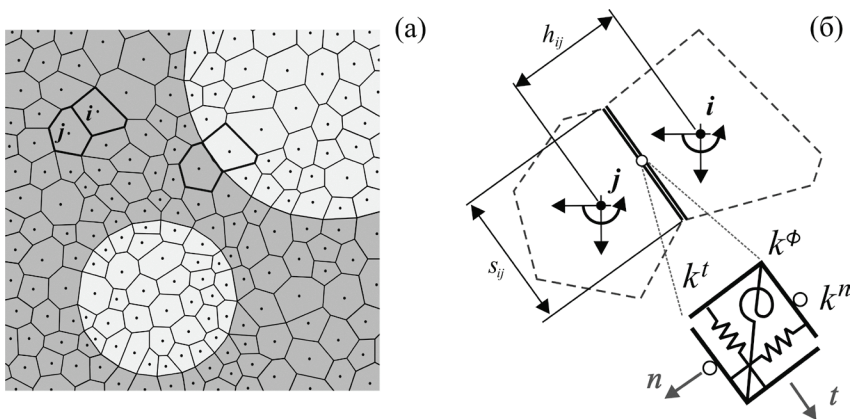
**Слика 3.15.** Шематска илустрација: (а) геометрије експерименталне поставке Нуру-Мохамедовог теста оптерећења на смицање узорка са двоструким ивичним зарезима ("DENS – double-edge-notched specimen") и одговарајућих образаца распрострањања прлина у бетонској плочи. Образци распрострањања прлина добијени су рачунским симулацијама коришћењем геометријски уређене троугаоне решетке са: (б) централном интеракцијом (поглавље 3.1), (в) централно-угаоном интеракцијом (поглавље 3.2), и (г) гредном интеракцијом (поглавље 3.3). (Репродуковано на основу података у референци Schlangen and Garboczi, 1996).

Важно је запазити да геометријска неуређеност (хетерогеност) није коришћена у овим решеткастим моделима како би била наглашена способност одређеног *мина* структурног елемента решетке да опише континуални лом. С обзиром на слику 3.15, очигледно је да су гредни елементи (г) — у одсуству геометријске неуређености — супериорни у репродукцији експериментално опажених комплексних образаца прлина у односу на две друге мрежне интеракције. Без обзира на то, уочљиво је да облик прлина чак и у том случају (слика 3.15г) открива предодређеност мреже која је неизбежна код геометријски уређених мрежа. Поређење образаца прлина добијених рачунарским симулацијама коришћењем четири хомогене решетке засноване на квадратној мрежи, две различито оријентисане троугаоне мреже, и неправилне троугаоне мреже, показало је очекивану супериорност последњег типа да репродукује облике

прслина. Ови резултати, као и ранији Јирасека и Бажанта (Jirásek and Bažant, 1995), документују важност геометријске неуређености мреже за реалистичну симулацију распрострањања прслина. Међутим, геометријски неправилне решетке, уопштено узев, нису се понашале хомогено под једноосним оптерећењем (Jagota and Bennison, 1994). Шланген и Гарбоши (Schlangen and Garboczi, 1996) су предложили приступ заснован на итеративном подешавању особина елемената решетке у циљу добијања еластично униформне неправилне мреже. Међутим, изразили су очекивање да би у случају проблема карактерисаних са природном насумичношћу материјала директно имплементираним у решетки, геометријски правилна решетка требало да репродукује сличне обрасце распрострањања прслина уколико је дужина структурног елемента решетке мала у поређењу са скалом текстуре материјала на доминантној просторној скали.

Шланген и Гарбоши су такође истраживали и ефекат резолуције решетке (број греда по јединици дужине). Дошли су до закључка да док обрасци распрострањања прслина не зависе изразито од величине греда, крива зависности отварања прслина од оптерећења зависи, и то на скоро исти начин као што повећавање густине мреже утиче на локалне моделе омекшавања деформације: што је финија решетка, мање је нееластично померање и енергија дисипације (Cusatis et al., 2003a). Предложен је и оригиналан закон киданја који користи максимални напон на затезање у сваком *чвору* — уместо у свакој греди — ради решавања проблема утицаја оријентисаности мреже на напон лома решетке. Напони у чворовима се одређују на основу доприноса подужних и попречних (смичућих) сила свих чворовима-припадајућих линијских носача а затим се користи за одређивање равни максималне нормалне силе и одговарајућих пројекција попречних пресека греда. Ефективни чворни напон се онда израчунава као количник овако одређене нормалне силе и одговарајуће пројектоване површине па се онда користи за дефинисање критеријума лома појединачних греда решетке. У истој студији (Schlangen and Garboczi, 1997) развијена је и методологија директног имплементирања хетерогености материјала коришћењем резултата добијених анализирањем микроструктуре помоћу електронских микроскопа и дигиталним обрадама слике у циљу мапирања различитих особина елемената решетке. Независно генерисање решеткасте и честичне структуре отвара могућност коришћења агрегата реалистичних облика. Гредна решетка на којој је примењена наведена методологија подвргнута је неколицини основних конфигурација оптерећења и добијене су веома реалистичне репродукције образаца распрострањања прслина.

*Боландер и сарадници* (Bolander and Saito, 1998; Yip et al., 2006; Bolander et al., 2000, 2008) су остварили значајан напредак развијањем еластично-хомогене, геометријски-неправилне решетке како би се носили са предодређеношћу распрострањања прлина узрокованог нискоенергетским правцима закона кидања елемената правилне решетке (о којима је раније било речи). Формулисани неуређени, стохастички модел решетке са преносом смицања између зрна, у коме се геометрија решетке добија помоћу Воронојеве тесалације (“Voronoi tessellation”), показао се као изузетан за симулацију пуцања целих структура. Конкретно, линијски носећи елементи решетке су дефинисани на основу Деланејеве мреже скупа тачака неправилно распоређене у границама материјалног домена (слика 3.16а). Дуални Воронојев мозаик користи се за скалирање чврстоћа елемената на начин којим се постиже да решеткасти модел буде еластично хомоген. Овај решеткасти модел насумичне геометрије може да се замисли као агломерат крутих, многоугаоних честица (зрна) међусобно повезаних флексибилном међуграничном површи дуж њихових ивица (слика 3.16б) за потребе разумевања преноса оптерећења на микроскали; међутим, ово није ДЕМ са елементарним носећим ћелијама исте Еуклидске димензионалности као проблем (поглавље 4) него решетка састављена од линеарних носача. Модел је инспирисан мрежом крутих тела повезаних опругама коју је претходно развио Каваи (Kawai, 1978). Флексибилна међуповрш, моделирана скупом дискретних опруга позиционираних дуж средине сваког граничног сегмента, илустрована је сликом 3.16б.



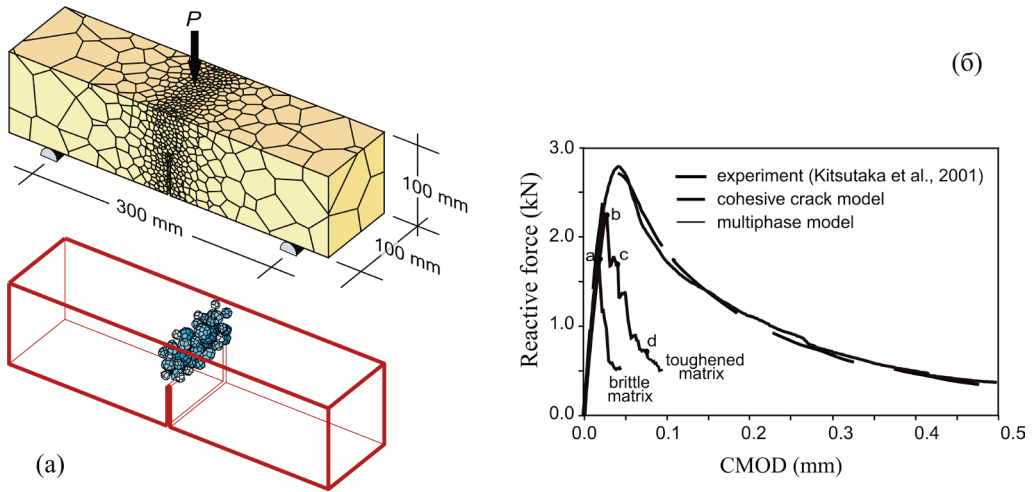
**Слика 3.16.** (а) Вишефазни материјал дискретизован Воронојевим мозаиком (дуалним неправилној троугаоној Деланејевеј мрежи) и одговарајући скуп чворова, (б) две суседне круте многоугаоне честице повезане флексибилном међуповрши.

Флексибилна међуповрш се састоји од нормалне, тангенцијалне и угаоне опруге са одговарајућим константама крутости  $k^n$ ,  $k^t$  и  $k^\phi$  (слика 3.16б) којима се апроксимирају еластичне особине униформног континуума

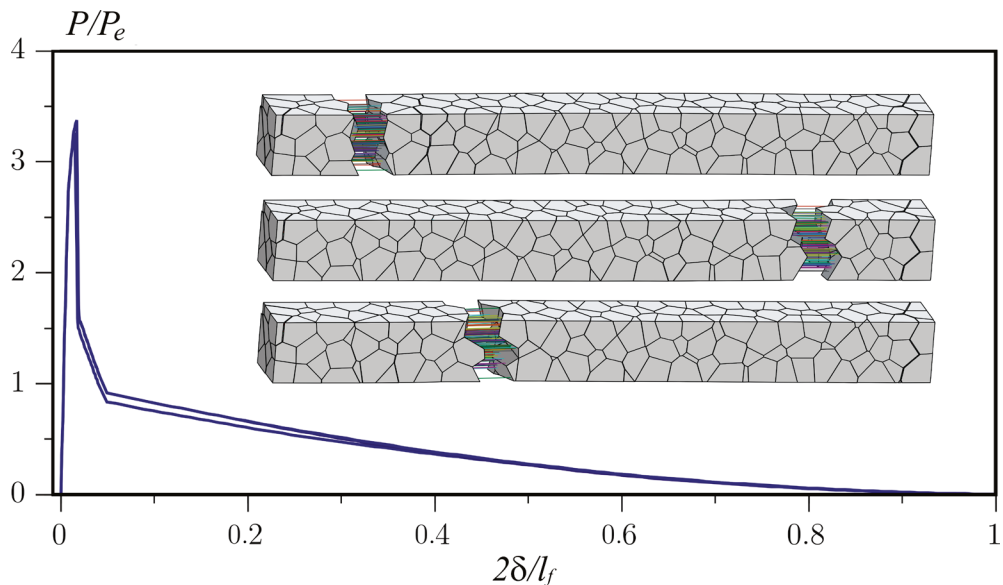
$$k^n = \frac{E' A_{ij}}{h_{ij}}, \quad k^t = k^n, \quad k^\phi = \frac{s_{ij}^2}{12} k^n \quad (3.65)$$

при чему  $A_{ij} = s_{ij} t$ , где је  $t$  дебљина раванског модела, а  $E'$  је модул еластичности материјала. Додељивање константи опруга (3.65) је једнозначно дефинисано Воронојевим дијаграмом како би био осигуран униформни, еластични одзив решетке пошто су површине попречних пресека греда скалиране пропорционално дужини заједничког граничног сегмента. Важно је да се уочи да је за то неопходно да константе нормалних и тангенцијалних опруга буду једнаке,  $k^t = k^n$  (Bolander and Sukumar, 2005), што доводи до нереалистичног Поасоновог ефекта. Еластична формулација модела и технике генерисања мреже детаљно су изложени у оригиналним радовима као и неколико различитих модела лома. Коришћење модела лома заснованог на Бажантовом приступу „траке прслина” (“crack-band approach”; нпр. Bažant and Oh, 1983) подразумева поступно (инкрементално) омекшавање елемената решетке у складу са унапред дефинисаним сила-померање правилом. Захваљујући томе, кидање елемената решетке је постепено и дефинисано правилима која обезбеђују репрезентацију лома неправилне решетке у условима одржања енергије, што није случај са конвенционалним приступом коришћења решетке. Овај модел лома је објективан са становишта неправилне геометрије решетке: енергија лома утрошена на раст прслине дуж неке путање је независна од геометрије мреже (Bolander and Sukumar, 2005).

Неправилни решеткасти модел Боладера и сарадника демонстрирао је способност веома реалистичне репродукције изузетно сложених образаца прслина. Распрострањено прскање изазвано савијањем, зачеће прслина у мешовитом моду у случају плоче са двостраним зарезом (Blander and Saito, 1998), зачеће прслина у носачу моста за различите случајеве оптерећења (Bolander et al., 2000), простирање прслина у тесту савијања у три тачке (Bolander and Sukumar, 2005), неки су од примера успешних примена овог приступа моделирању. Решеткасти модел Боландера и сарадника је касније развијен и за просторне проблеме као што се види из изабраних образаца прслина представљених сликама 3.17 и 3.18. На тим сликама илустрована је способност модела да симулира одзив вишефазног материјала (попут бетона или композита) у осетљивим симулацијама лома који се одликују сложеним обрасцима распрострањања прслина.



**Слика 3.17.** Симулација експеримента савијања у три тачке узорка са зарезом. (а) Нумерички модел узорка са неправилном мрежом на коме треба уочити расподелу агрегата изнад зареза (доле), и (б) експериментално и рачунским симулацијама добијене криве сила-померање услед отварања прелине (CMOD). (Преузето из Yip et al. (2006) са допуштењем издавача. Copyright (2006) by Springer). Поређење 2Д нумеричких симулација лома у тесту савијања у три тачке са експерименталним резултатима може да се нађе у (Bolander and Sukumar, 2005).



**Слика 3.18.** (а) Симулација теста затезања ( $P$ - $\delta$ ) илуструје премештавања прелине од стране влакана композита. Уочити Воронојева дискретизацију призматичног узорка. (Преузето из Bolander et al. (2008) са допуштењем издавача. Copyright (2008) by Springer).

Основна градивна ћелија у овој модификацији модела је елемент круто тело–опруга (Kawai, 1978) који може да се раскида у складу са једноставним критеријумима. Главна карактеристика модела је употреба Воронојевих дијаграма за дефинисање структуре решетке (слике 3.17а и 3.18) и додељивање еластичних особина и граница лома. Због немогућности детаљнијег приказа овде се наглашавају само два приступа која су у изворној референци (Yip et al., 2006) представљена за моделирање лома у решетки: (i) модел кохезивне прслине (заснован на макроскопском појму омекшавања који даје мало информација о механизмима који управљају процесима лома), и (ii) модел кртог лома (заснован на експлицитном моделирању кртог понашања у свим трима фазама хетерогеног материјала), са нагласком на последњи. Ограничено квантитативно слагање са експерименталним резултатима (слика 3.17б), аутори су приписали прегрубој дискретизацији.

Исти модел коришћен је и за композитне материјале са случајно распоређеним кратким влакнима (Bolander et al., 2008; слика 3.18). Кратка влакна се распоређују у узорку коришћењем генератора псеудо-случајних бројева не водећи рачуна о геометрији решетке која представља матрицу композита. Детаљи модела превазилазе опсег овога прегледа али се наглашава да модел пружа експлицитну репрезентацију сваког влакна и пре и после лома матрице (слика 3.18) са нагласком на допринос влакана укупној крутости композита током целог процеса оптерећења.

*Ван Мир и коаутори* (Van Mier et al., 2002) истраживали су ефекат микро-структурне стохастичности материјала на одзив сила-померање и обрасце распростирања прслина у условима једноосног затезања. Користили су правилну троугаону решетку састављену од Бернули-Ојлерових греда (поглавље 3.3.1) и метод преклапања честица како би имитирали геометрију трофазног бетона у циљу процене ефекта на тај композитни материјал контраста чврстоће и крутости. Метод преклапања изгледа да се показао веома успешним у погледу реалистичне репродукције сложених образаца прслина. Прогресивна акумулација оштећења симулирана је сукцесивним уклањањем гредних елемената у којима је задовољен критеријум лома дефинисан на основу затезне чврстоће

$$\sigma_{eff}^{(b)} = \frac{F^{(b)}}{A^{(b)}} \pm \zeta_{vM} \frac{\left( |M_i^{(b)}|, |M_j^{(b)}| \right)_{\max}}{W^{(b)}} = f_{cr} \quad (3.66)$$

У претходном изразу  $F^{(b)}$  је нормална сила у посматраној греди,  $M^{(b)}$  су моменти савијања у чворовима гредних елемената, а  $A^{(b)}$  и  $W^{(b)}$  су, редом, површина и отпорни момент попречног пресека греде. Множитељ  $\zeta_{vM}$  (изабран у наведеној студији да има вредност 0.05) је параметар *подешавања* који регулише који део момента савијања се разматра (како би ефективно одговарао експерименталном одзиву). Ово подразумева ослобађање пакета енергије



$E_e^{(b)} = f_{cr}^2/2E$  приликом раскидања сваке везе ( $b$ ), што подсећа на дисипациону енергију која се мери приликом осматрања акустичне емисије. Три различите затезне чврстоће су додељене свакој од фаза материјала (агрегат, матрица и међугранична површ) и њихови релативни односи утичу на резултате симулација.

Резултати рачунарских симулација упоређени су са исходима симулација у којима је ефекат микроструктуре имитиран додељивањем насумичних вредности затезне чврстоће гредима правилне троугаоне решетке коришћењем Вејбулове или нормалне расподеле. Резултати указују да је контраст између чврстоћа имао израженији ефекат него контраст између кртости фаза када је реч о максималној глобалној сили, као и да је за понашање на макроскопској скали од доминантног утицаја перколација оштећења преко најслабије фазе композитног материјала. Чврстоћа међуповрши агрегат-везивна матрица и степен повезаности елемената који припадају тој фази показали су се као одлучујући фактор утицаја на макро чврстоћу у условима једноосног затезања. Резултати различитих симулација у условима коришћења различитих Вејбулових расподела подсећају у извесној мери на модове лома опажене у реалистичнијим трофазним преклапањима честица (поготово истакнута појава премошћивања). С друге стране, тачно распрострањање прелина није могло да буде постигнуто коришћењем нормалне расподеле. Модови лома код симулација коришћењем нормалне расподеле нису слични стварним појавним облицима лома опаженим у експериментима са бетоном, без обзира на чињеницу да је могуће — избором различитих параметара расподеле — постићи велику разноврсност када је реч о кривама сила-померање. У закључку, аутори не препоручују коришћење статистичких расподела чврстоћа приликом симулација бетона. Такође скрећу пажњу да криве сила-померање не могу да се користе као једини показатељ приликом процене тачности модела понашања хетерогених материјала у условима лома. Механизми раста прелина и последични обрасци распрострањања прелина представљају истакнуте елементе таквих процена. Ван Мир и коаутори обавили су обиман рад како би развили решеткасти гредни модел за проучавање процеса лома у бетону у затезном моду. Међутим, њихов модел, као и многи слични (Donzé et al., 2008), пати од ограничења приликом проучавања бетона у режиму притиска због тога што не постоји могућност стварања нових локалних граница током процеса деформације. Модел стешњено-смичуће гредне решетке (Cusatis et al., 2003a, 2006) превазилази неке од наведених проблема унапређивањем уобичајене формулације случајне конфигурације грубих агрегата увођењем низа *конститутивних закона* (између агрегата) *на мезоскали* који, према ауторима, узимају у обзир ефекат финије подструктуре. Захваљујући овом значајном

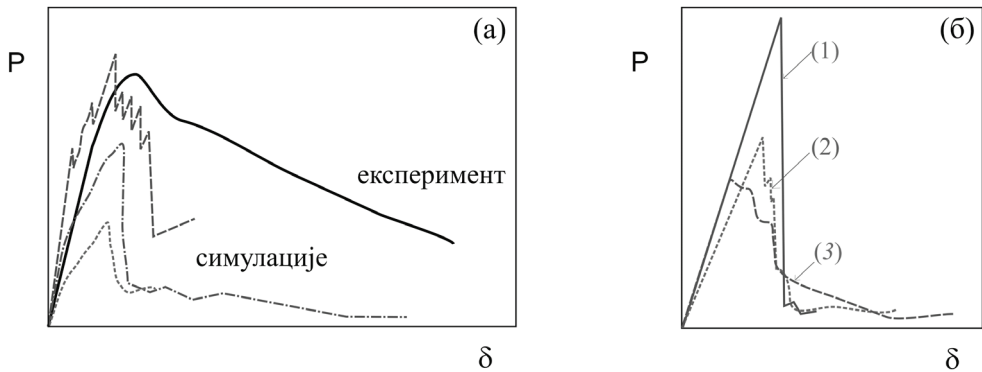
усложњавању концепта моделирања (односно, повећању броја параметара за подешавање), добијени модел је био у стању да симулира нееластично троосно понашање, границе чврстоће и посткритични одзив и за затезање и за притисак, и широк опсег експерименталних података за бетон (укључујући Поасонов коефицијент, однос затезне и притисне чврстоће, обвојницу лома, одзив при хидростатичком притиску,...; Cusatis et al., 2003b, 2006). Уважавајући импресивна достигнућа овог значајног модела, треба истаћи да су модели са довољним бројем (подешавајућих) параметара у принципу у стању да репродукују било какво понашање; међутим, од критичне је важности да сви параметри модела могу да се одреде (*apriori*) коришћењем независних, стандардних лабораторијских експеримента (којих нема много!).

*Карихалу и коаутори* (Arslan et al., 2002; Karihaloo et al., 2003; Ince et al., 2003) су на неколико начина модификовали правилну троугаону гредну решетку са циљем моделирања лома у честичним композитима. Прво, конститутивни модел агрегатне фазе је остао еластичан–идеално крт али је омогућено омекшавање приликом затезања гредних елемената који припадају везивној матрици и међуповрши коришћењем Бажантовог билинеарног конститутивног модела (напон-релативна деформација) представљеног у поглављу 3.1.3 (слика 3.3б)<sup>9</sup>. Друго, усвојена је Тимошенкова формулација греде (поглавље 3.3.3) у циљу побољшавања тачности међучестичних дејстава услед постојања веома кратких, “здепастих” гредних елемената. Коначно, примењен је симулациони приступ заснован на контролисаном померању и коначним деформацијама у покушају да се репродукују велике деформације и ротације до којих долази приликом еволуције оштећења. Ове измене уведене су са намером да се реши основни недостатак гредних елемената приликом моделирања бетона у то време а то је била тенденција криве оптерећење–деформација да значајно одудара од експериментално опаженог одзива без обзира на веома верно репродуковане

---

<sup>9</sup> Увођење омекшавања у овоме моделу било је критиковано са становишта да омекшавање није унутрашња особина материјала него комбинација материјалних и структуралних својстава из које је веома тешко разлучити само прва (Van Mier, 2004). Ван Мир је нагласио да главна привлачност модела решетки лежи у чињеници да се веома сложени макроскопски одзиви добијају као кумулативни ефекат једноставне механике еластичних–идеално кртих линијских (1Д) структурних елемената. Противно се увођењу омекшавања у конститутивне релације било које поједине фазе хетерогеног материјала истичући, између осталог, да је апсолутно нејасно који нагиб  $\sigma$ – $\varepsilon$  криве ( $E_s$  на слици 3.3б) везивне матрице у режиму омекшавања треба да буде изабран. Карихалу је у свом одговору (Karihaloo, 2004) остао при томе да увођење билинеарне  $\sigma$ – $\varepsilon$  криве за везивну матрицу представља унапређење модела неопходно зарад верније репродукције макроскопског одзива хетерогеног материјала у смислу смањења кртости (слика 3.19б).

обрасце распрострања прлина. Конкретно, нумерички симулирани одзив био је превише испрекидан (неконтинуалан, искрзан) и претерано крт као што је илустровано сликом 3.19а. У циљу решавања ових отворених питања, Лилиу и ван Мир (Lilliu and van Mier, 2003) су развили просторну решетку за моделирање лома у бетону што је довело до значајног повећања рачунарских оптерећења чак и за релативно мале узорке са израженим граничним ефектима али су *задржали* еластични–идеално крт конститутивни модел за све фазе. Вратили су се и једноставном критеријуму кидања везе заснованом на нормалној сили ( $3.24_1$ ) како би избегли увођење параметара који немају стварну физичку основу. И поред одређених побољшања, модел Лилиуа и ван Мира и даље није био у стању да симулира истовремено затезни лом, једноосни и двоосни притисни лом и превише круто понашање при хидростатичком притиску (Cusatis et al., 2006).



**Слика 3.19.** Шематске илустрације: (а) експериментално и нумерички добијених кривих сила–померање за три различите величине греда оптерећених на смицање у четири тачке (инспирисано резултатима у референци Schlangen and van Mier (1992b)). Када је решеткасти модел рафиниран до те мере да може да узме у обзир и ситније агрегате макро одзив постаје глаткији и релативна дуктилност се нешто поправља. Због ограничених рачунарских могућности почетком 90-их година прошлог века овај ефекат не долази до изражаја у пуној мери. (б) Криве сила–померање за случајеве: (1) без омекшавања приликом затезања, (2) само везивна матрица омекшава при затезању, и (3) и везивна матрица и међуповрш омекшавају при затезању (инспирисано резултатима симулација из референце (Karahaloo et al., 2003)).

Карихалу и коаутори су користили инкременталну, итеративну рачунску процедуру засновану на тренутном секантном модулу ради узимања у обзир омекшавања при затезању и нелинеарности до којих долази при великим деформацијама. Подужна релативна деформација (истезање, елонгација) сваког гредног елемента израчунава се на основу чворних померања и упоређује са одговарајућом граничном вредношћу

$$\varepsilon = \frac{1}{L} \left\{ \left[ (u_j)_1 - (u_i)_1 \right] \cos \theta + \left[ (u_j)_2 - (u_i)_2 \right] \sin \theta + \alpha_{\text{кн}} \left| \varphi_j - \varphi_i \right| \frac{t}{2} \right\} = \varepsilon_{cr} \quad (3.67)$$

У изразу (3.67)  $u_1$ ,  $u_2$ , и  $\varphi$  представљају три степена слободе чвора у 2Д проблемима,  $t$  је дебљина чворног елемента, а  $\alpha_{\text{кн}}$  је параметар модела. Подешавајући параметар  $\alpha_{\text{кн}}$  (попут множитеља  $\zeta_{\text{вм}}$  из израза (3.66)) регулише утицај савијања и бира се тако да се са што већом тачношћу репродукује понашање материјала у режиму омекшавања (Karihaloo et al., 2003). Уколико је материјална фаза идеално крта, критична деформација  $\varepsilon_{cr}$  је релативна деформација која одговара затезној чврстоћи ( $\sigma_m$ ). Када је за материјалну фазу усвојена билинеарна конститутивна релација (нпр., слика 3.3б),  $\varepsilon_{cr} = \varepsilon_f$ .

Типична опажања на основу резултата симулација сугеришу да разлика у физичко-механичким особинама фаза композитног материјала смањује стрмост криве сила–померање у режиму омекшавања (видети слику 3.19б) што је била главна мотивација уведених модификација модела. У случају када је међуповрш агрегат–везивна матрица најслабија материјална фаза, граница значајног раздвајања дуж међуповрши, која је најчешће у вези са концентрацијама напона, праћена је одступањем од почетног линеарног одзива. Праг омекшавања на макроскопској скали одговара почетку лома везивне матрице и појави (једне или више) доминантних макропрслина као што је експериментално показано коришћењем фотоеластичних превлака (Van Mier and Noor-Mohamed, 1990).

Увођење омекшавања при затезању у конститутивне законе везивне матрице и међуповрши доводи до просторно равномернијих (мање локализованих) образаца распрострања прслина што је лепо илустровано у изворној референци (Karihaloo et al., 2003). Сходно тој равномернијој просторној распоређености прслина, долази и до дуктилнијег одзива и верније репродукције експерименталних опажања код честичних композита (слика 3.19б). Увођењем Тимошенкове формулације (поглавље 3.3.3) клизања гредних елемената (3.57<sub>2</sub>) је, по свему судећи, значајно утицало на обрасце распрострања прслина док су промене у кривама сила-померање биле релативно скромне. Коришћење коначних, уместо инфинитезималних, деформација значајно је утицало и на омекшавање и на обрасце распрострања прслина. Општи тренд свих уведених измена модела указује на жељено смањење стрмости одзива у режиму омекшавања као и на смањење броја раскинутих гредних елемената. Карихалу (Karihaloo, 2004) је сматрао да, и поред тога што је тешко изоловати омекшавање материјала, због добро знане материјално-структурне интеракције, то не значи да оно не треба да буде узето у

обзир приликом мезоскопског конститутивног моделирања решеткастог модела. Овај приступ моделирању заснован је на уверењу да је адекватно моделирање дисипативних процеса приликом оштећења и лома квази-кртих, хетерогених материјала немогуће уз искључиво коришћење еластичних-идеално кртих конститутивних релација на мезо скали.

*Љу и коаутори* (Liu and co-workers, 2007, 2008) развили су оригинални решеткасти модел заснован на генералисаним гредама како би ублажили проблем рачунарског оптерећења који је неизбежни део симулација традиционалним решеткастим методама због неопходности да просторна резолуција модела буде мања од величине најфинијег агрегата. Модел решетке са генералисаним гредама је, дакле, развијан као рачунарски много ефикаснија варијанта гредне решетке за моделирање композитних (вишефазних) материјала. Мезоструктура трофазног материјала пројектује се директно на правилну троугаону решетку са генералисаним гредама (слика 3.20а) са геометријских центара агрегата постављених у чворовима решетке и елементима (генералисаним гредама) који представљају двочворне (уопштено узев, трофазне) линијске носаче како је илустровано на сликама 3.20б,в. Кључна особина ове технике је да омогућава да густина мреже (карактеристична димензија решетке) може да буде већа од величине највећег агрегата што значи да је једна греда довољна за моделирање сваког појединачног агрегата. Свака фаза елемента (генералисане греде) представљена је са Тимошенковом гредом еквивалентних особина; ако шестоугаона јединична ћелија не садржи агрегат она се, без обзира на то, формално састоји од три типа греда само са идентичним особинама. Претпостављено је да три греде које сачињавају генералисану греду чврсто пријањају тако да су померања два краја средње греде у потпуности одређена преко два чвора генералисане греде. Греде агрегата и везивне матрице дефинисане су Тимошенковом теоријом греда (поглавље 3.3.3) док су греде којима је моделирана међуповрш дефинисане на специфичан начин описан у додатку А у раду Боландера и Саита (Bolander and Saito, 2002). Формирање матрице крутости елемента (генералисане греде) и калибрација параметара одговарајуће решетке детаљно су приказани у раду Љуа и коаутора (Liu et al., 2007, 2008).

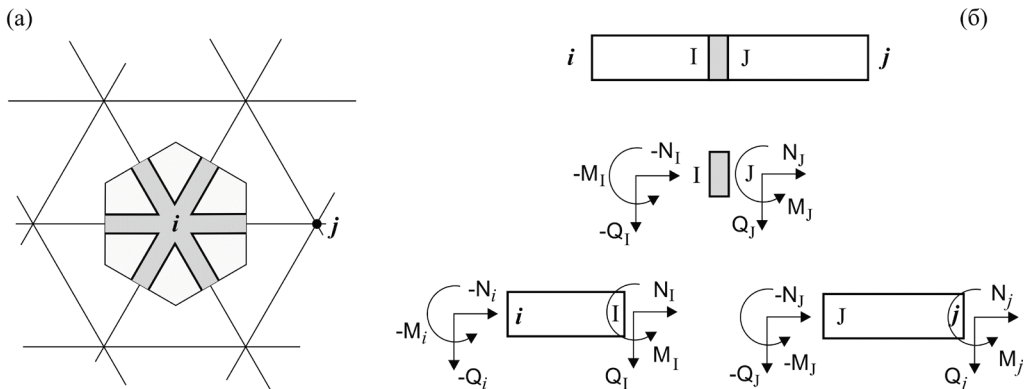
Алгоритам решавања квази-статичког проблема је у суштини остао непромењен: лом се симулира уклањањем елемената (генералисаних греда) које задовоље критеријум кидања имајући у виду да се критичност на лом три греде у сваком елементу разматрају независно. Критеријум кидања који су користили Љу и сарадници (Liu et al., 2007, 2008) заснивао се на највећем дозвољеном напону затезања (4.27). Насупрот томе, нумеричко представљање догађаја лома

елемента у раванском мрежном моделу за симулацију кидања папира (Liu et al., 2010) укључивао је такође и критеријум највећег напона смицања

$$|\tau| = \frac{|q|}{A_b} = \tau_{cr} \tag{3.68}$$

где је  $A_b$  пресечна површина два узастопна влакна а  $q$  интеракција смицања.

Репрезентативни пример резултата симулација теста једноосног затезања приказан на слици 3.21 преузет је из референце (Liu et al., 2008). Крива сила-померање (3.21a) показује два доминантна режима одзива и неколико типичних стања дуж путање оптерећења. На слици 3.21a су лако уочљиве добро знане карактеристике кртог одзива при једноосном оптерећењу: линеарно-еластични део на самом почетку оптерећења, повијање (у овом случају, билинеарни прелом)  $P$ - $\delta$  криве услед појаве оштећења у режиму очвршћавања, приближно линеарни део у завршној фази режима очвршћавања, нагли пад силе по досезању критичне тачке (означене са (a)). (У референци (Liu et al., 2007) могу се наћи и одговарајући дијаграми броја раскинутих веза у фазама везивне матрице и међуповрши.) Пет карактеристичних образаца распрострањања оштећења у режиму омекшавања дочаравају ефекте нагомилавања оштећења и раста доминантних прслина у процесу оптерећења узорка непосредно пре коначног лома на макроскопској скали.



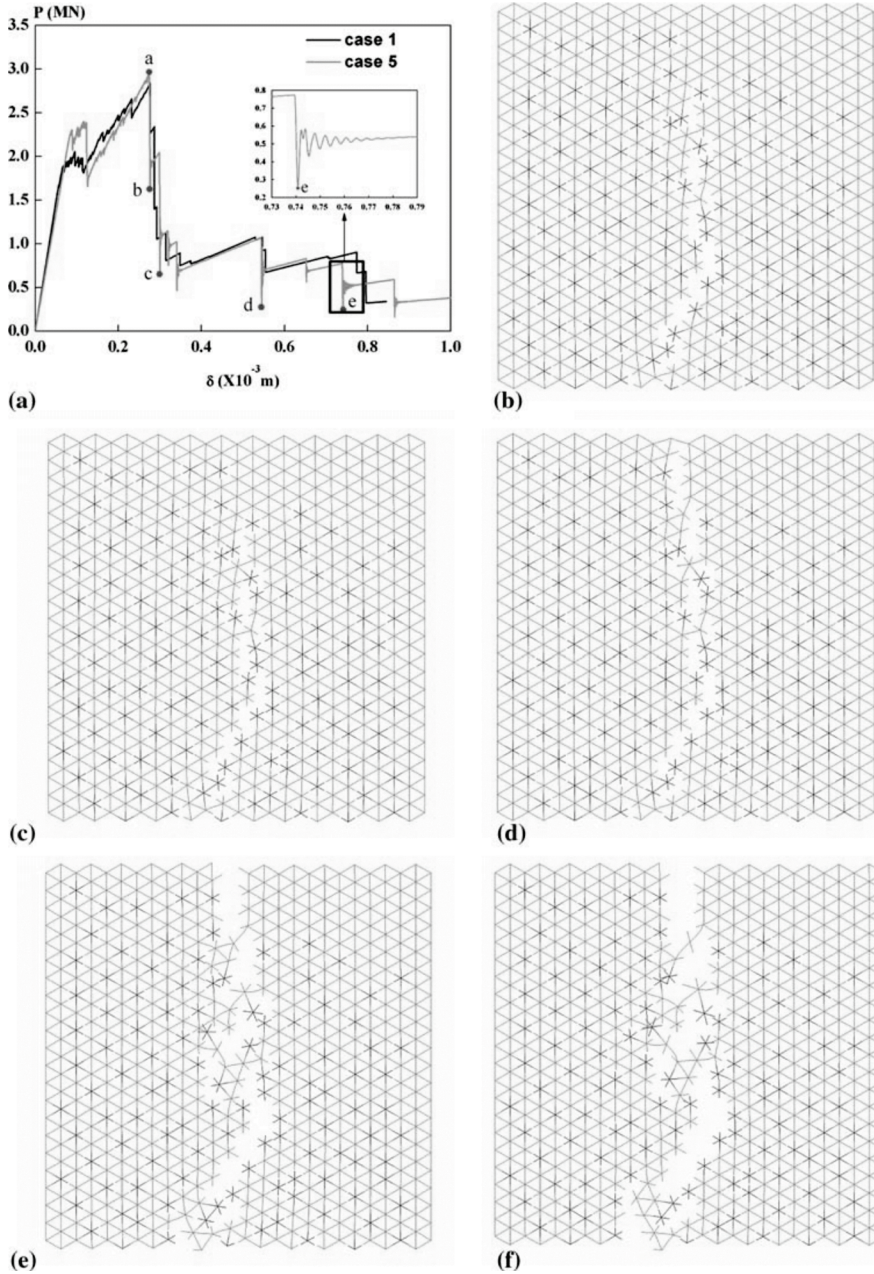
**Слика 3.20.** Геометрија решетке са генералисаним гредама која представља трофазну композитну структуру: (a) шестоугаона јединична ћелија троугаоне агрегат-матрица решетке са генералисаним гредама, и (б) композитни елемент (генералисана греда) састављен од греде агрегата, греде међуповрши и греде везивне матице. Пошто средњи сегмент (I-J) чврсто пријања за крајње сегменте, његова деформација је у потпуности одређена померањима чворова  $i$  и  $j$ .

Љу и коаутори (Liu et al., 2008) међу првима су предложили динамичку анализу гредном решетком уз коришћење технике централних разлика за решавање једначина равнотеже, односно кретања. Током процеса динамичког лома јављају се две врсте инерцијалних ефеката: (i) услед повећања оптерећења, и (ii) услед раста прслина. Љу и коаутори су испитивали у којој мери је неопходно коришћење динамичке процедуре решавања проблема при малим брзинама деформисања. Директним коришћењем израза (3.64) за еластичне константе материјала у зависности од параметара Тимошенкове гредне решетке, аутори су дефинисали модул еластичности полугреде следећим изразом

$$E^{(b)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\bar{h}} \frac{t}{t^{(b)}} \frac{E'}{1-\nu'}$$

у зависности од особина материјала.

У својој анализи усвојили су да све греде агрегата и везивне матрице имају правоугаоне попречне пресеке (у нотацији коришћеној на слици 3.14,  $t^{(b)} \times h^{(b)}$ ), да су дебљине полугреде једнаке дебљини јединичне ћелије континуума  $t$  дебљина ( $t^{(b)} = t$ ), да је нормализована ширина полугреда ( $\bar{h} = 0.5$ ), те да Поасонов коефицијент обе фазе има исту вредност  $\nu = 11/40$ . На основу тога добијени параметри правилне троугаоне ГГ решетке имају вредности  $E^{(b)} = (80/29\sqrt{3})E'$  и  $\nu^{(b)} = 31/77 \approx 0.40$ . За модул еластичности агрегата коришћена је вредност 70 GPa а за матрицу и међуповрш иста вредност 25 GPa. Одговарајући динамички приступ симулацијама лома кртих материјала описан је и илустрован за четири мале брзине контролисаног померања и упоређен са резултатима квази-статичких симулација. При томе је важно да се уочи да су симулације процеса лома коришћењем динамичке процедуре захтевале значајно повећање интензитета рачунарских симулација. Добијени резултати симулација демонстрирали су да, док се утицај инерцијалних ефеката поступно ублажава са смањењем брзине оптерећења, инерцијални ефекти изазвани нестабилним растом прслина остају значајни чак и при најнижим брзинама оптерећења што је у складу са опажањем Ибрахимбеговића и Делапласа (Ibrahimbegovic and Delaplace, 2003) да инерцијални ефекти играју важну улогу при формирању образаца распрострањања прслина. Ово запажање поставило је питање оправданости уобичајеног занемаривања инерцијалних ефеката у квази-статичким анализама лома. Љу и коаутори (2008) су закључили да квази-статичке методе не треба да се користе за анализу проблема у којима се јавља *нестабилни* раст прслина.



**Слика 3.21.** (а) Крива сила–померање ( $P$ – $\delta$ ) при квази-статичкој (“case 1”) и динамичкој симулацији при брзини контролисаног померања  $10^{-3}$  m/s (“case 5”). Пет образаца распрострањања прлина (b–f) у режиму омекшавања разликују се од истих добијених при квази-статичком оптерећењу. (Преузето из Liu et al. (2008) са допуштењем издавача. Copyright (2008) by Springer).



Хоеи и Пурматен (Khoei and Pourmatin, 2011) су, попут Љуа и коаутора (Liu et al., 2008), развили динамички модел на мезо скали заснован на решетки са Тимошенковим гредама са циљем проучавања динамичког одзива трофазног хетерогеног материјала (бетона) и упоређивања са статичким. Специфичност ове примене Тимошенкове греде у решеткастом моделу је што су њени параметри одређени коришћењем нелокалне теорије механике континуума (3.64). (За примену ове теорије у анализи генеричких хетерогених, квази-кртих материјале видети, нпр., Vařant and Jiřásek, 2002; Jiřasek, 2004.) Динамичка анализа раста прслине је извршена коришћењем Њумаркове бета технике (Newmark, 1959) засноване на просечном убрзању

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i(t + \delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \left[ \frac{\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \delta t)}{2} \right] \delta t \\ \mathbf{r}_i(t + \delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t) \delta t + \frac{1}{2} \left[ \frac{\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \delta t)}{2} \right] \delta t^2 \end{aligned}$$

Расподела агрегата у оквиру решеткастог модела генерисана је на основу расподеле њихових величина у оквиру мреже опадајућим редом (прво највећи агрегат, потом други највећи итд.). Минимално растојање између центара два суседна агрегата одређено је збиром њихових полупречника увећаним 20% (Cusatis et al., 2003a). Мезоструктура трофазног композита пројектована на правилну троугаону решетку на овај начин илустрована је на слици 1.2в. Кидање гредних елемената дефинисано је критеријумом критичне аксијалне релативне деформације (3.67) уз коришћење параметра модела  $\alpha_{\text{KH}} = 0.005$ .

Два експеримента су коришћена за илустрацију могућности решеткастог гредног модела за симулацију прстирања прслина у бетону: једноставни једноосни тест на затезање (мод I) и Нуру-Мухамедов тест на смицање узорка (“DENS”) са двоструким зарезом (слика 3.15a; комбиновани I и II модови). У првом тесту, за разлику од другог, не постоји иницијални зарез (нити прслина) па су нехомогеност узорка индуковане мезопрслине главни узроци стохастичког одзива. Приказани су и дискутовани обрасци распростирања прслина и криве сила-померање. У случају једноосног теста на затезање, Хоеи и Пурматен су показали да се обрасци распростирања прслина за статичку и две динамичке симулације различитим брзинама деформисања ( $\dot{\epsilon} = 0.0001, 0.01 \text{ s}^{-1}$ ) не показују велике разлике и у сагласности су са експерименталним резултатима Прада и ван Мира (Prado and van Mier, 2003). С друге стране, криве сила-померање ( $P$ - $\delta$ ) показују не само квантитативну него и квалитативну разлику у критичној и посткритичној области: (i) критична тачка при  $\dot{\epsilon} = 0.01 \text{ s}^{-1}$  одликује се нешто вишим вредностима координата ( $P_{cr}, \delta_{cr}$ ) = (1210 N, 4.1  $\mu\text{m}$ ) него при статичком

оптерећењу (1080 N, 3.6  $\mu\text{m}$ ), и (ii) до наглог пада силе у области омекшавања (илустрован на слици 3.21a) у динамичким симулацијама долази нешто мање стрмоглаво (али и даље недовољно поступно) и при већим вредностима померања него у статичком случају (8.8  $\mu\text{m}$  наспрам 7.3  $\mu\text{m}$ ). При томе је важно уочити изражену тенденцију да се са успоравањем брзине деформисања ( $0.01 \text{ s}^{-1} \rightarrow 0.0001 \text{ s}^{-1}$ ) наведени резултати динамичких симулација при малим брзинама деформисања приближавају статичком случају. Све у свему, при једноставном оптерећењу на једносно затезање, симулације доста успешно репродукују зачеће и развој прелина и коначни лом узорка у првом моду (мод I), међутим облик  $P$ - $\delta$  у посткритичном режиму (омекшавање) показује одређена одступања између динамичких и статичких симулација.

У случају сложенијег Нуру-Мухамедовог теста на узорку са иницијалним зарезима, са модом лома који представља комбинацију првог и другог осовног мода, закључци се донекле разликују. Узорак са двоструким ивичним зарезима (слика 3.15a, "DENS"), димензија  $0.1 \times 0.1 \times 0.05 \text{ m}$ , изложен је деловању различитих пропорционалних ( $\delta_{\text{ten}}/\delta_{\text{sh}} = 1$ ) и непропорционалних ( $\delta_{\text{ten}}/\delta_{\text{sh}} = 2$ ) путања оптерећивања комбинацијом затезања и смицања. Резултати симулација су показали да обрасци распрострањања прелина добро репродукују експерименталне резултате. Међутим, у случају  $P$ - $\delta$  кривих уочено је значајно одступање уз одређене разлике између пропорционалних и непропорционалних путања оптерећивања. При пропорционалној путањи оптерећивања, пад нормалне силе у посткритичном режиму је стрмоглав за све симулације те квалитативно одудара од благог омекшавања са коначним нагибом карактеристичним за експерименталне криве. Ситуација је нешто боља у случају смичућих сила али су разлике и даље уочљиве за све симулације. При непропорционалној путањи оптерећења са *преовладавајућим затезањем*, опажања су донекле слична али је, за разлику од  $\delta_{\text{ten}}/\delta_{\text{sh}} = 1$  случаја, уочен повољан тренд у режиму омекшавања са повећањем брзине деформисања. Хоеи и Пурматен су, с тим у вези, обавили и додатну симулацију са брзином  $\dot{\epsilon} = 0.02 \text{ s}^{-1}$ . На основу тога су били у могућности да закључе да са повећавањем брзине деформисања,  $P$ - $\delta$  криве у области омекшавања показују тренд приближавања експерименталним резултатима. Све у свему, повећавање сложености напонско-деформационог стања, а тиме и лома, има неповољан ефекат не способности ових симулација да репродукују експерименталне резултате.

### 3.4 Примена решеткастих модела на проблеме фрагментације

*Острем и коаутори* (Åström et al., 2000) су користили квадратну Бернули-Ојлерову гредну решетку за анализу фрагментације 2Д кртог грануларног материјала у условима експлозивног и ударног оптерећења. (У поглављу 2.6, већ је приказан 2Д–МД модел коришћен у истом раду за симулације експлозивне фрагментације течности.) У почетној конфигурацији решетка насумично одступа од правилне квадратне мреже у циљу добијања неправилне, стохастичке микроструктуре материјала. (Важно је да се уочи да се термин “микроструктура” у овој монографији користи као генеричка одредница за унутрашњу структуру материјала на било ком нивоу испод макро нивоа и не мора да подразумева микроскопску простирну скалу у смислу слике 1.1.) Острем и коаутори су користили Бернули-Ојлерове еластичне греде квадратног попречног пресека. Експлозивно оптерећење је наносено на исти начин као и у МД моделу употребљеном у истом раду (поглавље 3.6): коришћењем симулационе ћелије са периодичним граничним условима у вертикалном правцу уз наносење експлозивног оптерећења применом изотропног градијента брзине у хоризонталном правцу. Ударно оптерећење је наносено применом контролисаног померања  $\mathcal{A} \sin^2 \omega t$  на чворове леве ивице симулационе ћелије током временског периода  $0 \leq t \leq \pi/\omega$ .

Скалирање типичне масе фрагмента,  $m_{ave}$ , са брзином релативне деформације,  $\dot{\epsilon}$ , у  $d$ -димензионим проблемима дато је изразом (2.28),  $m_{ave} \propto L_\phi^d \propto \dot{\epsilon}^{-2d/3}$ . Деформациона енергија заробљена у фрагменту у тренутку његовог формирања доводи касније до његовог даљег уситњавања. Пошто маса фрагмената у овом процесу може само да се смањује, аутори су увели претпоставку да израз (2.28) дефинише одговарајућу пропорционалност највећег фрагмента у коначној (равнотежној) расподели фрагмената. Аргумент је да уколико фрагментација заиста постаје критична, израз (2.28) дефинише једину дужинску скалу у датом систему. Пошто су фрагменти само 2Д објекти а не фрактали (као, нпр., у случају перколације), за 2Д фрагментацију ( $d = 2$ ) треба да важи следећа пропорционалност за корелациону дужину  $L_\phi \propto \sqrt{m_{ave}} \propto \dot{\epsilon}^{-2/3}$ . Важно је да се истакне да је експонент  $2/3$  тачно половина експонента корелационе дужине за случај перколације. За очекивати је да у критичном режиму расподела величина фрагмената задовољава закон скалирања па су Острем и сарадници — вођени примером перколације — покушали да изразе расподелу фрагмената у облику

$$n(m) \propto m^{-\tau_F} f(m/\mu_0) \quad (3.69)$$

где је  $f$  функција скалирања. Претходни облик расподеле фрагмената слагао се са тада доступним експерименталним опажањима. Нпр., резултати добијени фрагментацијом кртих материјала (Oddershede et al, 1993; Kadono, 1997) у сагласности су са са кумулативном расподелом масе фрагмената

$$M(m) = \int_m^{\infty} n(x) dx \propto m^{1-\tau_F} \exp(-m/\mu_0) \quad (3.70)$$

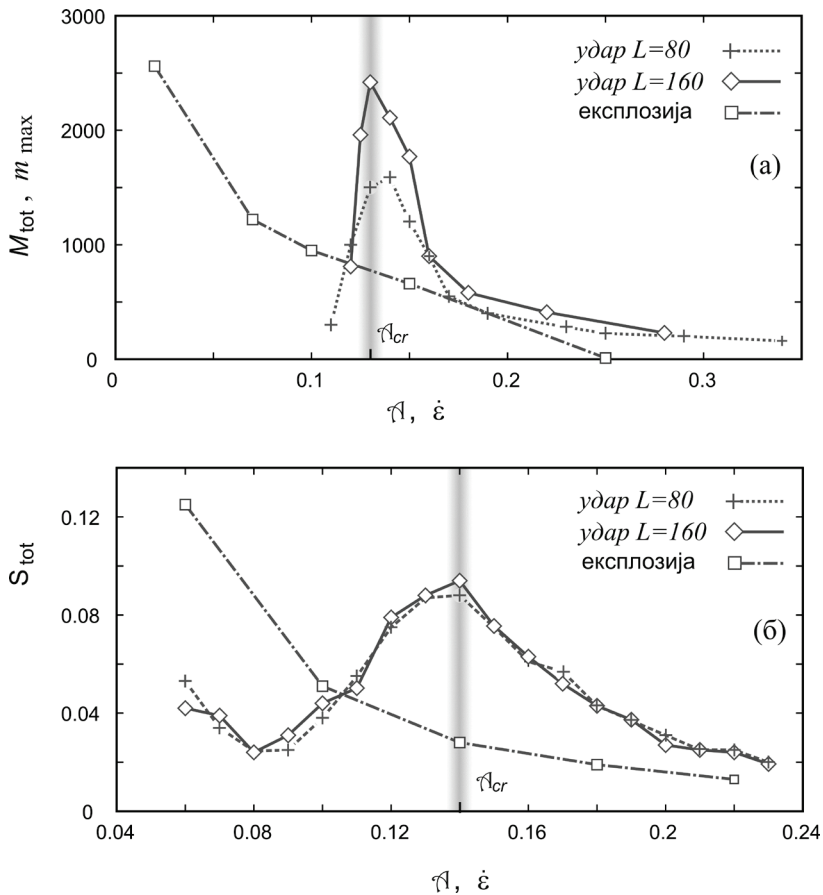
где  $\tau_F$  и  $\mu_0$  представљају параметре подешавања. Изрази (3.69) и (3.70) се слажу када функција скалирања има облик

$$f(z) = (\alpha + z) \exp(-z). \quad (3.71)$$

Резултати рачунарских симулација истичу квалитативну разлику у обрасцима фрагментације при експлозивним и ударним оптерећењима које су Острем и сарадници анализирали. Приликом фрагментације услед хомогеног адијабатског ширења (што је првобитни проблем анализиран МД симулацијама; (Holian and Grady, 1988)), фрагменти су равномерно распоређени по површини узорка при свакој брзини деформисања,  $\dot{\varepsilon}$ , с тим што се типична величина фрагмената видно смањује са повећањем брзине деформисања. У случају нехомогене ударне фрагментације, при малим брзинама удара,  $v_{imp}$ , не долази до фрагментације него талас притиска, који путује дуж узорка, само изазива акумулацију оштећења. Када брзина удара досегне одређену критичну вредност долази до појаве фрагмената локализованих у зони ударне површине. У зависности од интензитета наткритичне брзине удара, већи или мањи део система је захваћен фрагментацијом.

У циљу квантитативног приказивања горе описаних појавних облика тренутних фрагментација, Острем и сарадници (Åström et al., 2000) су у случају ударне фрагментације користили укупну масу фрагментираниог дела узорка,  $M_{tot}$ , као функцију амплитуде удара (пропорционалне брзини удара,  $\gamma = v_{imp}/\dot{\omega}$ ); док су у случају експлозивне фрагментације користили максималну масу фрагмента,  $m_{max}$ , као функцију брзине деформисања,  $\dot{\varepsilon}$ . За оба случаја динамичког оптерећења користили су и однос укупне површине фрагмената и кинетичке енергије,  $S_{tot}$ . Резултати симулација, приказани на слици 3.22, илуструју континуално смањивање  $m_{max}$  и  $S_{tot}$  са повећањем  $\dot{\varepsilon}$ , што указује на критичну тачку у области квази-статичког оптерећења ( $\dot{\varepsilon} = 0$ ) у складу са изразом (2.28), коју карактерише простирање једне доминантне прслине која прецепљује

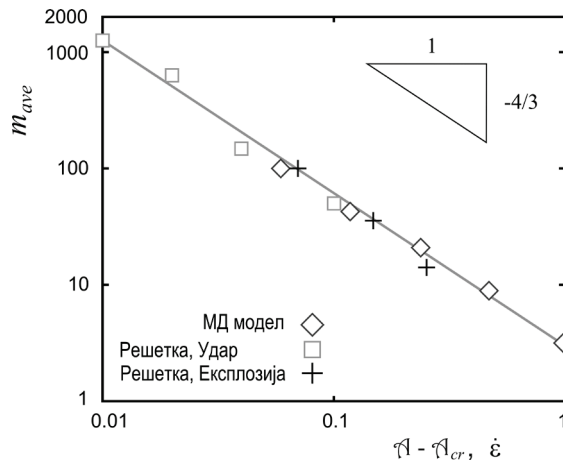
узорак. Нарочито су интересантни резултати симулација за случај ударне фрагментације где се јасно уочава критична вредност амплитуде удара (идентификоване као  $\mathcal{A}_{cr} = 0.14$  за већу величину узорка) која одговара максималним вредностима  $M_{tot}$  (а) и  $S_{tot}$  (б). На слици 3.22а може се уочити да се максимум  $M_{tot}$  са повећањем узорка помера навише и налево док врх криве постаје оштрији што су све типичне појаве везане за критичну тачку при фазним променама (у овом случају из фазе оштећења система у фазу фрагментације система, о чему ће касније бити више речи).



**Слика 3.22.** Функционалне зависности параметара фрагментације од интензитета динамичког оптерећења: (а) за ударну укупну масу фрагментираниог дела узорка ( $M_{tot}$ ) као функцију амплитуде удара ( $\mathcal{A} = v_{imp} / \dot{\omega}$ ), и максималну масу фрагмента ( $m_{max}$ ) као функцију брзине деформисања ( $\dot{\epsilon}$ ) тим редом за ударну и експлозивну фрагментацију; (б) релативна површина фрагмената  $S_{tot}$  у функцији параметара интензитета динамичких оптерећења. (Преузето са допуштењем издавача из референце (Åström et al., 2000). Copyright (2000) by the American Physical Society).

Дакле, резултати симулација тренутних фрагментација указују на постојање енергије удара  $\propto \gamma \mathcal{A}_{cr}$  при којој фрагментација постаје критична. Аутори су изразили очекивање да је у критичној тачки расподела маса фрагмената при ударној фрагментацији дефинисана степеном функцијом. Дивергенција корелационе дужине у критичној тачки  $\xi \propto \chi^{-2/3}$ , образложена је аргументима заснованим на равнотежи енергија, где је растојање од критичне тачке у случају ударне фрагментације  $\chi = \gamma \mathcal{A} - \gamma \mathcal{A}_{cr}$  (односно,  $\chi = v_{imp} - v_{cr}$ ), а у случају експлозивне фрагментације  $\chi = \dot{\epsilon}$ .

Коначно, Острем и сарадници су демонстрирали веома убедљиво сагласност резултата симулација са изразима за расподелу масе фрагмената (3.69) и кумулативну расподелу масе фрагмената (3.70). Као параметре подешавања користили су  $\alpha$  и  $\mu_0$  и показали преклапање резултата симулација при различитим брзинама деформисања приликом експлозивног оптерећења. Случајно или не, показало се да коришћење исте вредности првог параметра,  $\tau_F \approx 1.5$ , обезбеђује успешно преклапање резултата добијених при различитим брзинама ударне фрагментације. Скалирање корелационе дужине је одређено са параметром  $M_0$  добијеним подешавањима при различитим растојањима од критичне тачке за оба случаја тренутних фрагментација. Показано је да се резултати свих система коришћених у овом раду слажу са изразом (2.28).



**Слика 3.23.** Типична маса 2Д фрагмента  $m_{ave} \propto L_\phi^2$ , количинска мера интензитета динамичких оптерећења, као функција растојања од критичне тачке ( $\gamma \mathcal{A} - \gamma \mathcal{A}_{cr} \propto v_{imp} - v_{cr}$  за ударну фрагментацију, односно,  $\dot{\epsilon}$  за експлозивну фрагментацију) за два разматрана модела рачунарске механике прекидних средина. (Преузето са допуштењем издавача из референце (Åström et al., 2000). Copyright (2000) by the American Physical Society).

## 4 Методе дискретних елемената

Метода дискретних елемената (ДЕМ) је позната и под називом метода “дистинктних” (засебних, оделитих) елемената. Ради се о Лагранжијанској техници рачунских симулација у којој се рачунски домен састоји од дискретних крутих или деформабилних елемената — зрнаца — која су исте Еуклидске димензионалности као и анализирани проблем и која ступају у међусобна дејства путем одређених контактних алгоритама. Материјал је представљен Воронојевом скупином дискретних *тела* (зрнаца, гранула, честица, зрна), репрезентативних са становишта хетерогености текстуре материјала, чија динамичка међудејства одређују његово макроскопско понашање (као целине континуума). Контактни алгоритми, дакле, представљају физичко језгро моћне скупине рачунских техника које су наменски створене у циљу решавања проблема примењене механике које карактеришу изразито велики прекиди у унутрашњој структури материјала или геометрији објекта или обома (Cundall, 1971; Cundall and Stack, 1979). Сходно томе, ДЕМ модели имају најприроднију примену код материјалних система који се одликују идентичном топологијом као и репрезентујућа мрежа зрнаца (Curtin and Scher, 1990); нпр. слика 4.3. У модерним програмима, зрнаца могу бити различитих облика а контакти међу њима глатки или храпави (Jing and Stephansson, 2008).

ДЕМ је први увео Кандал (Cundall, 1971) у циљу анализирања прекидног прогресивног лома стеновитих падина (косина),<sup>10</sup> да би касније биле примењене и за анализу проблема са другим врстама тла (Cundall and Strack, 1979). Кандал и Харт (Cundall and Hart, 1992) су језгровито изложили методолошки приступ дефинисањем ДЕМ као методе која допушта коначне транслације и обртања дискретних тела, укључујући и потпуно раздвајање њихових међусобних контаката, као и аутоматско препознавање новоуспостављених контаката током симулације. Мада се ДЕМ сада широко користи за моделирање различитих

---

<sup>10</sup> Занимљиво је да се уочи да у случају овог физичког проблема мезоструктурни елементи (зрнаца) могу бити реда величине метара и тона.

класа материјала као што су геоматеријали, биоматеријали, композити; чини се да су најприродније примене за симулације деформисања (и/или протока) зрнастих, мање или више растреситих (у зависности од степена међугрануларне кохезије), материјала који имају исту топологију као репрезентујућа скупина зрнаца (слика 4.3). Без обзира на конкретну примену, циљни материјал се апроксимира конгломератом дискретних, крутих или чврстих, мезоскопских зрнаца који могу да се делимично преклапају<sup>11</sup>, одвајају али и препознају нове контакте. Механичко понашање целине је описано на основу кретања појединачних зрнаца и специфицирања њихових међусобних конститутивних релација сила-померање или контактних сила. Попут осталих рачунских метода механике прекидних средина, ДЕМ даје детаљну временску еволуцију система решавањем Њутнових једначина кретања појединачних зрнаца, укључујући и сложене механизме оштећења који природно проистичу из симулација. У овој монографији описана је само традиционална ДЕМ без осврта на “егзотичније” дискретне методе. Заинтересовани читалац може у књизи Ђинга и Стефансона (Jing and Stephansson, 2008) да нађе детаљан опис ДЕМ метода са применом у механици стена.

Уобичајено је да се, на основу механизма преноса оптерећења коришћеног у моделу (Ostoja-Starzewski, 2007), ДЕМ деле на методе са:

- Централним међудејствима: ови модели представљају генерализацију  $\alpha$  модела из претходног поглавља. Укупна еластична деформациона енергија је збир свих међудејстава централним силама између зрнаца и, сходно томе, узима у обзир само додире између парова зрнаца у правцу праве која спаја њихова тежишта

$$U = U_{\text{централна}}$$

- Централно-угаоним међудејствима: ови модели представљају генерализацију  $\alpha$ - $\beta$  модела из поглавља 3. Укупна еластична деформациона енергија је збир свих међудејстава централним силама као и угаоних међудејстава између зрнаца. Поред нормалних контаката између зрнаца дуж ивица (нпр.,  $\mathcal{V}_1$ - $\mathcal{V}_2$ ), узима се у обзир и енергија деформације услед промена углова (нпр., између ивица  $\mathcal{V}_1$ - $\mathcal{V}_2$  и  $\mathcal{V}_1$ - $\mathcal{V}_3$ ).

$$U = U_{\text{централна}} + U_{\text{угаона}}$$

<sup>11</sup> Зарад дефинисања интензитета силе и имитације локалне деформације у тачки додире у случају тзв. „меких контаката” крутих зрнаца.



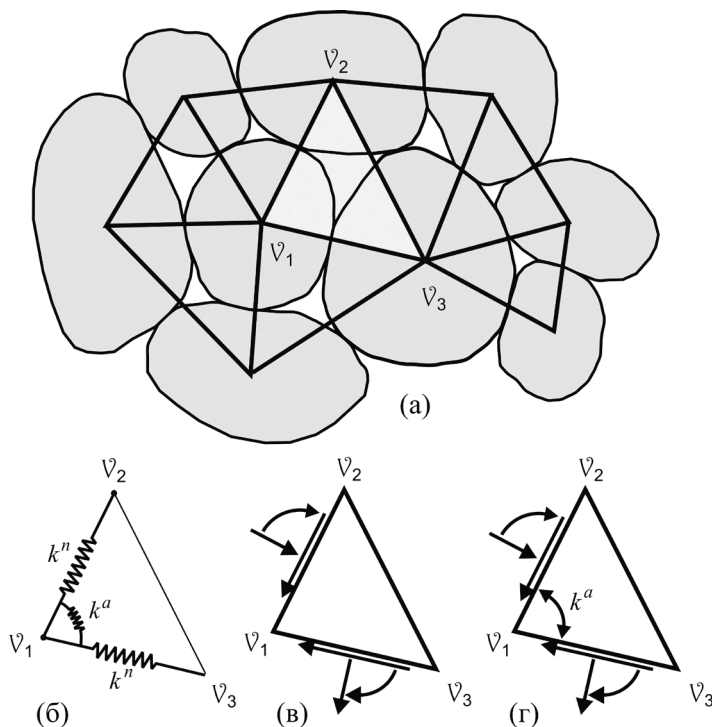
- Централно-смичуће-савијајуће интеракције: ови модели представљају генерализацију модела са гредним међудејствима описаних у поглављу 3. Укупна еластична деформациона енергија представља збир свих централних, смичућих и моментних међудејстава између честица.

$$U = U_{\text{централна}} + U_{\text{смичућа}} + U_{\text{моментна}}$$

Ово је типична ДЕМ, која се може назвати „локалним нехомогеним микрополарним континуумом” (Ostoja-Starzewski, 2007) са нехомогеностима које варирају, рецимо, на скали кристалних зрна.

- Централно-смичуће-савијајуће-угаоне интеракције.

$$U = U_{\text{централна}} + U_{\text{смичућа}} + U_{\text{моментна}} + U_{\text{угаона}}$$



**Слика 4.1.** Скупина зрнаца са кластером од три зрнаца са истакнутим међусобним линијама међудејстава (мрежа гранајућих вектора); (б) једноставни модел представљен само са нормалним ( $k^n$ ) и угаоним ( $k^a$ ) ефектима; (в) дискретни елемент са нормалним и смичућим силама и моментима којима зрнаца 2 и 3 делују на зрнаца 1; и (г) најопштији модел који се карактерише истим међудејствима између зрнаца као и претходни (в) али проширен са унутрашњом, угаоном опругом крутости  $k^a$ .

Методологија решавања проблема коришћењем ДЕМ заснива се на МД формализму који, типично, укључује експлицитне шеме коначних разлика код којих рачунски циклус подразумева примену другог Њутновог закона кретања на свако зрнце уз употребу специфицираног закона сила-померање на све контакте међу њима у циљу изналажења нових положаја зрнаца. Током глобалне деформације узорка (односно, структурног објекта на макроскопској скали) може доћи до „појаве” нових контаката (између зрнаца која се претходно нису додиривала) а, у случају кохезивних (пријањајућих) материјала, и до раскидања контаката. Због тога, глобална матрица еластичности целе скупине зрнаца мора непрекидно да се ажурира, из циклуса у циклус. За некохезивне (непријањајуће, растресите) материјале постоји још један разлог због кога је неопходно ажурирање глобалне матрице еластичности: наиме, интеракције између зрнаца, како у нормалном тако и у смичућим правцима, нису нужно линеарне, што подразумева да коефицијенти крутости  $k''$  и  $k'$ , који дефинишу наведене контакте, морају непрекидно изнова да се рачунају (Van Baars, 1996; Li et al., 2009; Krut and Rothenburg, 2001). Напредније теме и специфичности ДЕМ технике попут паковања и облика зрнаца, закона течења, капиларних ефеката, оптерећења великим брзинама деформисања доступне су, нпр., у прегледном раду (Donzé et al., 2008) и тамо наведеним референцама.

За разлику од рачунских метода механике континуума, попут МКЕ, код којих су примарне променљиве напони и релативне деформације, код ДЕМ ту улогу играју силе и померања. Сходно томе, неходна је примена хомогенизације, односно процеса развоја метода описа континуума на основу микроскопских параметара стања појединачних елемената који сачињавају скупину. Полазна тачка, у том поступку (као и у случају метода механике континуума, уопштено), је дефинисање репрезентативне величине елемента (PBE, “RVE–representative volume element”), који служи као запремина за израчунавање просечних вредности макроскопских параметара (нпр., Nemat-Nasser and Hori, 1993; Wellman et al., 2008). Дакле, хомогенизација и технике конститутивног моделирања омогућавају узимање у обзир микроструктуре у оквиру примене метода континуума али само индиректно у смислу осредњених поља (“mean field”). Параметри модела се типично подешавају коришћењем експериментално уоченог понашања и велики број таквих параметара је неопходан за репродуковање сложених појава. Хомогенизација је, веома често, захтеван посао јер параметри који контролишу геометријске особине и конститутивно понашање немају увек јасно физичко значење а могу да показују и сложене међузависности (Donzé et al., 2008). Упркос отвореним питањима која су истакнута кроз цело ово поглавље, моделирање механичког понашања гео-

материјала коришћењем ДЕМ је у сталном успону и то не само у истраживањима већ и у геотехничком инжењерству (нпр., Damjanac et al., 2007). Основни узрок ове популарности ДЕМ дугује способности природне репродукције локализације – појаве која је свеприсутна у геоматеријалима а коју је тешко моделирати рачунским методама механике континуума заснованим на мрежној дискретизацији (нпр., МКЕ).

Контактни алгоритми чине срж ДЕМ. Реално и детаљно моделирање деформација пара зрнаца у међусобном контакту је сувише сложено; стога, у наредним разматрањима сила међудејства зрнаца  $i$  и  $j$  везује се за њихово преклапање  $u_{ij}^n$  илустровано на слици 4.2а. Херцова теорија еластичног контакта (Maugis, 1999) основни закон интеракције *две* лопте полупречника  $R_i$  и  $R_j$  дефинише нелинеарном релацијом

$$(f_{ij}^n)_{ela} = \frac{4}{3} \left( \frac{1-\nu_i^2}{E_i} + \frac{1-\nu_j^2}{E_j} \right)^{-1} \sqrt{R_{ij}} (u_{ij}^n)^{3/2}$$

између нормалне контактне силе и максималног преклапања при чему су  $(E, \nu)$  комплети еластичних константи два материјала а  $R_{ij}^{-1} = R_i^{-1} + R_j^{-1}$  еквивалентни полупречник. Претходни израз за еластичну силу додиром је изведен под следећим претпоставкама: (i) лопте су идеално глатке, (ii) материјали су изотропно еластични, (iii) тангенцијална компонента еластичне контактне силе нема утицаја на нормалну, и (iv) преклапање је мало у односу на величину лопти. Овај закон је од суштинске важности за симулацију неких појава у зрнастим материјалима, попут простирања еластичних таласа. Међутим, треба имати у виду да је Херцов контактни модел адекватан само када су силе довољно мале да напон течења није досегнут нигде у контактном подручју. За сложеније случајеве развијени су контактни модели засновани на вискоеластичности и еластопластичности; (Luding, 2008) и тамо наведене референце.

При малим деформацијама, компактни геоматеријали се одликују линеарно еластичним одзивом. Сила којом два лоптаста зрнаца таквог материјала делују једно на друго може се разложити на еластичну нормалну силу,  $f_{ij}^n$ , и инкременталну тангенцијалну силу (смицања),  $f^t$ , које су у класичној интерпретацији повезане са релативним нормалним и инкременталним тангенцијалним померањима, тим редом, преко коефицијената нормалне и секантне тангенцијалне крутости ( $k^n$  и  $k^t$ ) тако да

$$(f_{ij}^n)_{ela} = -k^n u_{ij}^n, \quad f_{ij}^t = \{f_{ij}^t\}_{updated} - k^t \Delta u_{ij}^t.$$

Еластични одзив је дефинисан паром коефицијената ( $k^n$ ,  $k^t$ ). Инкрементална тангенцијална сила се ресетује на нулу,  $\{f_{ij}^t\}_{updated} = 0$ , кад год зрнаца могу да клизну релативно једно у односу на друго што се дешава приликом достизања граничне вредности Мор-Кулоновог типа

$$|f_{ij}^t| = f_{coh}^t + \mu_f f_{ij}^n$$

одређене, локалним вредностима коефицијента контактнoг трења,  $\mu_f$ , и кохезије,  $f_{coh}^t$  (која је, како ће бити речи у поглављу 4.1, по дефиницији једнака нули за некохезивне материјале). Критеријум је поопштен изразом (4.15).

Не може бити пренаглашено: ДЕМ је суштински дефинисан контактним интеракцијама. Уз наведена *елементарна* међудејства зрнаца у контакту, и оних која се односе на типичне класе материјала која ће бити изложена у наставку, треба поменути и сложеније контактне релације које узимају у обзир суптилне детаље веза попут капиларне кохезије (Yang and Hsiau, 2001), кохезије солида (Deleenne et al., 2004), пластичности (Shiu, 2008), пластичности са температуром и релаксацијом (Luding, 2004; Luding et al., 2005).

## 4.1 Имплементација ДЕМ на некохезивне материјале

Целокупно понашање некохезивних материјала може да се опише као контактни проблем великог броја тела, што их чини идеалним за ДЕМ. Стога је ДЕМ изузетно много коришћен за изучавање деформисања (тока) некохезивних материјала што се види из бројних референци попут (Cleary and Sawley, 2002; Alonso-Marroquin et al., 2008; Bierwisch et al., 2009; Donzé et al., 2008). Нумеричке технике за моделирање деформисања некохезивних материјала заснивају се на пионирском раду Кандала и Штрака (Cundall and Strack, 1979). Пошто су растресити материјали велики конгломерати зрнаца, овај модел се, у одсуству пријањајућих својстава, заснивао на основним одређујућим особинама ових дискретних елемената, тј., њиховим облицима, величинама и међусобним међудејствима. Појединачна зрнаца имају два облика кретања, трансляторно и обртно, односно три степена слободе у случају раванских проблема. Суштински дискретне, ДЕМ репрезентују растреситу материју као скупину зрнаца, па су технике рачунске имплементације засноване на наизменичним прелазима са примене другог Њутновог закона кретања (укључујући и услов динамичке равнотеже момената) и контактних релација сила-померање (нпр. линеарних, Херцових (Hertz)) на сваком поједином додиру.

Дакле, три главна аспекта ДЕМ су:

- (i) облик зрнаца и расподела њихових величина (физички параметри),
- (ii) контакт (конститутивно) понашање зрнаца (механички параметри; нпр., коефицијент контактнoг трења, контактна крутост у нормалном правцу, контактна затезна чврстоћа), и
- (iii) нумеричке технике за решавање система једначина кретања.

Постојање или непостојање способности материјала да носи на затезање у нормалном правцу представља суштинску разлику између кохезивних (пријањајућих) и некохезивних (непријањајућих, растреситих) зрнастих материјала. Аспект клизања ДЕМ модела узима у обзир ограничени смицајни отпор — дефинисан Кулоновим законом трења — који контакт пружа пре клизања.

Како системи зрнаца еволуирају, сударни, клизајући и котрљајући контакти доводе до појава сила и момената које ДЕМ тежи да прорачуна у циљу одређивања нових положаја. Зрнца, као основни градивни блокови ДЕМ модела, могу да буду насумично генералисани геометријски објекти<sup>12</sup> чија расподела величина (лог-нормална је чест избор) одражава природну хетерогеност система. Зрнца кружног облика су најједноставнија опција пошто само један параметар – полупречник – дефинише како њихову геометрију тако и једини тип контакта, који може релативно лако да се уочи. Сходно томе, кругови (стриктно, кружни ваљци) и лопте се често усвајају зарад своје једноставности у примени и, последично, мање рачунарске захтевности; међутим, њихова употреба има своју цену. Пре свега, они *значајно* потцењују котрљајући отпор и не могу да репродукују сложенија конфигурациона преуређења зрнаца као што је укупчавање (блокирање, закључавање, “particle interlock”) до кога типично долази код зрнаца сложенијег облика што природно резултира потцењивањем чврстоће. Додатни артефакат који се уводи коришћењем кружне/сферне геометрије је *нумеричка* порозност, која се разликује од стварне порозности. Све у свему, очигледно је да постоји потреба за дефинисањем односа између локалних / макроскопских конститутивних закона — зависно од нумеричке порозности — с једне, и облика дискретних елемената (зрнаца) с друге стране. Тренутно, приближна исправност макроскопског одзива обезбеђује се поступком калибрације.

Зрнца се често моделирају као крути елементи, али се дозвољава одређено преклапање међу њима како би се моделирала појава релативног

<sup>12</sup> Кругови / лопте (Cundall and Strack, 1979; Cundall, 1988), елипсе / елипсоиди (Ting, 1992; Rothenburg and Bathurst, 1992; Lin and Ng, 1997), конвексни многоуглови / полиедри (Cundall, 1988), суперквадрици (Hogue, 1998), или кластери мањих зрнаца произвољног облика (Jensen et al., 1999; Jing and Stephansson, 2008).

померања и локализоване контактне деформације (меки или глатки контакт). Методе контактне динамике засноване на „храпавим” (“non-smooth”) формулацијама, које искључују могућност додирног преклапања честица, нису обрађене у овом прегледу; заинтересовани читалац се упућује на прегледни рад (Donzé et al., 2008) и тамо наведене референце. Уведена претпоставка о крутости честице је логична када кретања дуж међуповрши представљају највећи део деформације у скупини зрнаца, што је типично за некохезивне (растресите) материјале попут песка. Који год модел да се усвоји или развије за конкретни проблем, он ће природно бити заснован на већем или мањем поједностављивању стварних физичких процеса на мезоскали, које је не само неизбежно него и пожељно, имајући у виду да многи детаљи на скали мезоконтакта не морају да буду од значаја за макроскопски одзив система као целине. Истраживачки изазови укључују не само реалистичне квантитативне симулације система великог броја зрнаца, уз могућности предвиђања одзива и њихову експерименталну валидацију, него и прелаз са микроскопских (стриктно, мезоскопских) контактних особина на макроскопске особине материјала. Ова, тзв. микро–макро, транзиција треба да омогући разумевање колективног понашања система великог броја зрнаца у функцији њихових контактних особина (Luding, 2008). Изазов, при томе, представља проблем сажимања обиља информација на нивоу контакта (нпр., оријентација контаката, густина расподела вероватноће контактних сила) на релевантне макроскопске величине повезане са модулима еластичности, анизотропијом, и нехомогеношћу контактне мреже. Мада су развијене многе технике микро–макро транзиције (видети нпр., Vermeer et al., 2001; Luding, 2004), потрага за макроскопским конститутивним моделима заснованим на микроскопским контактним параметрима је још увек у току.

#### **4.1.1 ДЕМ клизајући (слип) модел са трењем котрљања**

Суви грануларни материјали одликују се доминацијом некохезивних међучестичних дејстава кратког домета: еластичним или нееластичним контактним силама и контактним трењем између зрнаца која се додирују. Да бисмо формализам одржали што једноставнијим, основне једначине су представљене само за кружну геометрију. Најједноставнији реолошки модел оваквих контактних међудејстава представљен је на слици 4.2в са по једном опругом у правцима нормале и тангенте у тачки додира. Према сложенијем приступу Ксианга и коаутора (Xiang et al., 2009), сваки контакт између зрнаца може бити реолошки представљен подужним (у правцу нормале) Келвиновим елементом опруга-пригушивач и елементом опруга-пригушивач-клизач у

правцу тангенте (слика 4.2г). Додир зрнаца у нормалном правцу је идеално еластичан у случају међусобног притиска док је затезна чврстоћа некохезивних материјала по дефиницији једнака нули.

Генералисано контактано понашање зрнаца једноставног централно-угаоног типа међудејства (слике 3.14б и 4.1в представљају два изоморфна интеракциона модела) узима у обзир: нормалне интеракције, смичуће интеракције и клизање. У општем случају, силе које делују на честицу  $j$  укључују: гравитациону силу ( $m_j \mathbf{g}$ ), и нормалну ( $\mathbf{f}_{ij}^n$ ) и тангенцијалну ( $\mathbf{f}_{ij}^t$ ) компоненту еластичне контактне силе између честица  $i$  и  $j$  (слика 3.14б). Сходно томе, узимајући у обзир основни закон динамике, транслационо и обртно кретање зрнаца дефинисано је на следећи начин

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = m_i \mathbf{g} + \sum_{j=1}^{N_i} (\mathbf{f}_{ij}^n + \mathbf{f}_{ij}^t) \quad (4.1)$$

$$\frac{d\mathbf{L}_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} (\mathbf{T}_{ij}^t + \mathbf{T}_{ij}^r)$$

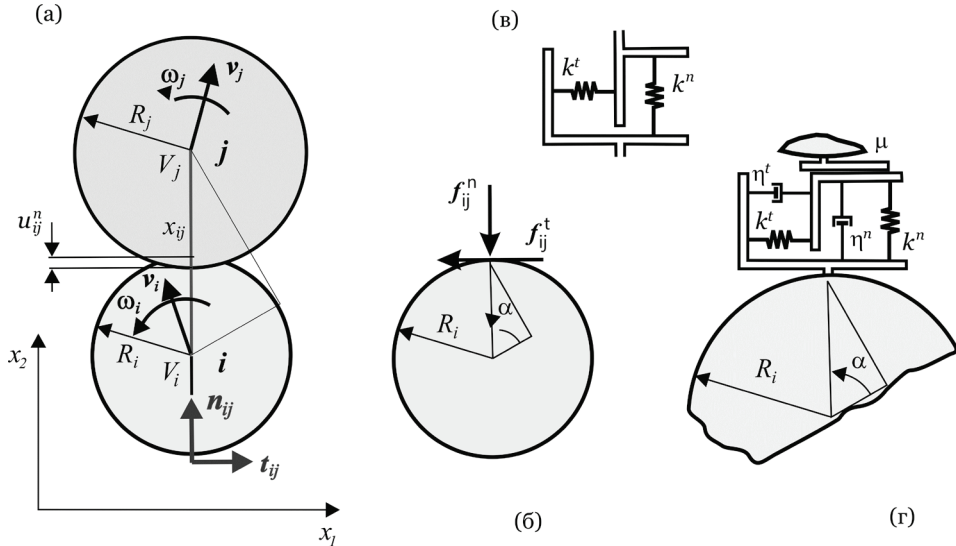
где су  $\mathbf{p}_i = m_i \mathbf{v}_i$  и  $\mathbf{L}_i = I_i \boldsymbol{\omega}_i$ , тим редом, количина кретања и момент количине кретања (кинетички момент, замах) зрнаца  $i$ , дефинисани на уобичајени начин у функцији масе, момента инерције ( $I$ ), линеарне ( $\mathbf{v}$ ) и угаоне ( $\boldsymbol{\omega}$ ) брзине.  $\mathbf{T}_{ij}^t$  је обртни момент тангенцијалне компоненте контактне силе, док је  $\mathbf{T}_{ij}^r$  обртни момент силе трења котрљања. (Уопштено узев, обртни моменти су последица трења, ваљања и увијања.) Силе и моменти су контролисани комплетом параметара, који доприносе генерисању веома сложених понашања на скали дискретног система.

У случају вишеструких међудејстава, међучестичне силе и обртни моменти се сабирају за  $N_i$  честица које се додирују са честицом  $i$ . Приликом израчунавања контактних сила, контакт између честица се моделира са паром *линеарних* реолошких модела типа опруга–пригушивач–клизач (Cundall and Strack, 1979) и у тангенцијалном и у нормалном правцу (слика 4.2). Вектор контактне силе  $\mathbf{f}_{ij}$ , који представља дејство честице  $j$  на честицу  $i$ , може да се разложи на тангенцијални (смичући) и нормални правац

$$\mathbf{f}_{ij} = \mathbf{f}_{ij}^n + \mathbf{f}_{ij}^t \quad (4.2)$$

$$\mathbf{f}_{ij}^n = -[k^n \mathbf{u}_{ij}^n + \eta^n (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij}], \quad \mathbf{f}_{ij}^t = \min\{-k^t \mathbf{u}_{ij}^t - \eta^t \mathbf{v}_{ij}^t, \mu_f |\mathbf{f}_{ij}^n| \mathbf{t}_{ij}\}$$

при чему обе компоненте силе укључују и дисипативне чланове.



**Слика 4.2.** Шематски приказ (сувог) контакта два кружна зрна. (а) Дефиниција мезо-параметара; (б) контактне силе; (в) основни интеракциони модел – везни контакт без пригушења; и (г) сложенији контактни модел који укључује пригушење и трење.

Дакле, линеарни модел опруга–пригушивач (4.2) (слика 4.2г) описује контакте зрнаца у правцима нормале као пригушене хармонијске осцилаторе (за разлику од чисто хармонијских приказаних на слици 4.2в) док у тангенцијалним правцима хрпави клизачи дефинишу минималну силу проклизавања. Релативне брзине зрнаца  $i$  у односу на зрнаца  $j$  у једначини (4.2) дефинисане су на следећи начин

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j + (\boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{R}_i - \boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{R}_j), \quad \mathbf{v}_{ij}^n = (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij}, \quad \mathbf{v}_{ij}^t = \mathbf{v}_{ij} - \mathbf{v}_{ij}^n \quad (4.3)$$

У једначинама (4.2) и (4.3)  $\mathbf{u}_{ij}^n$  и  $\mathbf{u}_{ij}^t$  представљају, тим редом, векторе нормалних и тангенцијалних померања између зрнаца  $i$  и  $j$ , а  $\mathbf{v}_{ij}$  је вектор релативне брзине зрнаца  $i$  у односу на зрнаца  $j$  у тачки додира,  $\mathbf{n}_{ij}$  је јединични вектор нормале у тачки додира дефинисан правом која повезује центре зрнаца  $i$  и  $j$ ,  $\mathbf{t}_{ij}$  је одговарајући јединични вектор тангенте управан на  $\mathbf{n}_{ij}$ ,  $\mathbf{v}_{ij}^n$  и  $\mathbf{v}_{ij}^t$  су релативне брзине у тачки додира у нормалном и тангенцијалном правцу,  $\mu_f$  је коефицијент трења клизања,  $k^n$  и  $k^t$  су константе (крутости) опруга између два зрнаца у нормалном и тангенцијалном правцу. У случају кохезивних материјала, коефицијент крутости у правцу нормале  $k^n$  има сталну вредност, али за некохезивне материјале он није константан јер зависи од померања у правцу нормале,  $k^n \propto \sqrt{u_{ij}^n}$  (Van Baars, 1996). Коефицијенти  $\eta^n$  и  $\eta^t$  односе се на



нормалне и тангенцијалне компоненте вискозног, контактнoг, дисипативног пригушења. Локално вискозно пригушење се често укључује у ДЕМ моделе ради дисипације кинетичке енергије (заједно са трењем клизања) како би се ефикасније досегла равнотежна конфигурација. (Слична техника користи се и код честичних модела, видети израз (5.1).) Важно је да се уочи да се сила смицања (4.2<sub>3</sub>) израчунава инкрементално: у првом тренутку додир зрнаца  $f'_{ij}$  се иницијализује са вредношћу једнакој нули, сваки следећи прираштај  $u'_{ij}$  (и, уопштено узев,  $v'_{ij}$ ) доводи до одговарајућег прираштаја силе смицања. Према томе,  $k'$  је тангенцијална крутост пошто повезује инкрементално померање и силу док је  $k^n$  секантна крутост пошто повезује укупно померање и силу.  $R_i$  је вектор положаја контактне тачке у односу на центар честице  $i$  са интензитетом једнаким полупречнику зрнаца,  $R_i$ , означеном на слици 4.2а.

Трење у тангенцијалном правцу доводи не само до сила него и обртних момената на зрнцима која се додирују. Отпори котрљању (ваљању) и увијању (Radjai et al., 1997; Suiker and Fleck, 2004; Bartels et al., 2005; Dintwa et al., 2005) могу да играју значајну улогу у динамици система зрнаца јер, типично, смањују слободу зрнаца у погледу обртања. Обртни момент услед тангенцијалне компоненте контактне силе је

$$T'_{ij} = f'_{ij} \times R_i \quad (4.4)$$

док се обртни момент услед трења котрљања у једначини (4.1) израчунава коришћењем конкретнoг модела трења.

Док су контактна оптерећења још увек предмет расправе у истраживачкој заједници, оптерећења услед трења се имплементирају на општеприхваћени начин који су дефинисали Кандал и Штрак још у повоју развоја ДЕМ (Cundall and Strack, 1979; Radjai et al., 1997; Luding, 2008). Како је илустровано на слици 4.2г, замишљена тангенцијална опруга спаја контактне тачке два зрнаца која се додирују и мења се како се зрнаца померају или обрћу једно у односу на друго. Мада у литератури постоји неколико напреднијих модела, основна замисао је остала непромењена уз надоградњу са различитим ефектима попут различитих статичких и динамичких коефицијената трења, хистерезиса, нелинеарности и сл. (видети, Luding, 2008, за листу референци).

Алонсо-Марокин и Херман (Alonso-Marroquin and Herrmann, 2005) дају готово идентичан приказ методологије ДЕМ с тим што су зрнаца у облику конвексних многоуглова (нпр., слика 4.10). За тетраедре, може да се консултује, нпр., Муњицина књига (Munjiza, 2004), а за кластере (Salot et al., 2009). Природно, сви облици зрнаца сложенији од кружних и лоптастих, захтевају много сложеније алгоритме, како откривања контакта тако и дефиниције

одговарајућих међудејстава (Kun and Herrmann, 2000; Alonso-Marroquin and Herrmann, 2005; Tykhoniuk et al., 2006), који неће бити предмет овога прегледа. Међутим, треба уочити да су сложени облици зрнаца захтевнији по питању рачунарске меморије и времена процесирања што умањује број зрнаца који могу да се користе при моделирању.

Однос (4.2<sub>2</sub>) између нормалне силе и нормалног релативног померања представљен је помоћу коефицијената еластичне крутости  $k^n$  и вискозности  $\eta^n$  (ако се узима у обзир); а у тангенцијалном правцу, прираштај силе смицања је повезан са променама у релативном померању преко коефицијената еластичне крутости  $k^t$  и вискозности  $\eta^t$  (ако се узима у обзир) (4.2<sub>3</sub>). У случају контакта са трењем (храпавог контакта), опруга у правцу нормале која делује притисно доводи до појаве силе смицања чија је јачина ограничена Кулоновим законом трења. Услед тога, када израчуната сила смицања досегне Кулонову граничну вредност, долази до проклизавања контакта и одговарајућег релативног померања (4.2<sub>3</sub>). Мезопараметри ДЕМ модела (видети, нпр., слику 4.2г) су у повоју њиховог развоја типично одређивани *ad hoc* поступком калибрације резултата нумеричких симулација стандардних лабораторијских тестова са експерименталним резултатима добијеним истим тим тестовима (нпр., видети (Magnier and Donzé, 1998)). Међутим, параметри ДЕМ модела одређени на тај начин зависили су од величине (типичне) честице. Таварез и Плеша (Tavarez and Plesha, 2007) су систематски приступили одређивању мезопараметара модела извођењем израза за коефицијенате еластичне крутости

$$k^n = \frac{E^{(2D)} t}{\sqrt{3}(1-\nu^{(2D)})}, \quad k^t = \frac{1-3\nu^{(2D)}}{1+\nu^{(2D)}} k^n \quad (4.5)$$

у функцији дебљине јединичне ћелије  $t$ , и еластичних константи изотропног материјала који су повезани са раванским коефицијентима  $E^{(2D)}$  и  $\nu^{(2D)}$  преко израза (1.4). Ваља напоменути да су изрази (4.5) изведени за густо-паковану, идеалну троугаону 2Д решетку (слика 1.2а) коришћењем услова еквивалентности померања. Исти аутори су показали да изрази (4.5) важе и за одговарајућу неправилну решетку добијену процесом консолидације ДЕМ кластера (Tavarez and Plesha, 2007). Такође, треба уочити да услов не-негативности коефицијента тангенцијалне крутости (4.5<sub>2</sub>) дефинише горњу међу за вредност Поасоновог коефицијента  $\nu^{(2D)} \leq 1/3$  што, сходно изразима (1.4), подразумева  $\nu_{\max} = 1/3$  за раванско стање напона,  $(2D) \equiv (\sigma)$ , и  $\nu_{\max} = 1/4$  за раванско стање деформација,  $(2D) \equiv (\varepsilon)$ . Слични изрази за одређивање микропараметара ДЕМ модела доступни су у литератури за различите просторне расподеле честица. На

пример, Масуја и коаутори (Masuya et al., 1994) и Потјонди и Кандал (Potyondy and Cundall, 2004) су извели везу  $k^n = E^{(2D)} t$ , која одговара простој кубној решетци; док су Ванг и Мора (Wang and Mora, 2008) обрадили шестоугаону густо-паковану и кубну површински-центрирану решетку, израз (4.7).

Једначине (4.1) се најчешће решавају различитим шемама коначних разлика. Алгоритми Верлеја и Стормера, сажето приказани у поглављу 2, често се користе у ту сврху. И закон сила-померање (4.2) и други Њутнов закон кретања (4.1) користе се у сваком рачунском циклусу ДЕМ модела. Да би се интеграцијом добило исправно кретање честица, временски корак мора да буде одабран пажљиво како је већ било речи у поглављу 2 (2.24). По аналогији између контакта (са крутошћу  $k^n$ ) и осцилујуће материјалне тачке масе  $m$ , може се показати да временски корак мора да буде изабран као мали део (обично десети или двадесети) полупериода  $\pi\sqrt{k^n/m}$  (Donzé et al., 2008). Нумеричка стабилност може бити, приде, побољшана коришћењем локалног, контактнoг, дисипативног пригушења као у једначинама (4.2).

Коначно, макроскопски конститутивни закони механике континуума повезују тензор напона и тензор релативне деформације, док мезоскопске контактне конститутивне релације повезују контактну силу са релативним померањем у тачкама додира зрнаца. Кројт и Ротенбург (Kruyt and Rothenburg, 1996) су извели микромеханичке изразе за тензоре напона и релативне деформације у функцији микроскопских контакт параметара. Исти аутори развили су и статистичке теорије еластичних модула за раванске скупине честица (1998).

#### 4.1.2 Примена ДЕМ на растресите грануларне материјале

Не треба да чуди да су у самом настанку ДЕМ (Cundall, 1971, 1978; Serrano and Rodriguez-Ortiz, 1973) коришћене за симулацију понашања растреситих грануларних материјала (попут песка) чија текстура (слика 4.3) може верно да буде приказана дискретним моделима са крутим зрнцима. Крута зрнаца ступају у међусобно дејство само преко меких контаката, који поседују коначне крутости у нормалном и тангенцијалном правцу (Van Baars, 1996). Механичко понашање ове скупине зрнаца описано је кретањем сваког зрнаца и силом и моментом који дејствују у сваком контакту. Њутнови закони кретања дају основне односе између кретања зрнаца и резултујућих сила и момената који доводе до тога кретања (Potyondy and Cundall, 2004). Деформација растреситих (некохезивних) скупина, као што је песак, добро је описана претпоставком о крутости зрнаца пошто до деформације долази првенствено услед клизања и

обртања зрнаца као крутих тела и услед стварања отвора и међусобног блокирања („закључавања”) зрнаца на међуграничним површима док су деформације појединачних зрнаца релативно мале. Уз то је дефинисан и коефицијент трења између зрнаца у циљу описивања односа између смичућих и нормалних сила по нестанку преклопа у неким контактима.

*Јенсен и коаутори* (Jensen et al., 1999, 2001) су, у циљу моделирања растреситих грануларних материјала, побољшали ДЕМ увођењем зрнаца произвољних облика добијених комбиновањем више елементарних, кружних зрнаца различитих величина у кластер који представља једну гранулу.

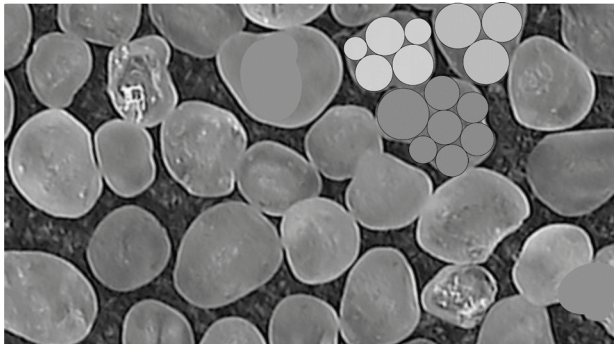
Нумеричке симулације теста смицања прстена (“ring shear test”), са различитим нормалним оптерећењима, уделом шупљина и површинским хрпавостима, обављене су у циљу упоређивања ефекта зрнаца сложених облика са кружним зрнцима. Резултати ових симулације јасно су указали на повећање смицајне чврстоће код скупина зрнаца *сложених* геометријских облика услед смањења њиховог обртања у поређењу са одговарајућим скупинама кружних зрнаца.

Још једна важна одлика кластер–гранула, које су Јенсен и коаутори (Jensen et al., 2001) увели у ДЕМ, је могућност експлицитног моделирања оштећења појединачних гранула. То је изведено допуштањем раскидања веза између елементарних зрнаца које сачињавају кластер у складу са критеријумом лома заснованом на раду клизања. Уколико кумулативни рад на поједином зрнциу које сачињава кластер досегне извесни праг, наведено зрнце се откида од кластера. Рачунарске симулације, које су имплементирале ово својство, откривале су јасно изражене зоне смицања без значајног смањења максималне смицајне чврстоће скупине гранула. Показано је да је ниво оштећења у вези са „угаоношћу кластера” односно изломљеношћу облика њихове контуре (“angularity of clusters”).

Све у свему, ДЕМ моделирање са могућношћу дробљења кластер–гранула сложеног облика је са успехом упоређено са истакнутим експерименталним трендовима доступним у литератури. ДЕМ симулације су дале детаљан приказ механизма одзива на нивоу гранула растреситог материјала. Најистакнутији недостаци моделирања хетерогених материјала коришћењем дробљивих агрегата произвољног облика насталих конгломеризацијом елементарних кружних зрнаца различитих величина поступком Јенсена и коаутора (Jensen et al., 1999) су што је неопходан велики број честица а хрпавост агрегата се тешко одређује и контролише.

Ченг и коаутори (Cheng et al., 2003) користили су сличан приступ у просторним ДЕМ симулацијама дробљивог тла коришћењем програма PFC<sup>3D</sup> (PFC – Particle Flow Code; Itasca<sup>TM</sup> Consulting Group). Честични агломерати су били састављени од лопти распоређених у кристалографској мрежи и везаних у кластере сложених облика у циљу моделирања мезоструктуре кварцног песка ( $\text{SiO}_2$ , silica) (слика 4.3). Вејбулова статистика чврстоће дробљења тих агломерата подешена је спрам експерименталних резултата добијених за зрна кварцног песка. Аутори су извршили симулацију троосног теста на кубном узорку састављеном од 389 кластера. Симулиране су различите путање оптерећења уз упоређивање нумеричких резултата са резултатима лабораторијских експеримената. Из симулације дробљивог тла коришћењем ДЕМ проистекли су вредни увиди у мезомеханичко порекло макроскопских појавних облика пластичности тла. ДЕМ су се, по први пут, показале способним да репродукују сложене макроскопске појаве пластичности тла попут чврстоће, дилатантности и критичних стања.

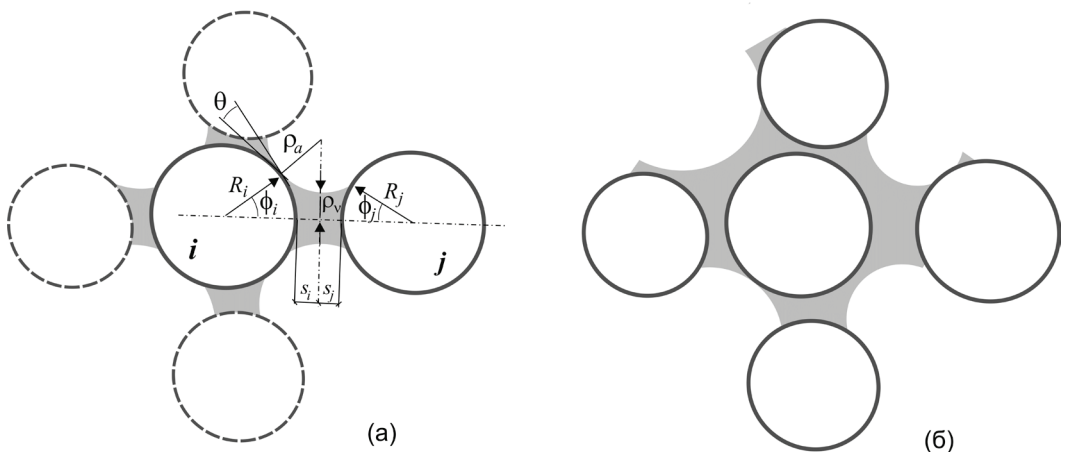
Изостављање малог удела (реда неколико процената) мезоелемената показало се способним да репродукује читаву расподелу притисних чврстоћа (нпр., Вејбулов модул 3 добија се изостављањем 20% мезоелемената.) Ова расподела чврстоћа међу зрнцима од суштинске је важности за рационално предстаљање макроскопског напонског одзива дробљивог тла. Ченг и коаутори су истакли да ДЕМ симулације могу да помогну разрешавању многих конфузија и нејасноћа насталих из концепата попут фазних трансформација, квази-стационарних стања, критичних стања, цикличне покретљивости, и растапања тла што би могло да доведе до побољшавања модела тла заснованих на механици континуума.



**Слика 4.3.** Грануларна структура кварцног песка. Зрнца песка, приказана на слици, су мезоскопски елементи структуре дробљивог тла које су Ченг и коаутори (Cheng et al., 2003) моделирали као агломерат везаних микроелемената лоптастог облика.

### 4.1.3 Примена ДЕМ на кохезивно тло

Тло је по својој природи прекидна средина прикладна за моделирање ДЕМ. Захваљујући томе сложени одзив тла — који се одликује нелинеарном релацијом између напона и деформације, дилатацијом (“dilation”) повезаном са средњим напоном, крто-дуктилном транзицијом, хистерезисом, нелинеарним обвојницама чврстоће, звучном емисијом,... — може успешно да се репродукује коришћењем ДЕМ (Potyondy and Cundall, 2004). Сложена структура тла је комбиновани ефекат геометријског распореда зрнаца, њиховог облика и састава, сила интеракције и порозности. Вода и ваздух су, уопште узев, присутни у порама (на свим просторним скалама) и играју важну улогу у понашању тла. Присуство воде доводи до малог пријањања између зрнаца тла које механичку структуру кохезивног тла чини много сложенијом у поређењу са сувим тлом. Уз нееластичне контактне силе и трење у тачкама контакта зрнаца (поглавље 4.1.1), на механички одзив кохезивног грануларног материјала утицај имају такође и капиларне и динамичке вискозне силе до којих долази услед постојања дискретних течних зона („мостова”) које премаштавају простор између зрнаца (слика 4.4). Ефекат капиларних сила зависи од степена zasiћења медијума.



**Слика 4.4.** Шематски приказ мостова течности између зрнаца тла. (а) Случај мале овлажености (малог zasiћења) грануларног материјала (кохезивног тла) при коме доминирају капиларне силе у изолованим мостовима течности. Означени су геометријски параметри модела (Yang and Hsiau, 2001; Zhang and Li, 2006) (б) Случај већег zasiћења течношћу при коме мостови течности нису успостављени искључиво између парова честица. У ДЕМ сваки мост течности повезује само два зрнаца.

Конвенционални ДЕМ модели (попут оног илустрованог на слици 4.2) превазилазе многе недостатке рачунских метода механике континуума (међу којима је најистакнутија МКЕ) које игноришу особености појединачних градивних ћелија материјала и претерано се ослања на поједностављене конститутивне једначине континуума. ДЕМ, насупрот томе, анализира материјал као прекидну средину односно вишефазну мешавину која се по својој природи састоји од изолованих (дискретних) структурних ћелија. Све врсте тла се састоје од дискретних састојка укључених у макроскопску мешавину те, самим тим, представљају материјале са изразито прекидном мезоструктуром и дисконтинуалним деформацијама за чију су анализу ДЕМ управо идеалан алат. Међутим, конвенционални ДЕМ модели (слика 4.2) нису оспособљени за репродуковање сложенијих аспеката понашања кохезивног тла. Због тога је било неопходно да се развијају специфични механички ДЕМ модели кохезивног тла узимајући у обзир ефекте течности на механичко понашање макроскопске мешавине. У циљу репродукције механичког понашања кохезивног тла често се користе три основна модела (PFC<sup>2D</sup>, Itasca<sup>TM</sup> Consulting Group): (i) модел линеарног контакта (слике 4.1б и 4.2в). (ii) модел клизања (слика 4.2г са или без вискозног пригушења), и (iii) модел паралелних веза (слика 4.5). Везе у ДЕМ могу да се замисле као нека врста лепила која спаја зрна која се додирују (Yang et al., 2011a). (Модел паралелних веза Потјондија и Кандала (Potyondy and Cundall, 2004) се разматра у поглављу 4.2.1.) Сходно томе, ефекат лепка код кохезивног тла узрокован је мостовима течности који имају себи-својствено привлачно–одбојно дејство због постојања капиларних и вискозних сила. Дакле, особеност кохезивног тла је управо да захтева додатно моделирање тих сила.

Јанг и Хсиау (Yang and Hsiau, 2001) су употребили ДЕМ за изучавање динамичког понашања влажних стаклених зрнаца у 2Д вибрирајућем грануларном постољу (тзв., тресачи, „шејкери”, “granular bed”). Вибрирајућа постоља су важни индустријски уређаји који се користе за мешање и сушење грануларних материјала као и за сортирање растреситих материјала према величини зрнаца (гранула). Оригиналноста рада Јанга и Хсиауа је у анализи утицаја течности која се налази у простору између зрнаца (тзв., интерстицијална течност), поготово њене динамичке силе, приликом коришћења вибрирајућих постоља за кохезивне материјале. Макроскопски одзив кохезивног тла зависи од мезоскопских механизма кретања зрнаца на које утиче количина течности. Пендуларно стање (од речи “pendulum” - клатно) представља најнижи ниво засићења влажних агломерата при коме, у међучестичном простору, долази до стварања мостова течности у којима се јављају статичке капиларне и динамичке вискозне силе које дефинишу привлачна и одбојна деловања мостова течности.

Међусобни однос капиларних и вискозних сила зависи од количине течности и дефинисан је капиларним бројем,  $C_a$  (Yang and Hsiau, 2001). Грубо узев, капиларне силе су доминантне ( $C_a < 0.001$ ) када су мостови течности, због мање овлажености, успостављени искључиво између парова честица (слика 4.4а) док утицај вискозних сила расте са повећавањем количине и вискозности течности ( $C_a > 1$ ). Симулациони модел, заснован на међудејствима између зрнаца приказаним на слици 4.2, користи поједностављени модел чврстоће течних мостова заснован на суперпозицији подмазивања и кружној апроксимацији (сугерисан сликом 4.4а). Јанг и Хсиау, су капиларну силу моделирали у облику

$$F_c = \pi \frac{\rho_v}{\rho_a} (\rho_a + \rho_v) \gamma_{sur} \quad (4.6a)$$

где  $\rho_a$  и  $\rho_v$  означавају главне полупречнике течног моста (редом, његовог лука односно врата), а  $\gamma_{sur}$  је површинско затезање. ДЕМ симулације троосног теста на притисак добро су репродуковале повећање смицајне чврстоће услед капиларних ефеката и њихов утицај на Мор-Кулонов критеријум лома (Donzé et al., 2008). Вискозну силу у течном мосту између лоптастих зрнаца су изводили коришћењем профила притиска из чега је, за случај релативно недеформабилних зрнаца, проистекао апроксимативни израз

$$F_v^{n,t} = 6\pi \left( \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \right)^{-2} \frac{1}{s_i + s_j} \eta_v v^{n,t} \quad (4.6b)$$

Претходни израз дефинише вискозну силу у течном мосту у два правца, нормалном (радијалном) и тангенцијалном, за две одговарајуће компоненте релативних брзина честица.  $\eta_v$  је коефицијент вискозности течности а геометријски параметри модела приказани су на слици 4.4а.

Користећи описани ДЕМ модел, Јанг и Хсиау су детаљно анализирали механизме дисипације енергије услед трења, нееластичности, вискозног отпора, и раскидања мостова течности као и различите детаље механизма одзива на нивоу зрнаца. У поређењу са мешавином сувих зрнаца под истим вибрационим условима, додавање течности у простор између зрнаца прво доводи до наглог пораста конвекционе брзине протока који је касније праћен поступним смањењем. За разлику од сувих грануларних материјала код којих трење доминира чврстоћом конвекционе ћелије, у случају влажних грануларних материјала и сила трења и сила у течном мосту доминирају конвекционом ћелијом. Аутори су приметили да сила у мосту течности, настала услед површинског затезања и вискозности, ступа у међусобно дејство са силом трења



у циљу одређивања величине конвекционе брзине протока (“convection flow rate”). Такође су сугерисали да капиларне силе у мостовима течности нису главни узроци дисипације енергије него вискозна сила, трење између зрнаца и нееластичност њихових судара. Јанг и Хсиау су утврдили да енергија дисипације монотонно расте са повећавањем бездимензионе запремине течности у простору између зрнаца (тзв., интерстицијалном простору) што може бити адекватно описано са степеном функцијом. Најзад, у циљу потврђивања важности капиларног броја  $C_a$ , аутори су обавили серију симулација са три различите вискозне течности и утврдили да  $C_a$  расте са повећавањем релативне брзине. Ако се релативна брзина одржава непроменљивом,  $C_a$  расте са повећавањем коефицијента вискозности и површинског затезања.

*Цанг и Ли* (Zhang and Li, 2006) су симулирали динамичко понашање кохезивног тла током процеса машинског ископавања коришћењем ДЕМ са моделом паралелних веза (поглавље 4.2.1). Аутори су користили комерцијални софтвер PFC<sup>2D</sup> (Itasca<sup>TM</sup> Consulting Group) који има могућност репродуковања међучестичних сила које се јављају због присуства воде (уз контактне силе и силе трења између честица тла за које је коришћен конвенционални МКЕ модел). Избору софтвера претходила је детаљна анализа ефеката интерстицијалне течности у агломерату (скупини) зрнаца који, у зависности од степена засићености, доводе до различитих међучестичних дејстава. Постојање дискретних мостова течности у простору између зрнаца кохезивног тла, доводи до капиларних и вискозних међучестичних сила које су главни утицајни фактори на макроскопско понашање кохезивног тла. Капиларне силе су статичке по својој природи јер су последица редукованог Лапласовог (Laplace) хидростатичког притиска  $\Delta P_L = \gamma_{sur} (1/\rho_\alpha - 1/\rho_\nu)$  и површинског затезања у мостовима течности,  $\gamma_{sur}$ . Насупрот томе, вискозне силе су динамичке јер се јављају као последица протока течности у нормалном (радијалном) и смичућем правцу међучестичног простора и пропорционалне су одговарајућим компонентама брзина ( $F_v^n \propto v^n, F_v^t \propto v^t$ ), како је већ било речи (4.66). Резултати симулација су указали да паралелне везе иницијално доводе до гомилања честица у кластере, који касније током ископавања бивају здробљени кашиком булдожера у фрагменте различитих величина. Резултати рачунарских симулација су се слагали са притисним оптерећењима, комадањима и раздвајањима стварних кохезивних тла подвргнутих истим спољним оптерећењима.

## 4.2 Имплементација ДЕМ на кохезивне материјале

Дефинишућа особина кохезивних материјала је способност преношења затежуће нормалне силе између везаних зрнаца. Према томе, Кандалов првобитни концепт (Cundall, 1971, 1980) је проширен како би узео у обзир затезну чврстоћу међуграничних површи (међуповрши) (Zubelewicz and Mroz, 1983; Plesha and Aifantis, 1983; Zubelewicz and Vařant, 1987). Како би се то постигло, ДЕМ модели су обично прилагођени за чврсте материјале додавањем везе у тачки додира два зрнаца, која имитира присуство матрице причвршћене за зрнаца, која је у стању да подари кохезију цементним грануларним материјалима (Torin, 2007). Овај приступ је коришћен за моделирање најразличитијих класа цементираних гранула које формирају хетерогене макроскопске материјале попут седиментних стена, бетона, керамика, земљишта испуњених малтером (“grouted soils”), чврстих ракетних горива и експлозива, и неких биоматеријала. Сви ови материјали, у принципу, могу бити представљени једноставним моделом приказаним у поглављу 4.1 (слика 4.2) уз важан услов да у случају кохезивног (пријањајућег) контакта опруга у правцу нормале пружа отпор и на притисак и на *затезање*. Ако се, током процеса деформисања, везани контакт између два зрнаца раскине у складу са неким прописаним критеријумом лома, контакт постаје чисто фриксиони (као што је илустровано сликом 4.2в), уколико уопште опстане (уколико два зрнаца притискају једно друго). Што се тиче једноставног централно-угаоног међудејства, представљеног сликом 4.1б и генерализованог у поглављу 5.1.1, као комбинације вискоеластичног модела контактне чврстоће (представљеног Келвиновим елементом) и клизног (“slip”) модела, једина разлика у некохезивним и кохезивним применама је способност преношења силе затезања у правцу нормале.

ДЕМ модели допуштају зрнцима кохезивног материјала да буду међусобно везана али и раздвојена, у случају да критеријум раскида везе буде задовољен. У случају деловања спољашњег оптерећења таквог да или затезна чврстоћа или гранична деформација или енергија лома буду превазиђени, долази до раздвајања веза између зрнаца и настанка прелине на скали модела (микро, мезо). Стога, модови оштећења и њихова међудејства природно произилазе из процеса поступног раздвајања зрнаца. Према томе, ДЕМ може да симулира како кретање појединачних зрнаца тако и понашање запремине материјала коју сачињава скупина зрнаца повезаних одређеним конститутивним законима у тачкама додира. У ДЕМ моделу, континуумско понашање запреминског материјала одређено је само међудејствима зрнаца која га сачињавају (Itasca PFC<sup>2D</sup> Manual; Potyondy and Cundall, 2004). Сходно томе,

контактне особине су — уз величину и облик зрнаца — доминантни параметри у ДЕМ анализи.

Два различита приступа узимања у обзир кохезивног међудејства између ивица два суседна зрнаца су:

- (i) ДЕМ проширен гредним елементима (постављеним између центара зрнаца; Kun and Herrmann, 1996; D'Addetta et al., 2001; Wang and Mora, 2008), и
- (ii) ДЕМ проширен међупросторним елементима (дефинисаним на ивицама зрнаца; Kun et al., 1999).

Као пример првог приступа, Ванг и сарадници (Wang et al., 2006; Wang and Mora, 2008) су аналитички изучавали еластичне особине кружних/лоптастих зрнаца распоређених у 2Д/3Д решетке. Њихов модел допушта шест облика релативног померања између лоптастих зрнаца; у односу на референтну осу која спаја центре две суседне лопте (правац нормале) то су: централно и две компоненте смичућег померања (редом, дуж/управно на осу, или другим речима, у правцу нормале/тангената), увијање (око референтне осе), две компоненте савијања (у односу на две осе смицања управне на референтну осу). Коришћењем принципа еквивалентности деформационих енергија (3.1), аутори су извели аналитичке изразе којима повезују вредности коефицијената крутости на мезоскали (на скали честице;  $k^n$ ,  $k^t$ ,  $k^b$ ,  $k^{bt}$ ) у зависности од вредности задатих макроскопских еластичних константи (модула еластичности и Поасоновог коефицијента у различитим правцима;  $E$  и  $\nu$ , у изотропном случају) на сличан начин како је приказано у поглављу 3. Пошто је кроз целу монографију нагласак стављан на 2Д формулације, овде ће, у описном облику, бити истакнута два просторна периодична аранжмана честица које су Ванг и Мора обрадили: шестоугаони густо-паковани и кубни површински-центрирани. Резултати наведених аутора указују да коефицијент крутости у правцу нормале зависи од модула еластичности и величине честица а да је однос тангенцијалне (смичуће;  $k^t$ ) и нормалне крутости ( $k^n$ ) зависан од Поасоновог коефицијента. На пример, у случају кубне површински-центриране решетке

$$k^n = \frac{E}{\sqrt{2}(1-2\nu)}R, \quad k^t = \frac{1-3\nu}{1+\nu}k^n \quad (4.7)$$

Обе наведене густо-паковане 3Д решетке, у општем случају, одговарају ортотропном чврстом материјалу под условом да се међусобне везе између свих парова зрнаца одликују истим комплетом коефицијената крутости и да су крутости у два смичућа правца идентичне ( $k^{t2} = k^{t1} = k^t$ ). Ванг и Мора су, такође, показали да се макроскопска изотропна еластичност добија само под условом да је  $k^t = k^n$ , што је прилично ограничавајући услов који одговара нефизичкој

вредности Поасоновог коефицијента,  $\nu = 0$ , за већину инжењерских материјала. С друге стране, коефицијенти крутости на савијање и увијање зависе како од нормалних и тангенцијалних крутости (сходно томе и од макроскопских еластичних константи,  $E'$  и  $\nu'$ ) тако и од величине честице ( $R$  – полупречник лоптасте честице):  $k^b \propto E' R^3$  и  $k^{bt} \propto E' R^3$ . Дакле, уопште узев, због спреге са  $k^n$  и  $k^t$ , коефицијенти крутости на савијање и увијање на мезоскали утичу на укупну деформациону енергију и макроскопску крутост на савијање, међутим, њихов допринос опада са смањењем величине зрна ( $R \rightarrow 0$ ) и асимптотски тежи механици континуума. Важно је да се уочи да мада  $k^n$  и  $k^t$ , генерално, немају значајан утицај на макроскопско еластично понашање у случају малих зрнаца, њихов утицај се не може занемарити са становишта критеријума лома и ефеката локалних токова напона. У противном може доћи до појаве нереалистичних образаца прслина како је већ раније примећено у (Schlangen and Garboczi, 1997) и дискутовано у поглављу 3.3.1 (слика 3.15). Ванг и Мора (Wang and Mora, 2008) су обавили виртуелне тестове ради валидације добијених аналитичких израза који имају теоријске импликације за калибрацију крутости опруга у ДЕМ.

ДЕМ приступ дискретизацији рачунског домена представља најизразитију предност у односу на традиционалне методе рачунарске механике континуума, пошто се уобичајени проблеми (попут динамичког одзива композита, сингуларитета на врховима прслина, сам критеријум формулације прслине) могу избећи захваљујући природно–прекидном представљању мезоструктуре материјала (Yang et al., 2011b).

#### 4.2.1 Примена ДЕМ на стене

Механика стена је једна од дисциплина из које су поникле ДЕМ. Основна замисао је репродукција квази-кртог понашања стена симулирањем зачећа, раста и међудејстава локалних прслина. Мада стене не изгледају на први поглед као грануларни материјали, главна особеност многих типова стена је испуцалост и висок степен хетерогености њихове структуре (на разним нивоима) због чега се могу посматрати као скупине дискретних јединица (монолита) међусобно везаних различитим моделима кохезивних сила или везивних дејстава. Стога механичко понашање целине еволуира из колективног доприноса ових дискретних јединица током оптерећења где раздвајање две дискретне јединице имитира елементарни догађај мезо-оштећења — основни градивни блок сложених појава еволуције оштећења. Детаљни прегледи у референцама (Jing, 2003; Jing and Stephansson, 2008) обухватају технике,

напретке, проблеме и тадашња предвиђања будућих праваца развоја у рачунском моделирању стена. Уопште узев, у 2Д-ДЕМ симулацијама стена, зрна представљају оделите стенске масе нивоа тона и метара која могу бити моделирана са насумично генерисаним круговима, елипсама или конвексним многоугловима међусобно спојеним увођењем одређене везе у контактну област. У овом поглављу тежиште излагања ће бити на паралелној вези илустрованој сликом 4.5. Облици и начин паковања зрнаца имају далекосежне ефекте на расподелу и интензитет сила међудејстава. Чврстоћама веза може бити допуштено да се међусобно разликују од контакта до контакта што може да представља још један извор хетерогености у симулираном материјалу. Најрепрезентативнији експлицитни ДЕМ метод у механици стена је Кандалов метод „дистинктних” (оделитих) елемената (Cundall, 1980, 1988) са четвороуганим /призматичним блоковима развијеним у рачунарским програмима UDEC и 3DEC (Itasca<sup>TM</sup> Consulting Group, [www.itascacg.com](http://www.itascacg.com)). Једноставнији ДЕМ — метод везаних честица — заснован на крутим честицама кружног/лоптастог облика изложен је у складу са изворним методолошким приступом Потјондија и Кандала (Potyondy and Cundall, 2004). Овај приступ моделирању поопштен је у (Potyondy, 2014) и развијан годинама кроз комерцијалне програмске пакете рачунарске механике прекидних средина PFC<sup>2D</sup> и PFC<sup>3D</sup> (Itasca<sup>TM</sup> Consulting Group). Холт и коаутори (Holt et al., 2005) извршили су поређење резултата лабораторијских експеримената и ДЕМ симулација механичког понашања стена.

*Потјонди и Кандал* (Potyondy and Cundall, 2004) осмислили су модел везаних зрнаца (за који се често користи и назив модел паралелних веза) зарад симулације стенских маса и других хетерогених, кртих материјала прекидне мезоструктуре. У изворној варијанти модел се састојао од густо-паковане скупине (кружних / лоптастих) крутих зрнаца различитих величина међусобно везаних у тачкама додира уметањем паралелних веза које представљају кохезивно деловање везива. Крута зрнаца ступају у међусобно дејство само преко меких контаката (тј., дозвољена су мала преклапања) који поседују ограничене нормалне и смичуће крутости. Главне особине модела су овде укратко сажете, док је детаљан опис изложен у изворној референци (Potyondy and Cundall, 2004). Модел је у потпуности динамички и, сходно томе, способан да опише сложене појаве еволуције оштећења у стенама попут настанка, раста, повезивања и срастања микропрелина из којих произилазе оштећењем-изазвана анизотропија, хистерезис, дилатантност, посткритично омекшавање, повећавање чврстоће са бочном стешњеношћу. У време настанка овога рада, механика прекидних средина је још била у повоју у поређењу са механиком континуума. Стога су

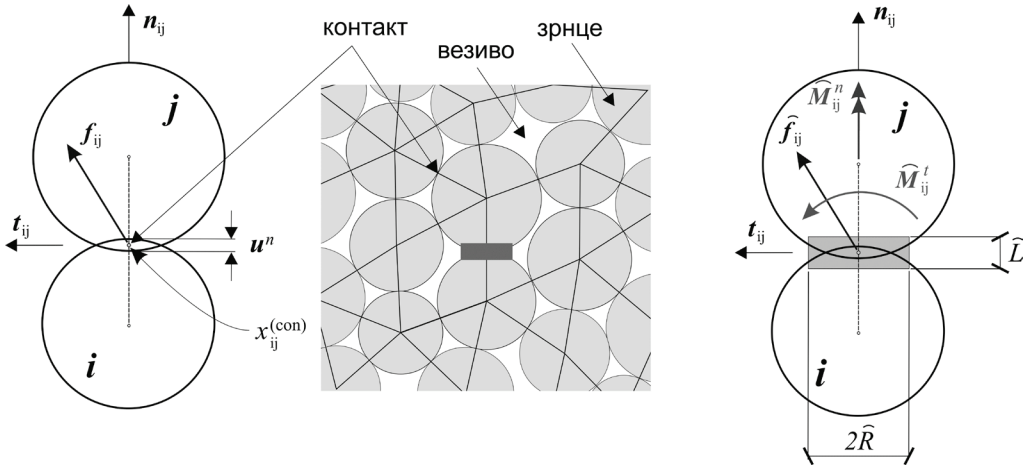
аутори посветили велику пажњу систематском развоју одговарајуће методологије моделирања која укључује не само пажљиво виртуелно експериментисање и квалитативно упоређивање резултата са физички опаženим механизмима на микро и макро скали него и квантитативно упоређивање са експериментално измереним особинама.

Важно је уочити да, за разлику од неких других рачунских метода у механици прекидних средина, појам „зрнце” у овом контексту означава честицу која не само да има коначну масу него и заузима коначни *део* простора. Полупречници кружних зрнаца су извучени из униформне расподеле ограничене са  $R_{min}$  и  $R_{max}$  а густо паковање је добијено праћењем одговарајуће процедуре генерисања материјала. Крута зрнца могу независно да транслирају и да се обрћу и да ступају у међудејства преко меких контаката (слика 4.5). Зрнца могу да делују једно на друго искључиво преко контаката који се, имајући у виду правилни облик зрнаца, састоји увек од само две честице. Претпоставља се да су преклапања зрнаца мала у поређењу са њиховом величином како би се осигурало да се контакти јављају „у тачки”. Комплет мезоособина се састоји од параметара крутости и чврстоће зрнаца и веза. Везе између зрнаца су коначне крутости и ограничене чврстоће. Скалирајући односи модул–чврстоћа зрнаца и цемента, који укључују величину зрнаца, обезбеђују *независност* макроскопских еластичних константи од величине зрнаца. Зависност сила-померање у сваком контакту повезује релативна померања зрнаца са силама и моментима који делују на свако од њих.

Динамичко понашање се прорачунава коришћењем алгоритма коначних разлика који су свеобухватно изложили Кандал и Харт (Cundall and Hart, 1992). ДЕМ симулациона техника заснива се на претпоставци да је временски корак довољно мали да се, у једном циклусу прорачуна, поремећаји не могу протирати даље од првих суседа сваког зрнаца. Потјонди и Кандал (Potyondy and Cundall, 2004) су детаљно разматрали предности експлицитне нумеричке шеме. Пошто је ДЕМ представља потпуно динамичку формулацију, *по потреби* може да се уведе пригушење ради дисипације кинетичке енергије. Ово пригушење имитира микроскопске процесе у стварном материјалу, попут унутрашњег трења или расипања таласа, у којима се трансформише („губи”) део кинетичке енергије.

На слици 4.5 илустрован је начин на који модел везаних зрнаца симулира механичко понашање скупине зрнаца повезаних паралелним везама. Укупна сила и момент који делују у сваком контакту састоје се од *контактне* силе  $f_{ij}$ , која је резултат преклапања зрнаца и представља понашање *зрнаца* (једначина (4.2) са или без пригушења), и силе и момента,  $\hat{f}_{ij}$  и  $\hat{M}_{ij}$  које преноси

паралелна веза и представљају понашање *везива*. Ове величине доприносе резултантној сили и моменту који делују на оба зрнаца и представљају улазне податке за рачунску интеграцију (другог Њутновог закона за динамички систем) коришћењем експлицитне шеме коначних разлика како би се добиле трајекторије зрнаца.



**Слика 4.5.** Модел паралелних веза за симулацију хетерогених материјала састављених од цементираних зрнаца. Уопштено узев, модел је дефинисан густином зрнаца, обликом зрнаца, расподелом величина зрнаца, паковањем зрнаца и мезо-особинама зрнаца и везива. Потјонди и Кандал (Potyondy and Cundall, 2004) су у основи користили кружна / лоптаста зрнаца што одговара програмима PFC<sup>2D</sup> / PFC<sup>3D</sup> (Itasca Consulting Group)

Конститутивне релације модела паралелних веза (система зрнаце–везиво) дефинисане су изразима (4.9–11) и илустроване сликом 4.5. Понашање зрнаца описано је истим некохезивним међудејством са трењем (поглавље 4.1.1 за случај без контактнoг пригушења) дефинисаним са нормалним и смичућим крутостима,  $k^n$  и  $k^t$ , и коефицијентом трења,  $\mu_f$ , за свако засебно зрнаце. Овај контакт се формира чим дође до преклапања два зрнаца а контактна крутост везе ( $ij$ ) одређена је серијском везом појединачних крутости зрнаца ( $i$  и  $j$ )

$$k_{ij}^n = \frac{k_i^n k_j^n}{k_i^n + k_j^n}, \quad k_{ij}^t = \frac{k_i^t k_j^t}{k_i^t + k_j^t}$$

Преклоп, мада физички недопуштен, имитира, у извесном смислу, локалну деформацију зрнаца (поготово када додирне површине нису глатке него хрпаве). Вектор контактне силе може да се разложи на нормалну и смичућу компоненту као што је већ приказано (једначина (4.3)). Контактнo понашање зрнаца је већ разматрано у поглављу 4.1.1: уколико је преклоп  $u_{ij}^n \leq 0$ , постоји

*размак*, и нормална и смичућа сила су једнаке нули; уколико је  $u_{ij}^n > 0$ , клизање се дефинише на уобичајени начин, помоћу Кулоновог закона. При томе, за разлику од нормалне силе (која је у сваком тренутку пропорционална величини преклопа са секантном крутошћу,  $k^n$ , као коефицијентом пропорционалности), смичућа сила се рачуна на инкрементални начин: по успостављању контакта  $f^t$  се иницира на нулу; из сваког накнадног повећања међусобног померања зрнаца у правцу тангенте,  $u^t$ , проистиче прираштај смичуће силе,  $\Delta f^t = -k_i^t \Delta u^t$ , где је  $k_i^t$  тангенцијална крутост (за разлику од секантне од које је разликује доњи индекс). Контактна померања се израчунавају у сваком прорачунском циклусу на основу контактне брзине која зависи од транслационих и угаоних брзина зрнаца; видети изворну референцу (Potyondy and Cundall, 2004) за детаље. Треба уочити да постојање паралелне везе не спречава клизање пошто еластична веза међудејства делује *паралелно* са делом међудејства сила–померање који се односи на контакт зрнаца.

Понашање везива дефинисано је са пет параметара: нормални и смичући коефицијент крутости ( $\hat{k}^n, \hat{k}^t$ ), затезна и смицајна чврстоћа ( $\hat{\sigma}_m, \hat{\tau}_m$ ), и множитељ  $\hat{\lambda}$  који дефинише пречник паралелне везе у зависности од пречника зрнаца у контакту. Међудејство зрнаца представљено је са укупном силом и моментом,  $\hat{f}_{ij}$  и  $\hat{M}_{ij}$ , које преноси паралелна веза. Сила и момент могу да се пројектују на правце нормале и тангенте на следећи начин

$$\hat{f}_{ij} = \hat{f}_{ij}^n \mathbf{n}_{ij} + \hat{f}_{ij}^t \mathbf{t}_{ij}, \quad \hat{M}_{ij} = \hat{M}_{ij}^n \mathbf{n}_{ij} + \hat{M}_{ij}^t \mathbf{t}_{ij} \quad (4.9)$$

где  $\hat{f}_{ij}^n$ ,  $\hat{f}_{ij}^t$  и  $\hat{M}_{ij}^n$ ,  $\hat{M}_{ij}^t$  означавају нормалне и смичуће силе односно моменте. У тренутку иницијализације паралелне везе  $\hat{f}_{ij}$  и  $\hat{M}_{ij}$  добијају нулту вредност, сваки следећи релативни прираштај транслације и угла обртања ( $\Delta u_{ij}^n$ ,  $\Delta u_{ij}^t$ ,  $\Delta \theta_{ij} = (\omega_j - \omega_i) \Delta t$ ) доводи до прираштаја компонената сила и момента (приказаних на слици 4.5)

$$\Delta \hat{f}^n = \hat{k}^n A \Delta u^n, \quad \Delta \hat{f}^t = -\hat{k}^t A \Delta u^t, \quad \Delta \hat{M}^n = -\hat{k}^s J \Delta \theta^n, \quad \Delta \hat{M}^t = -\hat{k}^n I \Delta \theta^t \quad (4.10)$$

који се додају тренутним вредностима. Геометријске особине попречног пресека паралелне везе у изразу (4.10) — површина ( $A$ ), аксијални ( $I$ ) и поларни ( $J$ ) момент инерције — дефинисане су у изворној референци (Potyondy and Cundall, 2004) за равански (PFC<sup>2D</sup>) и просторни (PFC<sup>3D</sup>) модел.

Максимални нормални и смичући напони који делују на ободима паралелне везе израчунавају се коришћењем теорије греда



$$\bar{\sigma}^{\max} = -\frac{\hat{f}^n}{A} + \frac{|\hat{M}^t|}{I} \hat{R}, \quad \bar{\tau}^{\max} = \frac{|\hat{f}^t|}{A} + \frac{|\hat{M}^n|}{J} \hat{R} \quad (4.11)$$

Уколико вредност максималног нормалног напона (4.11<sub>1</sub>) пређе затезну чврстоћу ( $\bar{\sigma}^{\max} \geq \bar{\sigma}_m$ ) или вредност напона смицања (4.11<sub>2</sub>) пређе смицајну чврстоћу ( $\bar{\tau}^{\max} \geq \bar{\tau}_m$ ), паралелна веза се раскида и уклања из мреже што одговара настанку, у првом случају затезних, а у потоњем, смицајних мезопрлина. Пуцање везива своди контакт одговарајућег пара зрнаца на обично некохезивно међудејство са трењем.

Потјонди и Кандал (Potyondy and Cundall, 2004) су користили овај модел ДЕМ за симулацију двоосног теста и Бразилског теста на граниту и демонстрирали могућности модела да репродукује бројне карактеристике понашања стена као што су лом, анизотропија изазвана оштећењем, дилатантност, омекшавање, и очвршћавање изазвано бочном стешњеношћу (бочним притиском, “confinement-driven strengthening”). Еволуција оштећења експлицитно је представљена као процес прогресивне акумулације раскинутих веза; „нису потребне никакве емпиријске релације ради дефинисања оштећења или квантификовања његовог ефекта на понашање материјала” (Potyondy and Cundall (2004)). Добијени обрасци распрострањања оштећења добро се слажу са експерименталним опажањима која се односе на динамику акумулације оштећења и откривају неке суптилне детаље утицаја бочне стешњености. Наиме, резултати симулације сугеришу да је ефекат бочне стешњености на процес акумулације оштећења израженији у области омекшавања него у области очвршћавања. Што се тиче критичне тачке која одговара максимуму криве напон-деформација, аутори су опазили да је одговарајући скаларни параметар оштећења ( $\propto n_{peak}$ , у нотацији Крајчиновића и Риналдија из поглавља 3.1.3) готово идентичан у широком распону вредности бочне стешњености. Међутим, до највећег оштећења долази у посткритичном режиму (омекшавања) при бочном ширењу (бубрењу) узорка које је, природно, веома осетљиво на деловање бочног притиска. За ово је, делом, одговорно и повећање односа броја смицајних наспрам затезних мезопрлина. Аутори су извели закључак да ограничавање бочног ширења (бочна стешњеност) умањује силе затезања у правцу управном на осу узорка дуж које делује сила притиска што фаворизује појаву смицајних мезопрлина. Током Бразилског теста (једноосно притискање кружног диска), запажено је да након стварања клинова мезопрскотина у два зонама додира са плочама (преко којих се наноси притисак) из једног од клинова изниче макропрлина која, коначно, прецепљује диск дуж правца нападне линије силе мање или више равно или заталасано-степеничасто. Макропрлина се састоји из затезних мезопрлина и вођена је деформацијом

која подсећа на први мод лома. Ово опажање је навело ауторе на закључак да је Бразилска чврстоћа израчуната на основу резултата симулација у вези са ломном жилавошћу материјала и да не одговара Бразилској чврстоћи стена добијеној експериментима.

Што се тиче могућности модела да репродукује макро-особине гранита; модул еластичности, Поасонов коефицијент и једноосна притисна чврстоћа су репродуковани са задовољавајућом тачношћу (поготово у случају 3Д модела) уз мање расипање података него при лабораторијским мерењима (Potyondy and Cundall, 2004). С друге стране, затезна чврстоћа и угао трења добијени симулацијама показују велика неслагања са експерименталним резултатима који се не могу оправдати ни расипањем података ни величином зрнаца (просторном резолуцијом ДЕМ). Нарочито упада у очи изразито неслагање чврстоћа при постојању бочне стешњености (изазване деловањем бочног притиска). Потјонди и Кандал су детаљно разматрали и ефекат величине зрнца (дат минималним пречником  $2R_{min}$  као дефинишућом дужинском скалом система) на особине материјала на макроскопској скали (макро-особине). Показали су да величина зрнца није само независни параметар модела који контролише резолуцију ДЕМ него и суштински део карактеризације материјала спрегнут са макро-особинама затезне чврстоће и ломне жилавости. Еластичне константе су у доброј мери независне од величине зрнаца (у смислу могућности конвергенције, видети табелу 2 у изворној референци (Potyondy and Cundall, 2004)) због скалирања крутости паралелне везе у функцији величине зрнца. Једноосна притисна чврстоћа (“unconfined compressive strength”) изгледа да показује сличан тренд објективности модела (у смислу независности од величине зрнца) али на основу резултата симулација није било могуће донети закључак по питању ефекта величине зрнаца на угао трења и кохезију. Једноосна чврстоћа на затезање при бразилском тесту (“Brazilian strength”) приказује јасну зависност од величине честице као и ломна жилавост при првом моду (отварање).

$$K_{1c} = \sigma'_m \sqrt{\pi R_z}$$

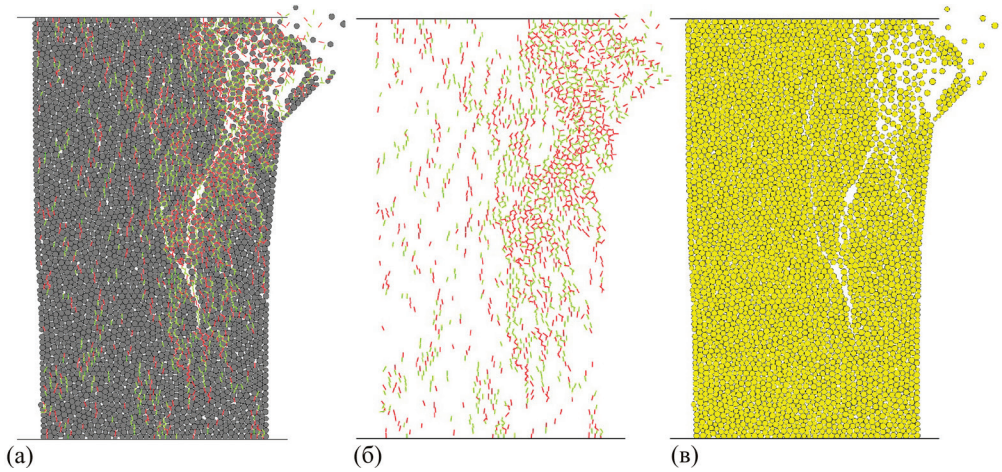
где је  $\sigma'_m = f_m^n / 2R_z t$  затезна чврстоћа модела;  $f_m^n$ , критична сила при којој долази до раскидања везе између пара зрнаца (тзв., затезна чврстоћа везе у изворној терминологији);  $R_z$ , полупречник кружног зрнца; а  $t \equiv 1$  за 2Д моделе. (Претходни изрази изведени су за паковање ваљкастих зрнаца кружног попречног пресека и висине  $t$  које одговара квадратној мрежи на слици 3.2 без дијагоналних веза и са  $r_0 = 2R_z$ .) Ово опажање, да величина зрнца која контролише резолуцију модела *не може* бити изабрана произвољно пошто је

спрегнута са ломном жилавошћу материјала (израженом критичним фактором интензитета напона;  $K_{Ic}$ ), није изненађујуће стога што сама дефиниција фактора интензитета напона подразумева унутрашњу дужинску скалу. Мун и коаутори (Moon et al., 2007) су развили општи поступак за израчунавање ломне жилавости случајног паковања зрнаца неравномерних величина.

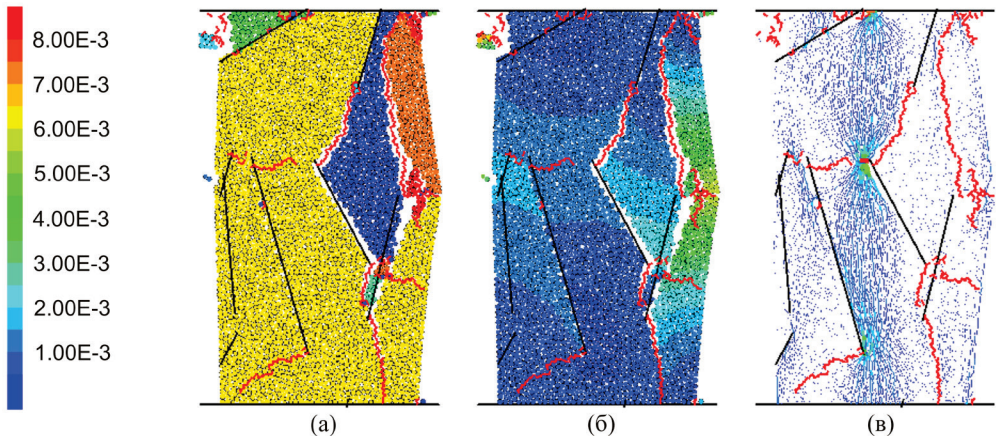
Потјонди и Кандал (Potyondy and Cundall, 2004) су користили модел паралелних веза за симулацију двоосног теста гранитног узорка ради испитивања утицаја бочне стешњености на процес акумулације оштећења. На сликама 4.6 и 4.7 приказани су резултати симулација на једноосни притисак контролисаним померањем горње и доње стране узорка. Коришћена су два различита правоугаона узорка: (i) без (слика 4.6), и (ii) са постојећим (“pre-existing”, префабрикованим) косим прслинама (слика 4.7). На слици 4.6 истакнуте су две врсте мезопрслина у зависности од начина настанка: затезањем (црвена боја), односно, смицањем (зелена) суседних зрнаца. Уочљиво је срастање мезопрслина у доминантну вертикалну макропрслину и бочно прскање услед развоја локалне макропрслине у близини слободне бочне ивице.

На слици 4.7, мрежа постојећих макропрслина означена је црном бојом. Под дејством аксијалног притиска у вертикалном правцу у условима непостојања стабилизирајућег ефекта бочне стешњености (бочног притиска), на врховима постојећих прслина настају, и почињу да расту, Грифитове прслине (познате као “wing cracks”, нпр. (Nemat-Nasser and Hori, 1993; Krajcinovic, 1996)). Срastaњем ових индукованих прслина настају фрагменти који су илустровани разним бојама на слици 4.7а. На слици 4.7б илустрована су укупна померања зрнаца уз помоћ скале вредности на тумачу боја дате са крајње леве стране.

Најизразитији недостатак модела везаних зрнаца опажен у овим симулацијама односио се на велико неслагање чврстоћа виртуелног и стварног гранита при постојању бочне стешњености. Конкретно, модел значајно потцењује затезну чврстоћу материјала, као и нагиб обвојнице затезне чврстоће у функцији бочног притиска. Показало се да ови трендови нису значајно осетљиви на промену величине зрнаца. Аутори су закључили да је ово ограничење последица превише поједностављеног (кружног/лоптастог) облика зрнаца. У ту сврху су извели ограничени број 2Д-ДЕМ (PFC<sup>2D</sup>) симулација у којима је сложенији облик гранула остварен груписањем кружних зрнаца у кластере (попут шематске илустрације на слици 4.3) на начин уведен у (Jensen et al., 2001) а накнадно примењен и у PFC<sup>3D</sup> симулацијама (Cheng et al., 2003). Ове измене модела имале су позитивне ефекте на горе наведене недостатке изворног модела.



**Слика 4.6.** Симулација теста на једноосни притисак (контролисаним померањем) узорка од хетерогеног материјала коришћењем комерцијалног софтвера PFC<sup>2D</sup> 6.00 (Itasca Consulting Group) заснованог на моделу паралелних веза. Деформисани узорак у тренутку настанка доминантне вертикалне прслине и бочног прскања: (а) сивом бојом означена су кружна зрнца, а црвеним и зеленим цртицама мезопрслине настале затезањем и смицањем, тим редом; (б) издвојене мезопрслине; (в) издвојена зрнца. (Љубазношћу др Бранка Дамјанца).



**Слика 4.7.** Симулација теста на једноосни притисак (контролисаним померањем) узорка са постојећим (“pre-existing”) косим прслинама означених црном бојом. Коришћен је исти софтвер као на слици 4.6. Деформисана конфигурација у тренутку бубрења и фрагментације узорка: (а) разним бојама (зеленом, плавом, жутом, браон,...) означена су зрнца која припадају истим фрагментима насталим растом, гранањем и срастањем индукованих прслина истакнутих црвеном бојом; (б) укупна померања зрнаца визуелизована скалом боја датом са леве стране; (в) интензитет контактних сила између зрнаца. (Љубазношћу др Бранка Дамјанца).

Ови позитивни трендови довели су временом до поопштавања модела тако што се на основни материјал (чији сваки мезо-домен сада чини скупина кружних, крутих зрнаца везаних раскидивим, меким контактима<sup>13</sup>) додају елементи дисконтинуитета на вишој скали (Potyondy, 2014). Одговарајуће додатне симулације Потјондија и Кандала (2004) јасно указују да се прогресивно усложњавање облика *преломљивих* зрнаца-агломерата поклапа са повећањем нагиба горе-поменуте обвојнице, а тиме и затезне чврстоће, при деловању бочног притиска. Дотеривање модела у циљу решавања проблема усаглашавања вредности једноосне притисне чврстоће и директне затезне чврстоће, приказано је у референци (Potyondy, 2014) и тамо наведеним референцама, довело је до стварања модела равних-спојева (“flat-joined”) као засебног изданка основног модела везаних зрнаца.

Важно је да се истакне да су аутори развијали и нове технике у циљу прилагођавања микромеханичких 2Д-ДЕМ са паралелним везама (PFC<sup>2D</sup>) на проблеме граничних вредности који, у инжењерским применама, укључују оштећење и лом материјала. Циљ овога аспекта развоја методе је био да се омогући напредак у суштинском разумевању краткорочног и дугорочног понашања стенских маса око подземних ископа. Резултат овог рада био је развој и верификација нумеричког модела за предвиђање обима и текстуре оштећења стенских маса у близини ископа јамских отвора и утицај овог оштећења на дугорочну чврстоћу и деформабилност стена при амбијенталним и повишеним температурама. Уочени су сложени међусобни утицаји између удаљеног, макроскопског, јамског притиска и индукованог мезоскопског затезања, који контролишу процес оштећења. Ово деликатно узајамно дејство доводи до нелинеарног, анизотропно-еластичног понашања при малим оптерећењима *пре* појаве значајних облика оштећења, а накнадно контролише оштећења која настају при већим оптерећењем. Поред тога, ово доприноси дугорочним процесима деградације чврстоће, попут напонске корозије, који се активирају услед повећања напона у близини јамских ископа. Способност реплицирања финих детаља процеса оштећења (нпр., настанка уреза и клинова) развојем елегантних техника (попут поступног смањења чврстоће и димензија паралелне везе) указује на предности паралелних веза у односу на обичне контактне везе. Материјални систем моделиран са паралелним везама постаје много „попустљивији” у оштећеном региону, на ободу јамских ископа, него онај са контактним везама, чиме се ствара могућност вернијег представљања оптерећења на ивицама клинова оштећења које је кључно за процес лома.

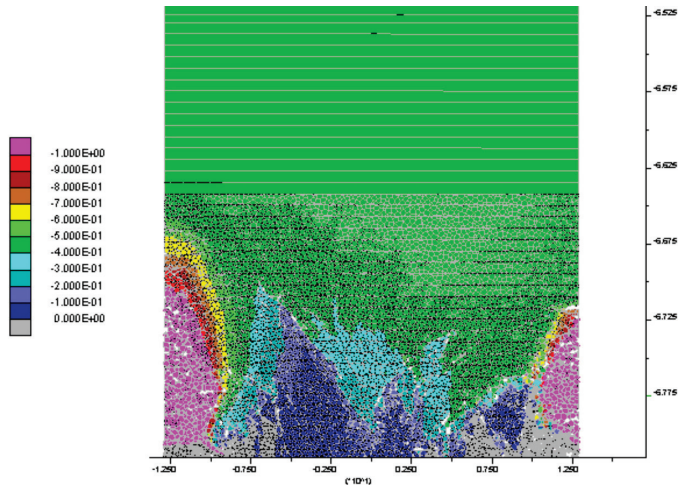
---

<sup>13</sup> Овако замишљени основни материјал је аналоган неоштећеним стенским монолитима.

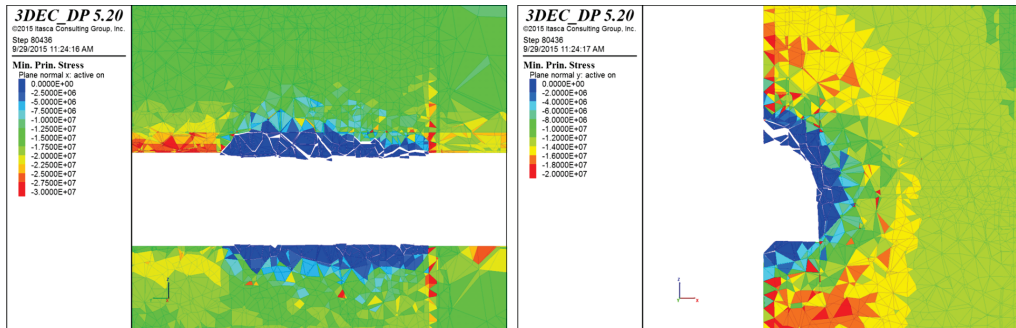
Сходно уоченим проблемима са превише једноставним облицима зрнаца, каснија побољшања модела укључују коришћење преломљивих, деформабилних, многоугаоних зрнаца што је, дугорочно гледано, довело до развоја програма UDEC и 3DEC (Itasca™ Consulting Group)(Damjanac et al., 2007). Ови програми у данашње време представљају драгоцене алатке за прорачун испуцалих стенских маса у околини јамских ископа (слике 4.8 и 4.9). Потјонди је унапредио модел укључивањем временски-зависног понашања увођењем у паралелну везу закона брзине оштећивања који имитира напонску корозију (Potiondy, 2007). Мас Иварс и коаутори (Mas Ivars et al., 2011) су обавили важну синтезу и заокружење целог приступа проширивањем модела паралелних веза на симулирање природних пукотина у стенским масама укључивањем спојева на скалама већим од скале зрнаца. Када се 3DEC користи за проучавање стабилности испуцалих стенских маса, разматрани блок се обично издели у више дискретних сегмената дефинисаних пресецањем природних прелина или спојева линеарних (равних) по деловима (слика 4.9). Овим сегментима (који имитирају стенске монолите) се затим додељују конститутивна својства. Спољашњи гранични услови дискретних сегмената се задају док се унутрашњи гранични услови израчунавају из контактних међудејстава што омогућава *експлицитно* моделирање постојећих пукотина у стенским масама (Damjanac et al., 2007)

Занимљиво је да је Кандал, зачетник ДЕМ, упрошћавањем свога модела паралелних веза, развио стандардни решеткасти модел у коме тачкасте масе замењују зрнаца, чија контактна међудејства замењују ломљиве опруге (Cundall, 2011). Разлог за овај правац развоја је у већој рачунарској ефикасности решеткастих модела која је у овом случају скопчана са добром оспособљеношћу за моделирање кртог материјала чија текстура обилује дисконтинуитетима без потребе за временски-захтевним контактним претраживањем. Поједностављење има своју цену, па је примена Кандалове решетке ограничена на симулације ломова првог мода (мод I).

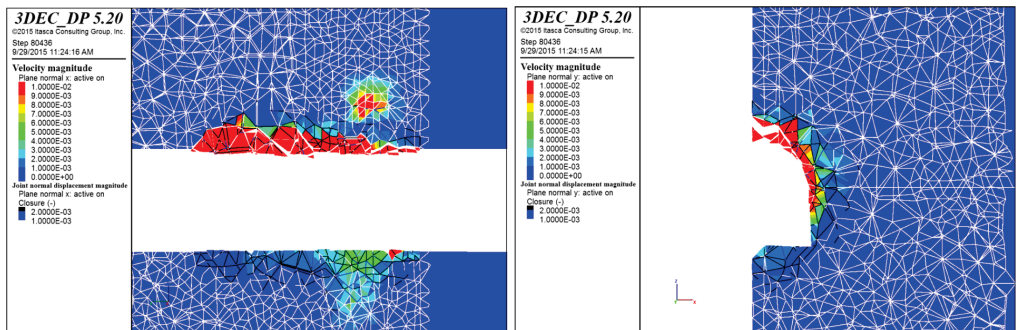
Коначно, детаљан преглед методе паралелних веза као истраживачког алата у механици стена и инжењерским применама са тренутним трендовима и будућим правцима развоја одскора је на располагању у (Potiondy, 2014). У наведеној референци дата је и исцрпна листа радова у којима је метода примењена у широком опсегу појава у механици стена и шире.



Слика 4.8. Симулација губитка стабилности стенке масе око јамског отвора софтвером UDEC 4.01 (Itasca Consulting Group). Поље вертикалних померања илустровано је тумачем боја са леве стране. (Љубазношћу др Бранка Дамјанца).



(a)



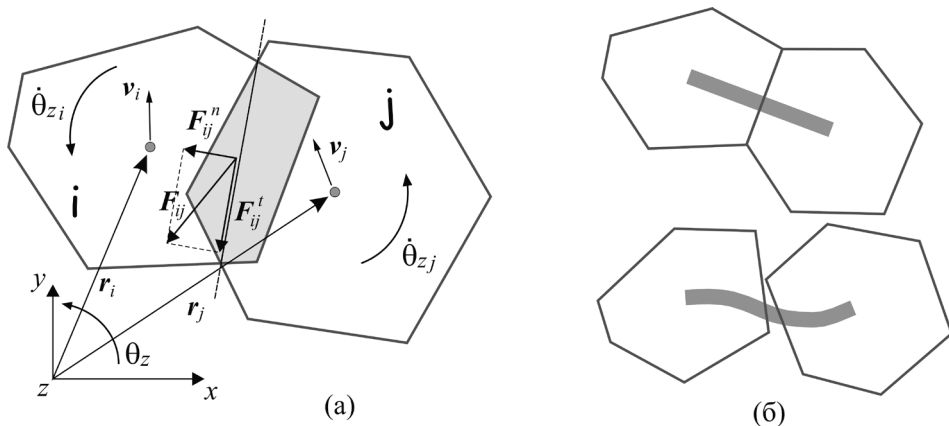
(b)

Слика 4.9. 3DEC (5.20) симулација обрушавања стенке масе око јамског отвора услед сеизмичког оптерећења. Поље (а) највећег главног напона и (б) брзине у две равни са датим тумачима боја. (Љубазношћу др Бранка Дамјанца).

Д'Адетта и коаутори (D'Addetta et al.; 2001, 2002) формулисали су 2Д модел хетерогеног, кохезивног, фрикционалног чврстог материјала чија је структура представљена скупином оделитих, конвексних многоуглова међусобно спојених простим гредама који обезбеђују кохезивност (слика 4.10). У зависности од избора параметара, модел може да представља спектар различитих материјала од некохезивног, сувог тла до разноврсних кохезивних материјала. Овај ДЕМ модел, кохезивних, фрикционих материјала представља надоградњу модела коришћених за симулацију механичког одзива насумично обликованих грануларних материјала (Kun and Herrmann, 1996).

Формулација модела састоји се из три главна корака. Прво се рачунски домен дискретизује у саћасту структуру конвексних многоуглова (који имитирају зрнца материјала) прављењем насумичног Воронојевог мозаика (теселацијом; слика 1.26) у форми насумичне векторисане мреже.

Друго, глобални механички одзив узорка репродукован је дефинисањем одговарајућих међудејстава међу суседним крутим многоугловима (слика 4.10). Критеријум лома, неопходан за дефинисање раскидања веза између структурних елемента на мезоскали, је коначни састојак модела. Дефинисање мезопараметара (делимично шематски илустровано сликом 4.10а), контактних сила, и сила и момената савијања редукованих на центар честице, концептуално је слично раније разматраном моделу састављеном од кружних зрнаца (слика 4.2) док су специфичности изван домена овога прегледа. Довољно је напоменути да, у недостатку аналитичког решења за стварно деформационо понашање додирујућих, произвољно-обликованих многоуглова, мора бити осмишљена апроксимативна техника као алтернатива.



Слика 4.10. (а) Притисни контакт два многоугаона зрнца; (б) деформација везне греде (греде која спаја зрнца) померањем припадајућих зрнаца.



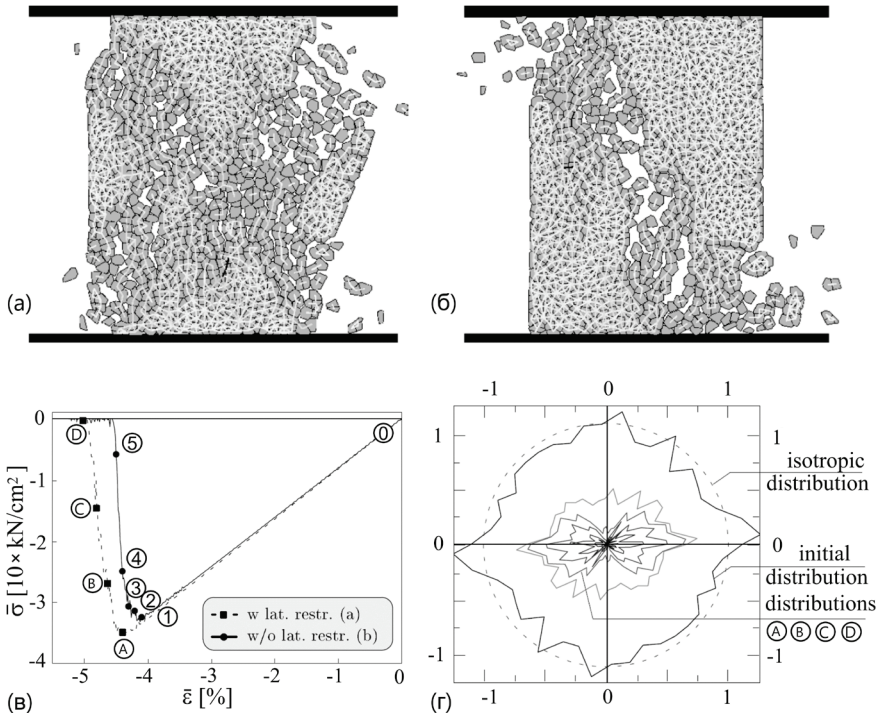
Критеријум раскидања греде узима у обзир модове лома и услед истезања и услед савијања

$$p_{ij}^{(b)} = \left( \frac{\varepsilon_{ij}^{(b)}}{\varepsilon_{\max}^{(b)}} \right)^2 + \frac{\max(|\theta_i|, |\theta_j|)}{\theta_{\max}} \geq 1, \quad \varepsilon_{ij}^{(b)} \geq 0 \quad (4.12)$$

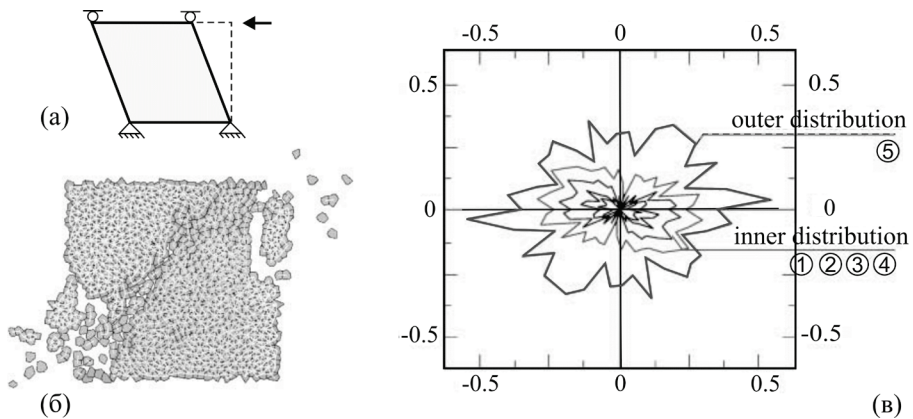
где је  $\varepsilon_{ij}^{(b)}$  подужна релативна деформација греде,  $\theta_i$  и  $\theta_j$  су углови обртања на крајевима греде (у чворовима  $i$  и  $j$  око осе  $z$  управне на раван), а  $\varepsilon_{\max}^{(b)}$  и  $\theta_{\max}$  граничне вредности за два мода лома. Релативна важност два мода лома може да се контролише подешавањем граничних вредности. Еволуција система добија се нумеричким решавањем Њутнове једначине кретања (4.1) понаособ за сваки многоугао у скупини.

Резултати нумеричких симулација тестова оптерећења на једноосни притисак и чисто смицање приказани на сликама 4.11 и 4.12 илуструју способност модела да репродукује суштинске карактеристике деформације и еволуције оштећења код кртог материјала. Поларни дијаграми текстуре оштећења (слике 4.11г и 4.12в) пружају прикладан геометријски опис оштећења. Тенденција анизотропне акумулације оштећења у режиму омекшавања очигледна је на слици 4.11в.

*Таварез и Плеша* (Tavarez and Plesha; 2007) су систематизовали одређивање мезопараметара ДЕМ модела дефинисањем теоријских метода за извођење израза за зависност коефицијената еластичности од еластичних константи изотропног материјала (4.5) на примеру шестоугаоне 2Д јединичне ћелије решетке. Аутори су развили и оригинални критеријум за раскидање контакта заснован на енергетским разматрањима и показали да је за многе класе материјала погоднији за употребу од традиционалних критеријума заснованих искључиво на појединачном коришћењу граничних вредности затезне чврстоће, деформације кидања или ломне жилавости (3.24); видети, нпр., (Potyondy and Cundall, 2004). Енергетски критеријум, Тавареза и Плеше, за раскидање контаката у правилној (густо попуњеној) и неправилној мрежи заснован је на прагу лома одређеном и еластичним константама ( $E$  и  $\nu$ ), и затезном чврстоћом материјала ( $\sigma_m$ ), и ломном жилавошћу (израженом критичним фактором интензитета напона при моду отварања прслине;  $K_{Ic}$ ).



**Слика 4.11.** Симулација теста на притисак; Конфигурације лома: (а) са бочном штењеношћу, (б) без бочне штењености; (в) Дијаграм напон-деформација за два наведена случаја, и (г) расподела оштећења која претходи притисном лому за случај симулације са бочном штењеношћу. (Преузето из референци (D’Addetta et al., 2001, 2002) са допуштењем издавача. Copyright (2001, 2002) by Springer).

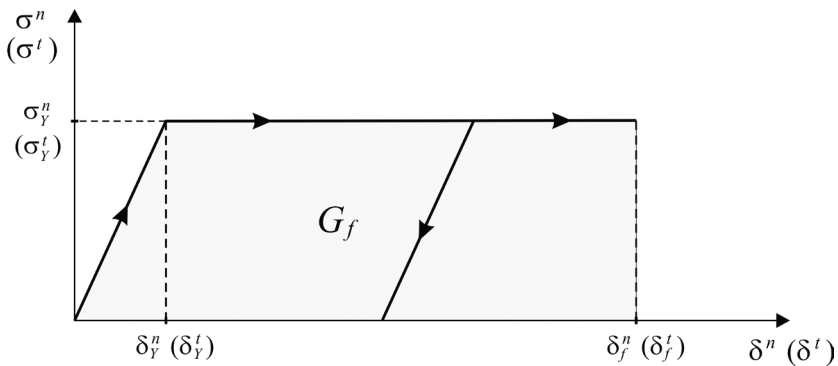


**Слика 4.12.** (а) Симулација теста оптерећења на чисто смицање, (б) конфигурација лома, и (в) расподела оштећења при смичућем лому. (Преузето из референце (D’Addetta et al., 2001) са допуштењем аутора. Copyright (2001) by Springer).

Критеријум је, у основном облику, заснован на контактної интеракцији дефинисаној са кривом напон-померање приказаној на слици 4.13 која је, у облику макроскопског конститутивног модела, типична за велики број дуктилних материјала. Критични контактни (нормални и смичући) напони који дефинишу праг идеално-пластичног течења дефинисани су изразима

$$\sigma_Y^n = \frac{f_Y^n}{2R_z t} = \frac{1}{4\sqrt{3}} \left( \frac{3 - \nu^{(2D)}}{1 - \nu^{(2D)}} \right) \sigma_m, \quad \sigma_Y^t = \frac{f_Y^t}{2R_z t} = \frac{1}{4} \left( \frac{1 - 3\nu^{(2D)}}{1 - \nu^{(2D)}} \right) \sigma_m \quad (4.13)$$

где је  $\nu^{(2D)}$  равански Поасонов коефицијент (1.4),  $\sigma_m$  затезна чврстоћа материјала, док су са  $f^{n,t}$  означене компоненте међучестичне силе у правцима нормале и тангенте (слика 4.2в) а са  $2R_z$  и  $t$ , тим редом, пречник зрнца и дебљина модела (дебљина ваљкастог зрнца кружне основе у раванским проблемима) чији производ одређује површину пресека која повезује контактне силе и напоне (4.13); (Tavarez and Plesha, 2007) и тамо наведене референце. На овом месту у развоју концепта, аутори истичу разлику у мезоструктури анализираним материјала. Ако у текстури материјала не постоје прслине пре деловања оптерећења, контактне силе између зрнаца ће достићи критичне нивое (4.13) симултано и модел ће достићи, на макро скали, максималну затезну чврстоћу материјала.



**Слика 4.13.** Релација напон-померање ( $\sigma$ - $\delta$ ) у правцима нормале ( $n$ ) и тангенте ( $t$ ) прописана за контакт ДЕМ модела и одговарајућа енергија лома  $G_f$  илустрована осенченом површином испод билинеарне криве. Доњи индекс  $Y$  означава критичне контактне параметре при којима долази до идеалног течења. Назначено је и да се растерећење међучестичне везе врши под истим нагибом у  $\sigma$ - $\delta$  простору као и преткритично оптерећење.

Дакле, без обзира на ломну жилавост, величина контактних сила (а посредно и затезна чврстоћа модела) су ограничени са (4.13). Када постоје прслине, контактне силе на њиховим врховима ће, услед постојања концентрације напона (теоријски, сингуларитета у еластичном решењу), врло брзо да

досегну граничне вредности (4.13). Међутим, Таварез и Плеша постулирају да до комплетног раскидања везе треба да дође тек када  $G_1 = K_{1c}^2 / E^{(2D)}$  у контакту досегне енергију лома  $G_f$ , дефинисану критичним фактором интензитета напона ( $K_{1c}$ ) (слика 4.13). Сходно слици 4.13, када контактни напони досегну критичне вредности дефинисане изразима (4.13), долази до идеално-пластичног течења све док се површина испод  $\sigma^n - \delta^n$  билинеарне криве не изједначи са вредношћу која одговара енергији лома

$$G_f = \frac{K_{1c}^2}{E^{(2D)}}.$$

На овај начин дефинише се критеријум раскидања везе заснован на граничној вредности померања у правцу нормале

$$\delta_f^n = \frac{G_f}{\sigma_Y^n} + \frac{\delta_Y^n}{2} = \frac{4\sqrt{3}}{E^{(2D)}} \left( \frac{1 - \nu^{(2D)}}{3 - \nu^{(2D)}} \right) \frac{K_{1c}^2}{\sigma_m} + \frac{(3 - \nu^{(2D)})}{4E^{(2D)}} R \sigma_m \quad (4.14)$$

у функцији еластичних параметара (преко  $E^{(2D)}$  и  $\nu^{(2D)}$ ; израз (1.4)), затезне чврстоће ( $\sigma_m$ ), и критичног фактора интензитета напона ( $K_{1c}$ ). При извођењу критеријума лома по померању (4.14) коришћене су релације  $\sigma_Y^n = f_Y^n / 2R_z t = k^n \delta_Y^n / 2R_z t$  и веза између константи крутости нормалне опруге и раванских еластичних коефицијената (4.5<sub>1</sub>). Пошто у изразу (4.14) фигурише полупречник зрнца ( $R_z$ ) критеријум раскидања везе је *зависан* од величине зрнца коришћене при дискретизацији. У циљу валидације модела и испитивања зависности резултата од  $R_z$ , Таварез и Плеша су униформно, једноосно затезање плоче са префембрикованом ивичном прслином (чисти мод I оптерећења) симулирали помоћу ДЕМ модела са три различита пречника честица ( $R_z = 7.81 \text{ mm}$ ,  $3.91 \text{ mm}$ ,  $1.93 \text{ mm}$ ) аранжираних у густо-попуњену решетку са, редом, 1172, 4713, односно 18899 елемената. Физичко-механичке особине материјала одабране су имајући у виду бетон:  $E = 29.7 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.3$ ,  $\sigma_m = 3.44 \text{ MPa}$ ,  $K_{1c} = 1.0 \text{ MPa}\sqrt{m}$ . Резултати симулација ДЕМ моделом уз коришћење критеријума лома (4.14) показали су изузетно добро слагање са доступним теоријским резултатима. Такође је анализирана и одговарајућа конфигурација без иницијалне ивичне прслине и показано је да до лома сва три модела долази при практично идентичној вредности напона која одговара затезној чврстоћи. Треба имати у виду да је за неке класе материјала (нпр., квази-крте материјале), уместо еластично-идеално пластичног односа  $\sigma - \delta$  (слика 4.13) исправније коришћење одговарајуће конститутивне релације са очвршћавањем и омекшавањем (слика 3.16) (Bažant and Planas, 1998; Davie and Bicanic, 2003).

На крају, Таварез и Плеша (Tavarez and Plesa, 2007) су детаљно анализирали нумеричку стабилност ДЕМ симулација и предложили теоријски метод за одређивање стабилног временског корака за интеграцију једначина кретања на основу процене максималне фреквенције вибрација.

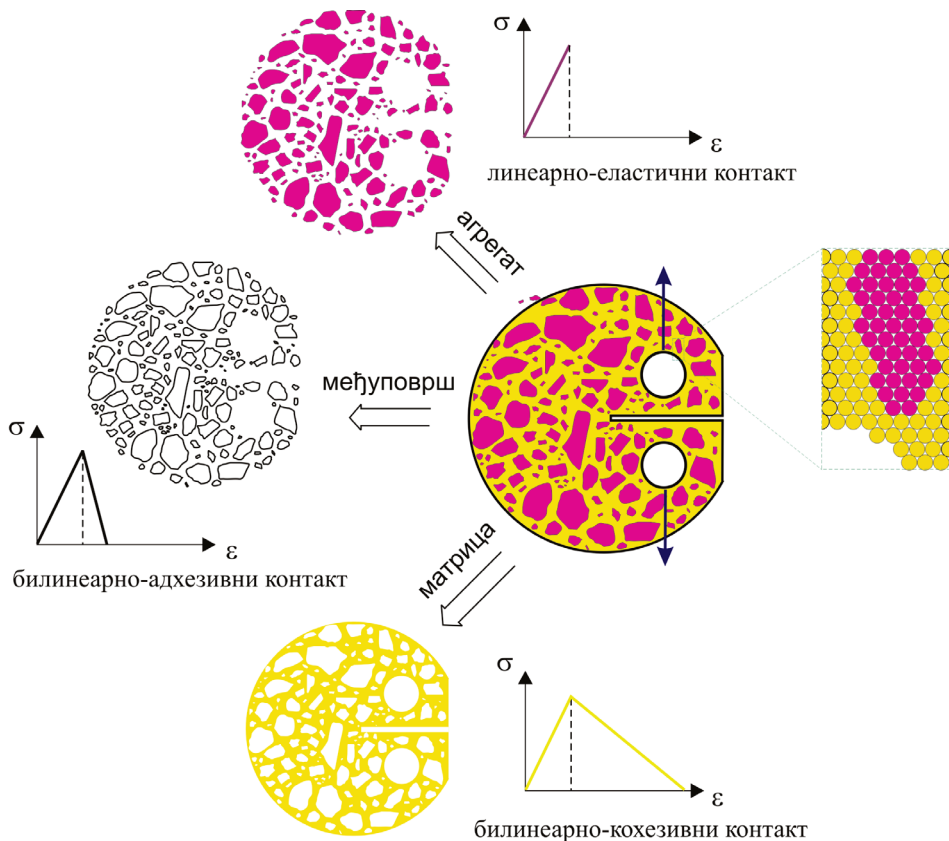
#### 4.2.2 Примена ДЕМ на бетон

Најједноставније описан, бетон је вештачки грађевински материјал типа честичног композита који се добија агломерацијом различитих врста агрегата у одређене везивне супстанце (типично, хидрауличко минерално везиво, цемент). Међутим, детаљније испитивање бетона открива његову изузетно сложену, слојевиту, хетерогену структуру која потиче у највећој мери од цементног везива и зона прелазних међуповрши (“interfacial transition zones”) око агрегата. Дужинске скале хетерогености простиру се од нанометара до неколико центиметара (у зависности од величине агрегата).<sup>14</sup> Сложени физички и хемијски процеси доприносе томе да су особине цементних композита природно (својствено) подложне промени како током формативних тако и дегенеративних процеса (Taylor, 1997) што карактеризацију микроструктуре чини „покретном метом” (Landis and Bolander, 2009). Ова сложеност структуре доводи до сложености процеса оштећења и лома. Употребљивост бетона као економичног, издржљивог и дуговечног грађевинског материјала у великој мери зависи од разумевања ових сложености. Особени нееластични одзив бетона врло је тешко тумачити без позивања на његову структуру; нпр. (Karihaloo, 1995; Ibrahim-begovic and Delaplace, 2003). Побољшано разумевање физичких основа процеса лома бетона, поготово његовог скалирања, неопходно да би се и задовољила растућа очекивања и разумела ограничења употребе овога материјала, нарочито у применама у којима се захтевају високе перформансе (Važant and Planas, 1998). Све ово представља плодно тло за коришћење ДЕМ модела у које висок ниво хетерогености структуре (као дефинишућа особеност свих квази-дуктилних материјала па и бетона) може да се инкорпорира на природан и веома једноставан начин.

---

<sup>14</sup> Кузатис и коаутори (Cusatis et al., 2006) набрајају шест различитих опажајних скала у унутрашњој структури бетона: атомска скала (честице хидрата), нано скала (порозност хидрата), микро скала (порозност очврслог цемента), мини скала (текстура малтера и зона прелазних међуповрши), мезо скала (агрегати), и, коначно, макро скала. Оваква слојевитост структуре резултује одговарајућом сложености процеса деформације и лома.

Ким и Батлер (Kim and Buttlar, 2009) развили су кохезивни ДЕМ модел лома компактног узорка у облику диска оптерећеног на затезање (“disk-shaped compact tension specimen”) ради испитивања различитих аспеката првог мода лома асфалтног бетона. Циљ им је био да користе ДЕМ ради интегрисања експерименталних, аналитичких и нумеричких приступа заснованих на микро-структури заснованој на сликама (микорографима) (анализа снимака високе резолуције мапирана на кластерисану мрежу као што је илустровано на слици 4.14). На основу макро-запреминских (“bulk”) експеримената, експеримената на лом и свеобухватне инверзне анализе, идентификоване су особине материјала и додељене свим ДЕМ контактима према фазном контактном правилу шематски представљеном сликом 4.14.



**Слика 4.14.** Шематски приказ дигитализоване слике трофазне геометрије асфалтног бетона са одговарајућим фазним контактним моделима и ДЕМ мрежом компактног узорка на затезање облика диска. (Репродуковано на основу података из референце (Kim and Buttlar, 2009))

ДЕМ симулације првог мода (мод I: отварање) оптерећења компактног узорка на затезање облика диска извршене су са различитим номиналним максималним величинама агрегата, температурама, и типовима агрегата у циљу разумевања различитих механизма лома. Резултати симулација су показали веома добро слагање са експерименталним резултатима добијеним на различитим температурама и са различитим типовима мешавина. Показано је да, уз глобални облик лома, хетерогени ДЕМ модел може такође потенцијално да репродукује и расподеле напона и оштећења. Поређење кривих сила-померање добијених ДЕМ симулацијама коришћењем модела шематски приказаног на слици 4.14 са одговарајућим експерименталним резултатима демонстрира једнако добро квантитативно слагање како у преткритичном режиму очвршћавања тако и у посткритичном режиму омекшавања. Задовољавајуће слагање резултата рачунских симулација и одговарајућих лабораторијских експеримената уочено је и приликом поређења кривих сила-отварање прслине и то на два температурама  $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$  и  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Уопште узев, ДЕМ симулације коришћењем модела Кима и Батлера не репродукују само квалитативно очекивани, и експериментално утврђени, тренд повећавања кртости и чврстоће са смањењем температуре него га и квантитативно репродукују са обе стране критичне тачке односно у целом опсегу испитивања. Ким и Батлер су закључили да њихов приступ моделирању заснован на ДЕМ „по свему судећи има значајне могућности да допринесе разумевању лома асфалтног бетона” (Kim and Buttlar, 2009).

Треба, међутим, истаћи да конститутивне релације напон-деформација за везивну матрицу и међуповрш (интерфејс) (билинеарно-кохезивна односно билинеарно-адхезивна, тим редом; слика 4.14) користе посткритични режим омекшавања на исти начин како је већ дискутовано (нпр., слика 3.3 и одговарајућа разматрања Бажанта и сарадника) и поред тога што он није унутрашња особина материјала. Додељивање реалних својстава омекшавања на мезо скали није у потпуности дефинисано (van Mier, 2004, 2007) и поред великих напора у том правцу (нпр., Kitsutaka et al., 2001). Ван Мир је критиковао увођење омекшавања у конститутивне релације на мезоскали (van Mier, 2004) тврдећи да постоји опасност да су основни механизми пропуштени на рачун тога што се до жељених резултата долази увођењем додатних параметара модела. Постулирање омекшавања на финијим просторним скалама на основу макроскопских опажања је упитно и заслужује пажљиву анализу. Ово је важно да се истакне, тим пре што су конститутивне релације са омекшавањем на мезо и микро скалама, због рачунских погодности које пружају, све више у безрезервној и неупитној примени.

### 4.3 Примена ДЕМ модела на проблеме фрагментације

Потапов и Кембел (Potapov et al., 1995; Potapov and Campbell, 1997) користили су ДЕМ модел за анализирање лома и фрагментације кружног диска (и сферичне лопте) приликом удара у крути зид. Овај класични проблем се традиционално користи за изучавање фрагментације и опсежна листа студија заснованих како на физичким експериментима тако и ДЕМ симулацијама је доступна у референци (Paluszny et al., 2016). У ДЕМ моделу Потапова и сарадника, макрофизички објекат од чврстог материјала створен је „слеplивањем” крутих мезофизичких тела (зрнаца) исте Еуклидске димензионалности као разматрани проблем. Аутори су у улози крутих зрнаца испробавали различите типове многоуглова, правилних и неправилних облика. У зависности од величине, правца и смера контактних сила (тј., напонског стања), везе између крутих зрнаца могу да се деформишу еластично, пластично, или да се раскину чиме се имитира зачеће и раст прслине дуж међуповрши између зрнаца. Овај модел је изданак ДЕМ модела коришћених за симулације деформисања растреситих грануларних материјала и, историјски гледано, у директној је вези са изворним методом Кандала и Штрака (Cundall and Strack, 1979). За разлику од сличних ДЕМ модела (нпр., Meguro and Nakuno, 1989; Thornton et al., 1996), аутори су коришћењем континуалних међудејстава између зрнаца (уместо контаката у једној тачки зрнаца у облику дискова или лопти) омогућили симулацију континуалног (такође и делимичног) лома између међучестичних веза уместо скоковитог раста прслине “staccato” кидањима тачкастих спојева. Овај потоњи начин раста прслине реална је имитација физичког процеса у случају кохезивних грануларних материјала (попут бетона), али није најподеснији за симулацију лома материјала са релативно “непрекидном” мезоструктуром (нпр., нископорозних стена попут мермера). Метода се заснива на симултаном решавању једначина кретања свих мезоскопских елемената (зрнаца) које сачињавају макроскопски објекат. Највећи део процеса интеграције састоји се у одређивању контактних сила.

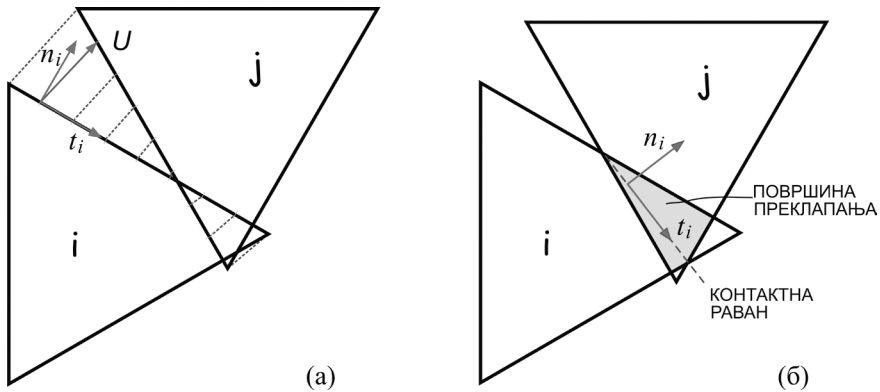
Разликују се две врсте сила: прве су последица хемијских (кохезивних или адхезивних, у даљем тексту ће бити коришћен први термин уз претпоставку једноврсног материјала) веза између суседних честица а друге, механичких („сударних”) контаката између честица које у почетној конфигурацији нису биле суседи или суседних честица код којих су, током деформације, раскинуте „кохезивне” везе (појавом прслина) те су изгубиле способност ношења затезних



сила (слика 5.1 илуструје слично међудејство у честичној формулацији). Кохезивни контакт преноси и затезање и притисак. Вектор релативног померања (раздвајања),  $\mathbf{U} = (U^n, U^t)$ , може да се замисли као еластично влакно које повезује тачке, на контактним површинама два суседна зрнаца (слика 4.15а), које су у почетној (референтној, нулто-напонској) конфигурацији биле преклопљене. Ово влакно се понаша као еластична опруга са константама крутости  $k^n$  и  $k^t$  у правцима вектора нормале и тангенте везаних за зрнаца домаћина ( $i$ ). Пројекције силе која се јавља у влакну услед раздвајања зрнаца су  $k^n U^n$  и  $k^t U^t$ , слично као у ДЕМ моделу описаном у поглављу 4.1.1. Суштинска разлика, коју треба уочити, је да се у моделу који сада разматрамо укупна сила  $\mathbf{f}_{ij} = (f^n, f^t)_{ij}$  на контактної површини између зрнаца  $i$  и  $j$  (и одговарајућа реакција  $\mathbf{f}_{ji}$  супротног смера која делује на зрнаца суседа) добија интеграцијом сила у свим елементарним влакнима дуж дате додирне површине. Апроксимативни облик пластичности се уводи у модел на тај начин што се допушта ограничено релативно клизање (у границама малих деформација) два суседна зрнаца, што је мотивисано пластичним течењем стварног материјала услед масивног кретања дислокација дуж равни клизања. Мор-Кулонов закон се користи као критеријум пластичног течења

$$\begin{aligned} |\sigma^t| &= \sigma_{coh} + \mu_f \sigma^n, \quad \text{притисак} \\ |\sigma^t| &= \sigma_{coh}, \quad \text{затезање} \end{aligned} \tag{4.15}$$

где су  $\sigma^n$  и  $\sigma^t$ , редом, компоненте напона у правцима нормале и тангенте (при чему је природни координатни систем везан за контактну површину домаћина, слика 4.15а),  $\mu_f$  коефицијент унутрашњег трења површина клизања а  $\sigma_{coh}$  граница кохезије. Пошто се ради о Лагранжијанској техници рачунарских симулација, Потапов, Кембел и Хопкинс су увели и дисипативне силе у циљу одржавања стабилности и ограничавања вештачких вибрација које могу настати као последице акумулације нумеричких грешака (упоредити са сликом 4.2). Ово је учињено увођењем вискозне силе пропорционалне брзини у свако елементарно контактну влакно; интеграцијом ових сила дуж ивица честице могу се добити резултујућа сила и момент који делују на свако зрнаца (Potapov et al., 1995). Механичким контактима преноси се само притисна сила у случају малог преклапања зрнаца како је већ дискутовано у 4.1.1 (меки контакт). Ова сила има еластичну, вискозну и фриксиону компоненту које су детаљно описане у изворном извештају (Hopkins, 1992).



**Слика 4.15.** Шематски приказ (а) хемијског и (б) механичког контакта између два зрнаца облика једнакостраничног троугла. Зрнаца означено са  $i$  је „домаћин” а оно са  $j$  је „сусед”

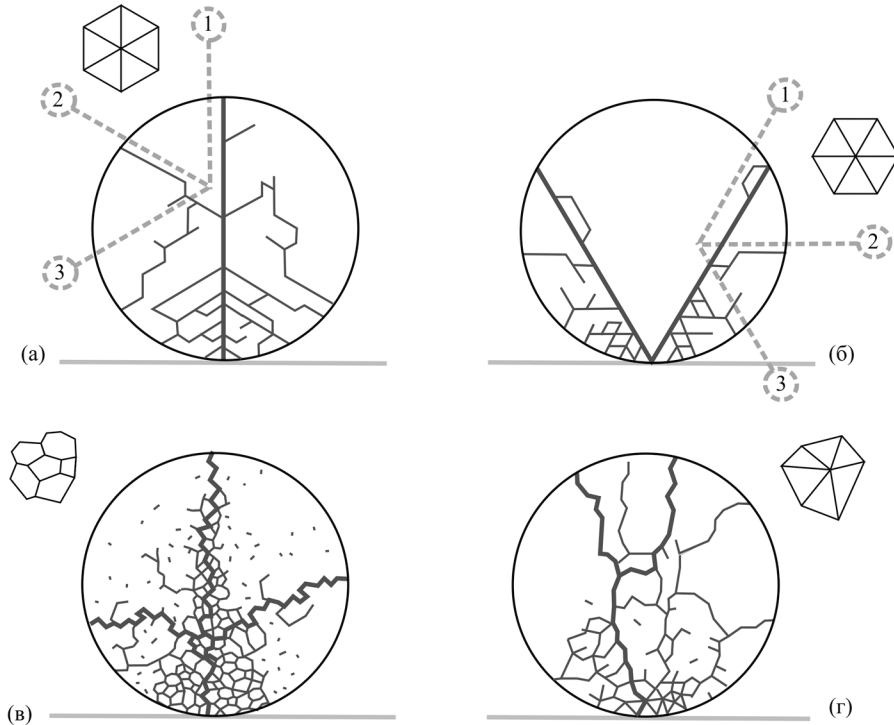
Природни координатни систем везан је за контактну раван (илустровану на слици 4.15б). Еластична притисна сила пропорционална је величини површине преклапања (са коефицијентом пропорционалности једнаким коефицијенту крутости у правцу нормале,  $k^n$ ). Апсолутна вредност вискозне силе пропорционална је градијенту промене величине површине преклапања (са коефицијентом пропорционалности који је најчешће исти као онај коришћен у хемијским контактима). Вискозна сила делује у супротном смеру од смера промене еластичне силе (зарад одређивања ових смерова уведена је контактна раван илустрована на слици 4.15б) а линије дејства су им везане за тежиште површине преклапања. Дефиниција контактне равни може да се закомпликује у одређеним ситуацијама што је детаљно разматрано у изворној референци (Potarov et al., 1995). Приликом механичких контаката јавља се и сила трења која делује паралелно контактної равни са смером супротним од смера релативне брзине између зрнаца. Коефицијент трења при механичком контакту има, уопште узев, другачију вредност од коефицијента унутрашњег трења,  $\mu^f$  (4.15<sub>1</sub>).

Хемијски контакт приликом раскидања прелази у механички контакт (који се, наравно, активира уколико постоји притисак између зрнаца који доводи до преклапања). Да ли ће, где и када доћи до раскидања хемијске везе зависи од релативне величине затезне силе у односу на затезну чврстоћу,  $\sigma_m$ . Енергија ослобођена по јединици дужине прслине је  $\sigma_m^2 / (2k^n)$ , што одговара деформационој енергији истегнутог влакна у тренутку његовог раскидања. Важно је уочити да хемијска веза не нестаје одједном на целој контактної површини зрнаца: раскидају се само она влакна код којих је испуњен критеријум кидана те

је могуће имати прслину која се простире само дуж једног дела контактне области док на супротном делу честице у контакту могу бити чак међусобно притиснуте (нпр., слика 4.15а). Аутори су нагласили важност оваквог моделирања јер оно предупредује утицај који нефизички таласи лома (настали по раскидању целе везе одједном) могу имати на даљу динамику процеса лома (Potarov et al., 1995). Тај проблем је неизбежан када се ДЕМ са контактима између зрнаца у једној тачки (нпр., слике 4.2 и 4.5 ) користе за моделирање чврстих материјала са „непрекидном” мезоструктуром. Ово нас враћа на већ изнесено опажање да ДЕМ модели имају најприроднију примену код материјалних система који се одликују идентичном топологијом као и репрезентујуће мноштво зрнаца (Curtin and Scher, 1990).

Потапов и Кембел су посветили велику пажњу избору облика елементарног мезофизичког објекта (зрнаца). Први елемент који су користили био је једнакостранични троугао како због његове једноставности и лакоће дискретизовања различитих макроструктурних објеката тако и могућности раста прслина у шест различитих смерова из сваког темена. Такође је познато да се равански системи са шестоугаоном симетријом (види уметке на слици 4.16а,б) одликују са две еластичне константе попут изотропног еластичног континуума. Најзад, објекти дискретизовани са једнакостраничним троугловима имају јасно дефинисане равни клизања које се простиру с краја на крај њиховог физичког домена што промовише пластичност на свим просторним скалама. Нажалост, неке од ових предности, с друге тачке гледишта, представљају и мане: дирекционалност мреже предодређује обрасце распрострањања прслина (види слику 4.16а,б). Приликом удара диска у крути зид, јављају се два потпуно различита појавна облика лома (најочљивије: правци доминантних макропрслина) искључиво као последица обртања модела за  $30^\circ$ . Оваква дирекционалност одзива може имати физичку подлогу ако се моделирају одговарајуће оријентисани монокристали, међутим, у случају симулирања понашања аморфних материјала или поликристала, неопходно је користити неправилне, неуређене мезофизичке елементе (често, стохастичке геометрије). Дискретизација просторног домена једнакостраничним троугловима неизбежно је скопчана са предодређеношћу простирања великих макропрслина дуж одређених кристалографских равни а, такође, и са давањем предности пластичном клизању дуж истих праваца. Случајна и неуређена геометрија мезо/микроструктурних елемената има предност да — докле год су њихове величине много мање од макроскопског објекта који се моделира — правац раста прслина није предодређен, а еластично понашање је и даље дефинисано са две еластичне константе. Међутим, недостатак јасно дефинисаних равни клизања предупредује пластично течење тако да је примена елемената оваквих

геометрија ограничена на аморфне и крте материјале. На слици 4.16 илустрована су су два таква модела у којима су коришћени Воронојеви многоуглови (в) и Деланејеви неуређени троуглови (г). (Ефекат на правац простирања прслина је сличан ономе кога смо већ имали прилику да видимо у случају решеткастих модела (нпр., слика 3.15; Schlangen and Garboczi, 1996).) Аутори су детаљно разматрали везе између еластичних константи материјала и одговарајућих параметара мезофизичких елемената.



**Слика 4.16.** Шематски приказ утицаја облика зрнаца на обрасце распрострањања примарних и секундарних прслина (1, 2, 3) и фрагментацију приликом ударног оптерећења: (а) и (б) једнакоугаони троугао са две различите оријентације у односу на правац удара; (в) неуређени Воронојев многоугао; и (г) неуређени Деланејев троугао. (Репродуковано на основу података из референце (Potapov et al., 1995)). Упоредити са сликом 4.20.

Потапов и Кембел су описани 2Д-ДЕМ модел применили за изучавање ефекта брзине удара за случај кружног диска направљеног од кртог материјала (Potapov and Campbell, 1996). Уочено је да примарне прслине настају дуж трајекторија главних напона затезања које се радијално шире из зоне удара. Након тога долази до стварања секундарних прслина управно на примарне. Аутори су настанак ових секундарних прслина тумачили као нуспродукт

примарних прслина, односно као последицу динамичког извијања витких фрагмената насталих ширењем примарних прслина до граница диска. Релативни удео ова два механизма фрагментације повезали су са ефектима брзине удара уочавајући да секундарне прслине имају већу улогу у укупном процесу фрагментације при малим брзинама удара. Сходно томе, при великим брзинама удара долази до релативног смањења величине процесне зоне (коју одликује потпуно уститњавање материјала – „палверизација”) у окружењу ударне тачке.

Потапов и Кембел су описани 2Д-ДЕМ модел прилагодили за коришћење за моделирање просторних проблема са кртим материјалима (Potapov and Campbell, 1996). Поређењем резултата ових симулација са резултатима лабораторијских експеримената аутори су показали да 3Д-ДЕМ модел може веома тачно да репродукује расподелу фрагмената (већих од 3 елемента). Такође су истакли Воронојева дискретизација домена пружа природно средство за репродуковање простирања прслина. Недостатак модела је што је изузетно захтеван у погледу времена симулације што је, у оно време, представљало велики проблем за примену у инжењерској пракси.

Кун и Херман (Kun and Herrmann, 1996, 1999) су истраживали лом и фрагментацију чврстих материјала коришћењем 2Д модела грануларног чврстог материјала састављеног од неправилних, крутих многоуглова, случајно одабраних облика и величина, повезаних еластичним гредама. Греде служе за обезбеђивање кохезивних сила између гранула представљених конвексним многоугловима који дефинишу мезоструктуру грануларног чврстог тела. Динамичка оптерећења која су аутори симулирали у горе наведеним радовима су детонација тачкастог експлозива постављеног у средини кружног диска, лом и фрагментација грануларног блока услед удара пројектила (Kun and Herrman, 1996), и нискоенергетски судари 2Д дискова (Kun and Herrman, 1999).

Кун и Херман су у својим моделима користили конвексне многоуглове различитих облика и величина ради моделирања сложене структуре грануларног чврстог материјала. Почетна конфигурација ове неуређене скупине многоуглова добијена је конструкцијом векторизовне неуређене решетке што је Воронојева конструкција са процедуром регуларизације (Lauritsen et al., 1994). Многоуглови су замишљени као недеформабилна и несаломива зрнца континуума који представљају јединичне елементе (морфологије материјала на мезоскали) са три степена слободе у међусобној еластичној интеракцији. У случају излагања два крута многоугаона зрнца међусобном притиску, у зони додира може да дође до њиховог локалног преклапања дефинисаног са две тачке пресека њихових контура које одређују линију додира (слике 4.10 и 4.15). Одбојна сила између два многоугаона зрнца сразмерна је површини преклапања ( $A_{II}$ ) нормализованој

са карактеристичном дужином ( $L_k$ ) додирујућег пара зрнаца,  $\mathbf{F} = -Y A_{II} / L_k \mathbf{n}$ , где коефицијент пропорционалности  $Y$  представља модул еластичности грануле (зрнаца) а  $\mathbf{n}$  је вектор нормале на линију додира. Трење између суседних многоугаоних зрнаца може, по потреби, да се уведе коришћем Кулоновог закона трења (Tillemans and Herrmann, 1995). Кохезивна сила између суседних зрнаца уводи се коришћењем еластичних, ломљивих греда које спајају њихова тежишта. Због неуређености дуалне мреже проистекле из Воронојевог мозаика, гредне решетке су такође неуређене. У раванским проблемима, еластичне греде носе, као што је уобичајено, аксијалну и смичућу силу и момент савијања. Еластично понашање греда је дефинисано преко комплета еластичних константи које су функција физичко-механичких особина материјала и геометријских карактеристика попречног пресека греде (Kun and Herrman, 1996). Критеријум лома греда неопходан је за моделирање оштећења и фрагментације кохезивног грануларног чврстог материјала. Еластичне греде могу да се леме како на истезање тако и на савијање при чему је коришћен критеријум лома заснован на фон Мизеовом (von Mises) критеријуму пластичности (4.15) са две граничне вредности  $\varepsilon_{\max}^{(b)}$  и  $\theta_{\max}$  за сваки од модова лома, тим редом.

Детонација тачкастог експлозива постављеног у средини кружног диска је прва ДЕМ симулација динамичког оптерећена коју су Кун и Херман (1996) користили за изучавање фрагментације. Улогу експлозива игра средишни многоугао преко кога се додељују почетне брзине свим зрнцима која су са њим у контакту. Експлозија је сферно симетрична и узрокује настанак таласа притиска који се шири из њеног средишта. Притисни талас је праћен таласом затезања и они стварају веома сложену како напонско-деформациону слику тако и резултирајуће оштећење у неуређеном материјалу преко кога пређу. Ниво оштећења је највиши у околини места експлозије (тј., средишта диска) где су практично све греде раскинуте те су и сви фрагменти једногрануларни (материјал потпуно здробљен у најситније делиће; видети слику 5.3 ради илустрације). Аутори истичу два режима у еволуцији експлозије: почетни режим је одређен притисним таласом и неуређеношћу структуре материјала. Почетно уситњавање материјала доводи до расипања енергије а самим тим и слабљења таласа и престанка раста зоне материјала претвореног у прах. Ослабљени таласи настављају кретање кроз материјал али сада долази тек ту-и-тамо до местимичног раскидања само најслабијих и најповољније оријентисаних греда без постојања било каквог међусобног суодноса (корелације) између догађаја зачетака оштећења у изолованим тачкама. Некорелисаним режимом оштећења и његовом типично разређеном концентрацијом доминира затечена неуређеност (“quenched disorder”) мезоструктуре. Овај некорелисани режим процеса

експлозије траје док талас притиска не досегне слободну контуру кружног диска, одбије се од њу као талас затезања, и почиње да се креће уназад ка средишту диска. Приликом тог повратног кретања долази до сусрета са таласом затезања (који се, у пратњи притисног таласа, још увек удаљава од средишта диска) што доводи до конструктивне интерференције и, најчешће, комплетног одвајања граничног слоја кружног диска предвидљиве дебљине<sup>15</sup>. Фрагменти овог одвојеног граничног слоја настављају радијално кретање носећи велики део кинетичке енергије. Преостали део кружног диска се тада налази у режиму ширења што доводи до појаве прелина чије гранање и међусобна срастања доводе до коначне фрагментације диска. Овим другим режимом у еволуцији експлозије доминира корелација (суоднос) између прелина. Из наведеног описа еволуције експлозије види се да коришћени ДЕМ модел веома верно репродукује физичку природу процеса. Најинтересантнији резултати симулација односе се на хистограме маса фрагмената при чему су вариране две граничне вредности за сваки од модова лома и то на следећи начин: (i)  $\varepsilon_{\max}^{(b)} \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\} [\%]$  при  $\theta_{\max} = 4^\circ = \text{const.}$ , односно, (ii)  $\theta_{\max} \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\} [^\circ]$  при  $\varepsilon_{\max}^{(b)} = 3\% = \text{const.}$  Резултати симулација указују да при мењању једне од граничних вредности лома на наведене начине, хистограми маса фрагмената теже асимптотским хистограмима који означавају засићења расподела (за сваки од горе наведених случајева по једна). Важно је уочити да су Кун и Херман изостављали најмање фрагменте (који одговарају једној гранули тј. јединичној ћелији модела која дефинише најситнији делић). На тај начин приказани резултати симулација указивали су да хистограми маса фрагмената прате степену функцију

$$pdf(m) \propto m^{-\tau_F} \quad (4.16)$$

за најмање један ред величина маса фрагмената, за све горе наведене комбинације граничних вредности модова лома. Са изузетком најмањих вредности  $\varepsilon_{\max}^{(b)}$  и  $\theta_{\max}$ , експонент степене функције (4.16) незнатно осцилује око вредности  $\tau_F = 2.00 \pm 0.05$ , што указује на мању или већу универзалност понашања. Међутим, при комбинацији већих вредности параметара граница лома (нпр.,  $\varepsilon_{\max}^{(b)} = 6\%$  и  $\theta_{\max} = 4^\circ$ ), што одговара дуктилнијим материјалима, долази до појаве двомодалне расподеле коју карактеришу два експонента на хистограмима маса фрагмената, што аутори објашњавају истакнутијим одвајањем граничног слоја који контролише опсег малих фрагмената (састављеним од 2-6 многоуглова) док потоња фрагментација преосталог дела кружног диска услед ширења контролише опсег великих фрагмената. Двомодалност је, дакле,

<sup>15</sup> Аналогно са појавом одвајања (“spalling”) код балистичког теста судара плоча.

последица два режима у еволуцији процеса фрагментације који се истичу изразито различитим степенима корелације, при чему треба приметити да опсег великих фрагмената одговара уоченој универзалној вредности експонента степене функције  $\tau_F = 2.00 \pm 0.05$ .

Друга ДЕМ симулација динамичког оптерећења коју су Кун и Херман (1996) користили за изучавање фрагментације односи се на удар пројектила у масивну мету чија се фрагментација потом анализира. У циљу смањења времена трајања рачунарске симулације, удар пројектила је симулиран тако што се једном многоуглу на средини доње ивице блока зада одређена брзина усмерена ка остатку масе материјала (односно, рачунарског домена) мете. Квалитативне појаве до којих долази сличне су већ описанима у случају симулације детонације експлозива: највећи ниво оштећења примећен је у околини места задавања почетних брзина где су практично све греде раскинуте те су и *сви* фрагменти једногрануларни (материјал здробљен у најситнији прах). Ударни талас се простира кроз унутрашњост мете док не досегне горњу слободну ивицу после чега долази до одвајања граничног слоја. Фрагменти настали комадањем овог граничног слоја настављају кретање у генералном правцу удара док се одређен број једногрануларних фрагмената насталих у процесној зони креће у супротном смеру. Поређење са доступним резултатима лабораторијских експеримената указује на добро квалитативно слагање резултата симулација са опажањима добијеним коришћењем камера високе резолуције и фреквенције. Хистограм маса фрагмената поново сугерише расподелу у складу са степеном функцијом облика (4.16) с тим што експонент у овоме случају има вредност  $\tau_F = 1.9 \pm 0.05$  у опсегу маса фрагмената од најмање једног реда величине. Анализирајући различите експерименталне ситуације, Кун и Херман су демонстрирали изузетне могућности овога модела да репродукује чак и веома суптилна експериментална опажања попут расподеле маса фрагмената у облику степене функције практично независне од почетних услова који доводе до фрагментације, са експонентом расподеле  $\tau_F \approx 2.0$  веома благо зависним од почетне енергије.

Кун и Херман су горе описани модел 2Д грануларног чврстог материјала користили и за истраживање лома и фрагментације при нискоенергетским ударима симулирањем централног судара два истоветна кружна диска (Kun and Herrmann, 1999). Дотични рад је утврдио пут серији радова који су се појавили у наредне две деценије у којима је изучавана оштра фазна транзиција чврстог материјала из оштећеног у фрагментирано стање при динамичком оптерећењу. У овом пионирском раду, Кун и Херман (1999) су, анализирајући енергетику удара и резултујуће расподеле маса фрагмената, дошли до нумеричких



показатеља да се тачка прелаза између два стања понаша као критична тачка и детаљно су разматрали могуће механизме те транзиције.

Као што је наведено, Кун и Херман су симулирали судар два истоветна диска сачињена од грануларног чврстог материјала и приметили су да се у зависности од његове кинетичке енергије исход судара може разврстати у два стања: оштећеног материјала и фрагментираног материјала. Показали су да нагли прелаз између два стања представља доњу међу за појаву расподеле фрагмената у облику степене функције. Коришћен је гореописани ДЕМ са површинском енергијом  $E_s = 0.14 \text{ J}$ , прагом оштећења  $E_d = 17. \text{ J}$ , и вредностима параметара граница лома  $\varepsilon_{\max}^{(b)} = 3\%$  и  $\theta_{\max} = 4^\circ$ . Брзине судара дискова,  $v_{\text{imp}}$ , кретале су се у опсегу од  $2 \text{ m/s}$  до  $35 \text{ m/s}$  при чему су дисковима додељене брзине истоветних интензитета а супротних смерова дуж правца који повезује њихова тежишта (која се подударају са одговарајућим геометријских средиштима дискова) тако да је почетна кинетичка енергија система

$$E_0 = \rho R_D^2 \pi v_{\text{imp}}^2$$

где је са  $\rho$  означена масена густина материјала а са  $R_D$  полупречник диска. Имајући у виду опште-уочену одлику тзв. енергетског скалирања<sup>16</sup> код појава ударне фрагментације, аутори су увели бездимензионални параметар

$$\eta = \sqrt{\frac{E_0}{E_b}} \propto \frac{v_{\text{imp}}}{\sqrt{E_s}} \quad (4.17)$$

у циљу карактеризације судара. У претходном изразу, (укупна) везивна енергија,  $E_b$ , је дефинисана као

$$E_b = N_c E_s$$

максимална енергија која може да буде ослобођена ( $E_R \equiv E_b$ ) у случају тзв. терминалне фрагментације дефинисане потпуном дезинтеграцијом узорка (раскидањем свих  $N_c$  веза у систему, праћеним просечним енергијама расипања  $E_s$ , из чега проистиче настанак искључиво једночестичних фрагмената). (Упоредити са терминалном фрагментацијом на нано скали, односно, изразом (2.36) и дискусијом везаном за слику (2.23).) Предност параметра (4.17) у односу на специфичну енергију је што, сем зависности од величине узорка и брзине удара, укључује и особине материјала преко површинске енергије  $E_s$ .

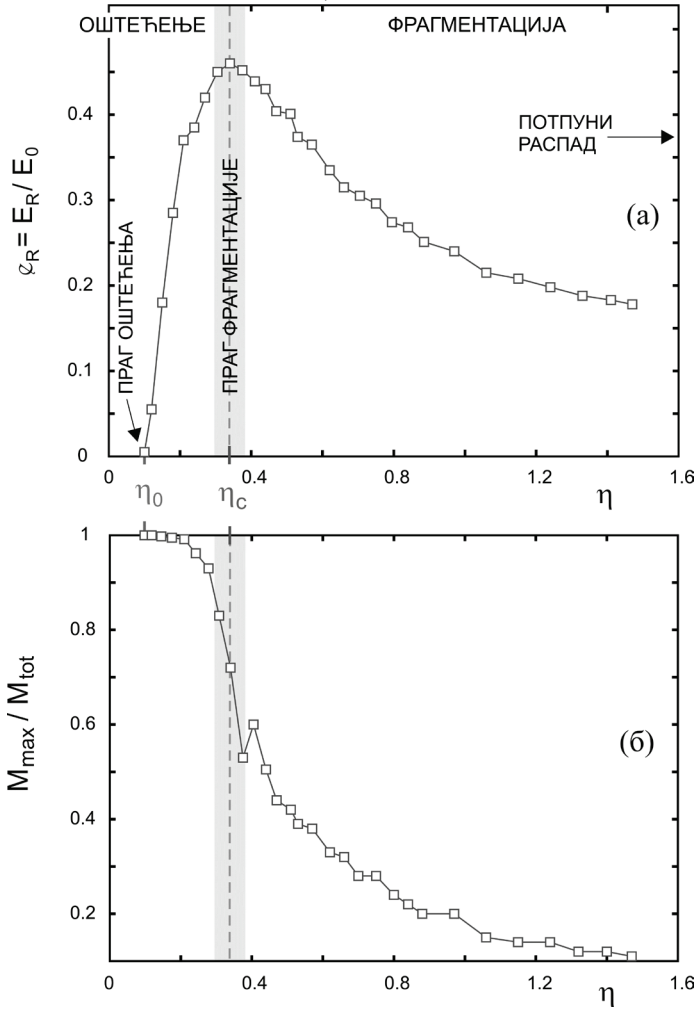
Резултати симулација приказани на слици 4.17а јасно илуструју две фазе: оштећења и фрагментације узорка. Аутори су уочили да се прелаз из једне

<sup>16</sup> Исход фрагментације зависи само од величине специфичне енергије дефинисане количником уложене енергије и укупне масе система.

у другу фазу одликује енергијом раскинутих веза једнаком половини почетне кинетичке енергије судара,  $E_R \approx E_0/2$ . Овај максимум раздваја област нагло повећања, од области благог опадања, криве  $e_R$ , при чему је тачка транзиције названа праг фрагментације и означена са  $\eta_c$ . Варирајући полупречник дискова  $R_D$ , Кун и Херман (1999) су демонстрирали универзалност квалитативног понашања кривих  $e_R = f(\eta)$  уз опажање да се тачка прелаза  $\eta_c$  мало помера улево (вредност се смањује) са повећањем  $R_D$ . Два јасно одвојена режима могу се уочити и на слици 4.17б у којој је приказана промена релативне масе најтежег фрагмента,  $M_{\max}/M_{\text{tot}}$ , са повећањем бездимензионалог односа енергије удара и везивне енергије,  $\eta$ . Овде је важно уочити да аутори као највећи фрагмент идентификују највећи повезани домен диска преостао после удара чиме се долази до парадоксалне ситуације да најтежи фрагмент припада фази оштећења у којој нема фрагментације. Било како било, монотono опадајућа крива илустрована на слици 4.17б има јасно уочљиву промену кривине (други извод једнак нули) чија локација је приближно одређена са  $\eta_c \approx 0.36$  што одговара максималној вредности  $e_R$  уоченој на слици 4.17а.

У циљу расветљавања природе прелаза из оштећеног стања у фрагментирано стање, Кун и Херман (1999) су ставили акценат на еволуцију расподеле маса фрагмената са променом енергије удара. Расподелу маса фрагмената су представљали хистограмима дефинисаним са бројем фрагмената масе  $m$  подељеним са укупним бројем фрагмената, осредњеним са десет симулација са истом енергијом удара  $\eta$ . Како би била добијена иста статистика расподеле за све величине узорка, коришћено је логаритамско одељивање - подаци су распоређивани у одељке (подинтервале, класе вредности) еквидистантне на логаритамској скали. У стању оштећења ( $\eta_0 < \eta < \eta_c$ ) расподела маса фрагмената се одликује са два широко-раздвојена региона на реповима расподеле који рефлектују постојање одређеног броја изузетно малих фрагмената (састављених од, углавном само једног, или ређе два, можда три, многоугаона зрна) и остатка оштећених дискова представљених у овој анализи преко пара изузетно великих *фрагмената* (нешто мањих од укупне почетне масе диска; слика 4.17б).

Главни ефекат постепеног повећавања енергије удара, са становишта овог хистограма, је поступно попуњавање велике раселине између два изолована „одскока“ на расподели фрагмената услед даљег круњења оштећених дискова (представљених са два велика *фрагмента*). У стању фрагментације, нестанком раселине настаје средња област хистограма чији је карактер описан степеном функцијом  $p(m) \propto m^{-\tau_F}$  (4.16). Вредност експонента добијена при критичном параметру енергије удара  $\eta = \eta_c$  је  $\tau_F = 2.27 \pm 0.05$ .



**Слика 4.17.** (а) Бездимензионална енергија раскидања веза  $e_R$ , и (б) маса најтежег фрагмента подељена са укупном масом диска у функцији бездимензионалног параметра удара  $\eta$ . Праг фрагментације је одређен критичном вредношћу бездимензионог односа енергије удара и везивне енергије  $\eta_c \approx 0.36$ . (Преузето са допуштењем издавача из референце (Kun and Herrmann, 1999). Copyright (1999) by the American Physical Society).

Резултати нумеричких симулација сугеришу да и са повећавањем енергије удара,  $\eta > \eta_c$ , понашање расподеле фрагмената остаје у складу са изразом (4.16), с тим што се вредност експонента  $\tau_F$  смањује са повећавањем  $\eta$ . Аутори су, такође, показали да са повећавањем величине дискова,  $R_D$ , средишњи регион расподеле, који је описан степеном функцијом (4.16), постаје све шири док се смањује релативна висина одскока која одговара великим фрагментима при чему вредност експонента  $\tau_F$  остаје непромењена. Опажање да се вредност експонента  $\tau_F$  не мења са величином система је у складу са понашањем

расподеле кластера приликом перколације решетке коначних димензија у критичној тачки (Staufe and Aharoni, 1992). Као што се види, приликом анализе резултата добијених ДЕМ симулацијама, аутори су се позивали на теорију перколације решетке коначних димензија, као на пример критичних појава у системима коначних величина, не уводећи претпоставку о перколацији микропрелина. Пошто анализа еволуције оштећења и лома током симулација судара дискова указује на постојање изразите корелације у простирању прелина у процесу фрагментације, претпоставка о перколацији прелина не би се могла сматрати валидном па и добијени експоненти морају, сходно томе, да се разликују од експонената перколације. У случају критичних појава попут перколације, моменат  $M_k$  расподеле величина кластера дивергира у критичној тачки,  $M_k \propto |\aleph|^{-\mu_k}$ , где  $\aleph$  представља растојање од критичне тачке (рецимо,  $p-p_c$ , где  $p_c$  означава праг перколације). За случај система коначних величина, моменти расподеле  $M_k$  се уместо дивергенцијом карактеришу максимумом у тачки прелаза. Претпостављајући да важи гап-скалирање функције расподеле маса фрагмената

$$pdf(m) \propto m^{-\tau_F} f(m^{\sigma_F} \aleph)$$

у складу са теоријом перколације (Staufe and Aharoni, 1992), понашање система у близини тачке прелаза може да се опише са само два независна експонента  $\tau_F$  и  $\sigma_F$ . Како би проверили да ли мали систем који су изучавали показује трагове оваквог понашања, Кун и Херман су се одлучили на израчунавање момента  $j$ -тог удара

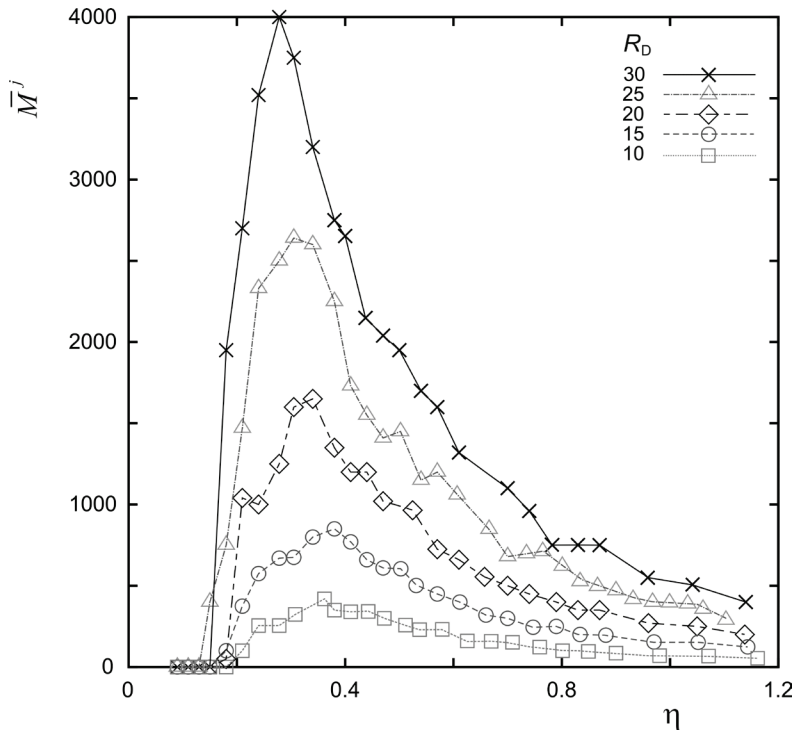
$$M_k^j = \sum_m m^k n^j(m) \quad (4.18)$$

где се горњи индекс  $j$  односи на број догађаја (удара),  $n^j(m)$  означава број фрагмената масе  $m$  у догађају  $j$ , а при сумирању се користе сви фрагменти изузев највећег за оба сударајућа диска. Примењујући концепт фрагментационог фазног прелаза који је развио Кампи (нпр., Campi 1988) у нуклеарној физици проучавајући на основу перколације распад тешког језгра побуђеног ударом, Кун и Херман су израчунавали однос  $M_2^j$  и  $M_1^j$

$$\frac{M_2^j}{M_1^j} = \frac{\sum_m m^2 n^j(m)}{\sum_m m n^j(m)} = \bar{M}^j \quad (4.19)$$

који је једнак просечној маси фрагмента у удару  $j$  (редни број удар),  $\bar{M}^j$ . Вредности просечне масе добијене употребом израза (4.19) осредњене су

коришћењем 10 симулација са истом вредношћу бездимензионалне енергије удара  $\eta$  и приказане на слици 4.18 за пет различитих величина система.



**Слика 4.18.**  $\overline{M}^j = M_2^j / M_1^j$  у функцији  $\eta$  за пет различитих вредности  $R_D$ . (Преузето са допуштењем издавача из референце (Kun and Herrmann, 1999). Copyright (1999) by the American Physical Society).

Уочљиво је да криве  $\langle M_2^j / M_1^j \rangle$  имају јасно изражене максимуме чији се положаји подудару са транзиционим тачкама  $\eta_c(R_D)$  бездимензионалних енергија раскидања веза  $e_R = f(\eta, R_D)$  (слика 4.17а за једну вредност  $R_D$ ). Веома је важно да се уочи да на слици 4.18 са порастом величине система (полупречника дискова  $R_D$ ) врх криве  $\langle \overline{M}^j \rangle = f(\eta)$  постаје све оштрији (висина која одговара максимуму се повећава док се одговарајућа ширина смањује) и помера се улево што је појава типична за критичну тачку код система коначних величина (Campi, 1988).

Статистичка анализа расподеле маса фрагмената, коју су аутори извели на свом ДЕМ моделу релативно мале величине, упућује на закључак да расподела маса фрагмената испуњава релацију гап-скалирања те да се, сходно томе, прелаз из оштећене у фрагментiranу фазу дешава као континуална фазна

транзиција. Контролни параметар фазног прелаза је идентификован са бездимензионалним односом енергије удара и везивне енергије,  $\eta$ , а параметром уређености може се сматрати променљива  $M_{\max}/M_{\text{tot}}$  која представља меру смањења величине највећег фрагмента. Ови закључци у потпуности одсликавају Кампијеве идеје (Campi, 1988) развијене за ударни фрагментациони фазни прелаз тешког језгра. Кун и Херман (1999) су завршили карактеризацију система у околини критичне тачке  $\eta_c$ , одређивањем вредности експонента  $\beta = 0.11 \pm 0.02$  параметра уређености

$$\frac{M_{\max}}{M_{\text{tot}}} \propto |\eta - \eta_c|^\beta, \quad \eta < \eta_c \quad (4.20)$$

и експонента  $\gamma = 0.26 \pm 0.02$  просечне масе фрагмента

$$\left\langle \frac{M_2^j}{M_1^j} \right\rangle \propto |\eta - \eta_c|^{-\gamma} \quad (4.21)$$

Пропорционалност (4.21) важи са обе стране критичне тачке  $\eta_c$ .

На крају, зарад повезивања ове важне студије са каснијим истаживањима, упутно је напоменути да су Кун и Херман (1999) уочили да постојање несаломљивих многоуглова, као основних градивних елемената њиховог ДЕМ модела, ефективно ограничава опажања на нижим просторним скалама. Такође су предвиђали могућност постојање тзв. терминалне (“shattering”) фрагментације када при изузетно великим енергијама удара долази до фазног прелаза целокупне масе система у фазу праха дефинисану са појавом униформно једноатомског облака фрагмената. Израз “shattering” инспирисан је Реднеровом (1990) дискусијом математичког сингуларитета (који је он окарактерисао као патолошку математичку појаву) у аналитичким решењима диференцијалних једначина фрагментације при којем се маса система губи у облаку праха који сачињава *бесконачан* број честица *нулте* масе (“in which mass is lost to a dust phase consisting of an infinite number of zero mass particles”; Redner, 1990).

Кун, Херман и сарадници (Carmona et al., 2008; Timár et al., 2010; Timár et al., 2012) су унапредили раније описане 2Д-ДЕМ моделе ударне фрагментације, са иницијалним контактом у једној тачки, увођењем 3Д геометријских модела (удар лопте у крути зид) у серији радова објављеној у последњој деценији. У овоме прегледу биће само кратко изложена три рада тог импресивног циклуса који се односе на истраживање фрагментације кртих материјала (Carmona et al., 2008), комбиновање експерименталних и теоријских истраживања фрагмента-

ције полимерних материјала (Timár et al., 2010), и синтезу закона скалирања при ударној фрагментацији кртих материјала (Timár et al., 2012).

Коришћени 3Д-ДЕМ, детаљно описан у (Carmona et al., 2008) и тамо наведеним референцама, је по много чему резултат развоја претходног 2Д-ДЕМ (Kun and Herrmann, 1996, 1999) уз неке измене. Превасходно, пројектил у облику лопте представљен је скупином елементарних лоптастих зрнаца двају различитих величина. Ове основне градивне структурне ћелије повезане су гредним елементима који преносе аксијална оптерећења, и оптерећења на смицање, савијање и увијање. Лоптастим елементима не само што је „придружена” маса, него њихово преклапање ( $u_{ij}$  на слици 4.19а) приликом „меког” контакта представља основни улазни податак за одређивање одбојне силе између притиснутих зрнаца на већ описани начин (Potapov et al., 1995; D’Addetta et al., 2001; Potyondy and Cundall, 2004). Укупна сила и момент који делују на свако зрнце (индекси  $i$  и  $j$  на слици 4.19) састоје се од међучестичних контактних сила,  $\mathbf{F}^{(c)} = \mathbf{F}^{(ov)} + \mathbf{F}^{(diss)}$ , сила истезања и савијања,  $\mathbf{F}^{(b)} = \mathbf{F}^{(elo)} + \mathbf{Q}^{(b)}$ , и момената  $\mathbf{M}^{(b)}$  које преносе греде. (Масни симболи означавају векторске величине.) Први сабирак у изразу за контактну силу представља одбојну силу која настаје услед преклапања лоптастих зрнаца (слика 4.19а) које на одређен начин имитира локалну деформацију при Херцовом контакту

$$\mathbf{F}_j^{(ov)} = \frac{4 E^{(p)} \sqrt{R_{eff}}}{3(1 - (\nu^{(p)})^2)} u_{ij}^{3/2} \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (4.22)$$

У изразу (4.22), ознаке  $E^{(p)}$  и  $\nu^{(p)}$  односе се на модул еластичности и Поасонов коефицијент на нивоу појединачних елемената (горњи индекс “ $p$ ” означава зрнце - *particle*); преклапање је дефинисано као  $u_{ij} = R_i + R_j - r_{ij}$ ; полупречник ефективне кривине преко  $1/R_{eff} = 1/R_i + 1/R_j$ ; а јединични вектор правца  $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$ . Други сабирак у изразу за контактну силу,  $\mathbf{F}^{(diss)}$ , односи се на силу дисипације и укључује силу пригушења, силу трења, и моменте увијања (Carmona et al., 2008). Ефективна кривина, заснована на кривинама лоптастих зрнаца у контакту, уводи у моделирање Херцовог контакта произвољну дужинску скалу. Такође, Кармона и коаутори (Carmona et al., 2008) су истакли да коришћење лоптастих зрнаца, зарад једноставног паковања и дефиниције међудејстава, може да утиче на извесно повећање ломне жилавости (односно, дуктилности) система у случају честе појаве смичућег лома под притиском, тј. кад год је други мод (мод II: смицања) значајно заступљен.

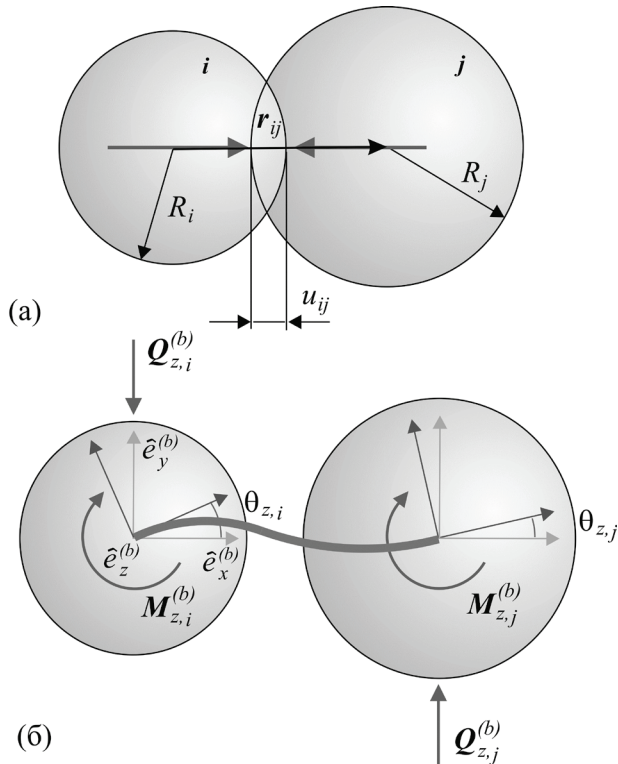
У просторном моделу укупна деформација греде израчунава се суперпозицијом издужења, увијања, савијања и смицања у две различите равни.

Повратна (реституциона) сила која делује на лопту  $j$  која је гредом повезна са лоптом  $i$  одређена је изразом

$$\mathbf{F}_j^{(elo)} = -E^{(b)} A \varepsilon_{ij} \hat{\mathbf{r}}_{ij} \tag{4.23}$$

у коме  $E^{(b)}$  и  $A$  означавају параметре греде и то, редом, модул еластичности и површину попречног пресека, а  $\varepsilon_{ij} = (r_{ij} - r_{ij0})/r_{ij0}$  релативно издужење.

Смичуће силе и моменти савијања, које греда преноси, израчунавају се на основу промене оријентације оба краја греде у односу на координатни систем  $(\hat{\mathbf{e}}_x^{(b)}, \hat{\mathbf{e}}_y^{(b)}, \hat{\mathbf{e}}_z^{(b)})$  везан за тело. Слика 4.19б шематски приказује типичну деформацију до које долази услед обртања оба краја греде у односу на  $z$  осу са правцем  $\hat{\mathbf{e}}_x^{(b)}$  постављеним колинеарно са  $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ . Имајући у виду углове обртања  $\theta_{z,i}$  и  $\theta_{z,j}$ , одговарајуће силе смицања и моменти савијања који одговарају еластичним деформацијама имају облике



Слика 4.19. (а) Контакт са преклапањем два лоптаста зрна. (б) Деформација греде у  $x$ - $y$  равни са истакнутим резултујућим силама на смицање и савијање и моментима увијања.



$$\mathbf{Q}_{z,j}^{(b)} = 3E^{(b)} I \frac{(\theta_{z,i} + \theta_{z,j})}{L^2} \hat{\mathbf{e}}_y \quad (4.24)$$

$$\mathbf{M}_{z,j}^{(b)} = E^{(b)} I \frac{(\theta_{z,i} - \theta_{z,j})}{L} \hat{\mathbf{e}}_z + (\mathbf{Q}_{z,i}^{(b)} \times r_{ij} \hat{\mathbf{e}}_x^{(b)})$$

у којима  $L$  и  $I$  означавају, редом, почетну дужину и аксијални моменат инерције попречног пресека греде. Аналогни изрази могу да се напишу и за обртање око у осе  $(\mathbf{Q}_y^{(b)}, \mathbf{M}_y^{(b)})$  и да се суперпонирају са (4.24). Коначно, моменти увијања израчунавају се коришћењем израза

$$\mathbf{M}_{x,j}^{(b)} = G^{(b)} I_0 \frac{(\theta_{x,i} - \theta_{x,j})}{L} \hat{\mathbf{e}}_x \quad (4.25)$$

у којем  $G^{(b)}$  и  $I_0$  означавају, редом, модул клизања и поларни моменат инерције попречног пресека греде. Силе и моменти (4.24-4.25) се трансформишу у глобални координатни систем пре него што се додају контактним силама и спољним оптерећењима (у виду запреминских и површинских сила).

Раскидање греде, које омогућује моделирање оштећења и лома, дефинише се познатим фон Мизеовим критеријумом пластичног лома (4.15) који узима у обзир начине лома и услед истезања и услед савијања. Кармона и сарадници (Carmona et al., 2008) су две граничне вредности (4.15) за сваки од начина лома (издужење и савијање) насумично бирали из Вејбулове расподеле за сваку греду понаособ, нпр., у првом случају

$$pdf(\varepsilon_m) = \frac{k}{\varepsilon_0} \left( \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_0} \right)^{k-1} \exp \left[ - \left( \frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_0} \right)^k \right] \quad (4.26)$$

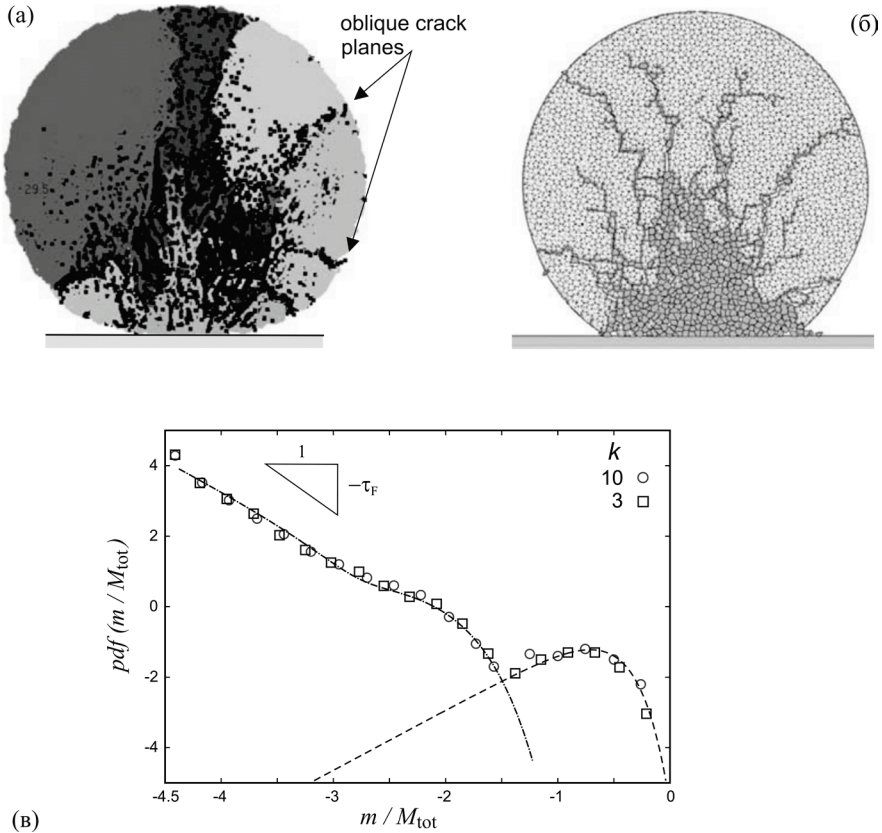
где су  $k$  и  $\varepsilon_0$  параметри којима се контролише ширина расподеле и просечна вредност граничног параметра лома издужењем,  $\varepsilon_{max}$ . Кармона и коаутори су користили вредности параметара  $k = 0.3$  и  $\varepsilon_0 = 0.02$  (односно,  $\theta_0 = 3^\circ$ ) за моделирање кртог материјала

Дефинисање ДЕМ система и одговарајућа карактеризација детаљно су описани у изворној литератури (нпр., Carmona et al., 2008). У овом прегледном раду ће бити само истакнуто, да у описаном моделу разликујемо материјалне параметре на нивоу: (i) основних структурних елемената модела на мезоскали: лоптастих зрнаца  $(E^{(p)}, \nu^{(p)}, \rho^{(p)}) = (3 \text{ GPa}, 0.2, 3000 \text{ kg/m}^3)$  и греда  $(E^{(b)} = 6 \text{ GPa})$ , и

(ii) макроскопског објекта са физичко-механичким особинама материјала ( $E'$ ,  $\nu'$ ,  $\rho$ ) = (7.4 GPa, 0.2, 1920 kg/m<sup>3</sup>) дефинисаним конгломератом зрнаца.

Кармона и коаутори су, коришћењем горе описаног 3Д модела, прво изучавали ударну фрагментацију кртог материјала неуређене мезоструктуре. У крајњем облику, модел се састојао од 136000 греда које су повезивале 22000 лоптастих зрнаца (са два различита пречника,  $D_1 = 0.5 \text{ mm} = D_2/0.95$ ), иницијално распоређених у чворовима кубне решетке, и релаксираних у фази претпроцесирања ( $50000 \delta t = 0.0005 \text{ s}$ ) у лоптасти узорак пречника 16 mm и притисне чврстоће 110 МПа. (Сви параметри модела на мезоскопској и макроскопској просторној скали наведени су у изворној референци (Carmona et al., 2008).) Коришћењем овог ДЕМ аутори су детаљно изучавали настанак и развој појединих механизма фрагментације и њихове последице на расподелу маса фрагмената осредњавањем резултата 36 симулација у којима су насумично бирани прагови лома (на издужење и савијање) и почетни угао закретања узорка ( $\theta_j$ , тачка почетног контакта) пре задавања брзине удара.

Резултати симулација (слика 4.20) указују да при брзинама удара које одговарају критичној тачки (фазног прелаза оштећење-фрагментација) или су нешто мало веће од ње, расподела маса у домену фрагмената средњих величина, може да се опише степеном функцијом (4.18). Типична расподела маса фрагмената за брзину удара мало већу од критичне приказана је на слици 4.20в за два различита нивоа неуређености прага лома греда. Уочљиво је да неуређеност не утиче на облик расподеле која се у двоструко-логаритамском простору састоји из приближно линеарног дела, описаног степеном функцијом за фрагменте малих и средњих маса, и засебног облика за велике масе који се истиче развученом зоном максимума (“широко раме” расподеле). Овако различити саставни делови расподеле указују на различите механизме стварања одговарајућих фрагмената. Кармона и коаутори су детаљно анализирали ове механизме као и режиме фрагментације служећи се, између осталог, и расподелама напона добијеним прорачунима стандардном методом коначних елемената са циљем добијања јаснијег увида у зачеће прслина. (Сличан приступ су мало пре њих користили и Шуберт и коаутори (Schubert et al., 2005).) Аутори су истакли да 2Д симулације ударне фрагментације диска не могу верно да прикажу распад преко примарних меридијалних прслина. Ове прслине настају у зони удара и простиру се ка врху и бочним странама лоптастог пројектила дуж равни лома међусобно одвојених отприлике 60° при чему при критичној брзини удара типично тек свака друга ( $\approx 120^\circ$ ) досегне спољне ивице.



**Слика 4.20.** (а) ДЕМ симулација при брзини удара  $v_{imp} = 140$  m/s са истакнутим секундарним прслинама (боје означавају различите фрагменте). (б) ДЕМ симулација са зрнцима у облику многоуглова. (в) Расподела масе фрагмената при брзини удара  $v_{imp} = 122.5$  m/s при два различита нивоа неуређености прагова лома греда.  $pdf(m)$  је овде представљена као функција густине вероватноћа (густина расподеле) налажења фрагмента масе  $m$  који припада интервалу  $[m, m + \Delta m]$  при чему је маса фрагмента нормализована са укупном масом лопте,  $M_{tot}$ . Крива црта-тачка-црта, у области малих и средњих фрагмената, одговара степеној функцији са експоненцијалним одсечком представљеној изразом (4.27) док испрекидана крива, у области великих фрагмената, одговара Вејбуловој расподели представљеној изразом (4.28). (Криве су цртане одвојено са вредностима параметара:  $\bar{m}_0 = 0.001$ ,  $\bar{m}_1 = 0.004$ ,  $\bar{m}_1 = 0.3$ ,  $\bar{k}_1 = 1.9$ , и  $\tau_F = 2.2$ ). (Преузето са допуштењем издавача из референце (Carmona et al., 2008). Copyright (2008) by the American Physical Society).

Утврђено је да и поред извесних промена у оријентацијама прслина са варирањем степена неуређености материјала, просечна угаона одвојеност примарних меридијалних прслина остаје непромењена. Угаона одвојеност се смањује са брзином удара у складу са Мотовом класичном теоријом фрагментације прстенова (Mott and Linfoot, 1943; Grady, 2006). Уколико је енергија удара довољно велика, по формирању примарних меридијалних

прслина, може доћи до настанка секундарних прслина, које се — дуж закривљених површина — простиру из процесне зоне (области највећег распада и уситњавања материјала у зони контакта са крутим зидом) ка бочним ивицама, доводећи до стварања фрагмената средњих величина комадањем највећих “кришкастих” фрагмената.<sup>17</sup> Најмањи фрагменти настају, природно, у самој процесној зони која се састоји из: (i) купасте зоне униформног двоосног затезања уз притисак у правцу удара коју одликује велика густина насумично распоређених мезопрслина, и (ii) зоне прстенастог оштећења насталог смицањем у граничном подручју контакта деформисаног лоптастог пројектила и крутог зида. Детаљна анализа механизма фрагментације и одговарајућих режима фрагментације изложена је у референцама (Carmona et al., 2008; Paluszni et al., 2016). Одговарајућа карактеризација процеса фрагментације илустрована је расподелом маса фрагмената приказаном на слици 4.20 где дискретни симболи (крugови и квадрати) представљају два различита нивоа неуређености кртог материјала. На основу анализе резултата симулација аутори су предложили композитну расподелу маса фрагмената дефинисану са две засебне функције које одговарају различитим областима маса фрагмената. За масе фрагмената до  $m \approx M_{\text{tot}} / 40$  (око 550 елемената), расподела маса фрагмената добро је описана обликом

$$pdf(m) \propto (1 - \beta) m^{-\tau_F} \exp\left(-\frac{m}{\bar{m}_0}\right) + \beta \exp\left(-\frac{m}{\bar{m}_1}\right) \quad (4.27)$$

раније предложеном у (Aström et al., 2004a, 2004b) и успешно коришћеном за описивање експерименталних резултата и рачунских симулација (видети референце наведене у Carmona et al., 2008). Први сабирак у изразу (4.27) односи се на процес гранања и међусобног срастања нестабилних мезопрслина у процесној зони и у њеном непосредном окружењу. Други сабирак се односи на фрагменте настале простирањем, гранањем и срастањем доминантних прслина (примарних и секундарних) кроз Поасонов процес. Параметар  $\beta$  контролише релативну утицајност ова два процеса док експонент  $\tau_F$  зависи само од димензионалности система. Развучени локални максимум у области великих фрагмената резултат је слабљења ударног таласа, са удаљавањем од процесне зоне, а самим тим и смањивања енергије доступне за горе описане механизме

<sup>17</sup> Ове секундарне прслине су аналогне закривљеним (косим) прслинама у одговарајућим 2Д симулацијама са битном разликом да те косе прслине представљају *примарне* прслине у 2Д фрагментацији док улогу секундарних прслина играју азимуталне прслине које се простиру, отприлике, управно у односу на њих са густином обрнуто пропорционалном растојању од процесне зоне.

лома и уситњавања. Овај реп расподеле који представља популацију највећих фрагмената може да се опише Вејбуловом двопараметарском функцијом

$$pdf(m) \propto \left(\frac{k_l}{\bar{m}_l}\right) \left(\frac{m}{\bar{m}_l}\right)^{k_l-1} \exp\left[-\left(\frac{m}{\bar{m}_l}\right)^{k_l}\right] \quad (4.28)$$

за коју је било емпиријски познато да добро описује расподелу великих фрагмената добијену у многим експериментима, поготово са кртим материјалима. Предложена расподела је у доброј сагласности са експерименталним резултатима (референце су наведене у изворном раду). Расподела је веома робусна и прилично неосетљива на макроскопске особине материјала као што су чврстоћа и расподела неуређености. Само је област великих фрагмената (4.28) зависна од енергије удара због додатних процеса уситњавања до којих долази са повећењем расположиве кинетичке енергије.

Иако су горе описани резултати симулација Кармоне и коаутора значајни за различите материјале са неуређеном мезоструктуром, они су ипак ограничени на класу кртих, хетерогених материјала. Тимар и коаутори (Timar et al., 2010) су проширили употребу наведеног ДЕМ на анализу фрагментације полимерних материјала преко симулације удара полипропиленске лопте у крути зид. Лабораторијски експерименти са изотактичким полипропиленом, који нису предмет овога прегледа, показали су да расподелу маса пластичних фрагмената средњег опсега описује степена функција са експонентом  $\tau_F = 1.2 \pm 0.06$  што је значајно мања вредност од  $\tau_F \approx 1.8 \div 2.1$  добијене за крте материјале са неуређеном мезоструктуром (нпр., Kun and Herrmann, 1996, 1999; Åström et al., 2000; Åström et al., 2004a, 2004b; Carmona et al., 2008). Аутори су прилагодили горе описани 3Д-ДЕМ за моделирање полимера како би испитали узроке те ниже вредности експонента  $\tau_F$ . Конкретно, у циљу репродуковања специфичних механизма лома пластичних материјала уведене су могућности зацељивања (поновног обнављања, зарастања) претходно раскинутих веза (када су зрна међусобно притиснута током накнадне деформације) и лома под притиском. Једна од кључних новина је, дакле, критеријум раскидања греда

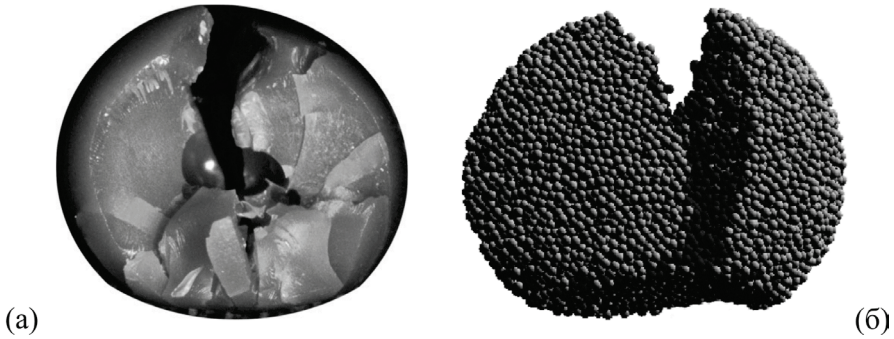
$$\frac{\varepsilon_{ij}^{(b)} |\varepsilon_{ij}^{(b)}|}{\left(\varepsilon_{\max}^{(b)}\right)^2} + \frac{\max(|\theta_i|, |\theta_j|)}{\theta_{\max}} \geq 1 \quad (4.29)$$

који представља нешто измењени облик широко распрострањеног израза (4.15) којим се, преко првог сабирка, оставља могућност утицаја на раскидање везе скраћивања греда услед притисних аксијалних оптерећења. Симулације су показале да локално смицање међучестичних контаката представља главни

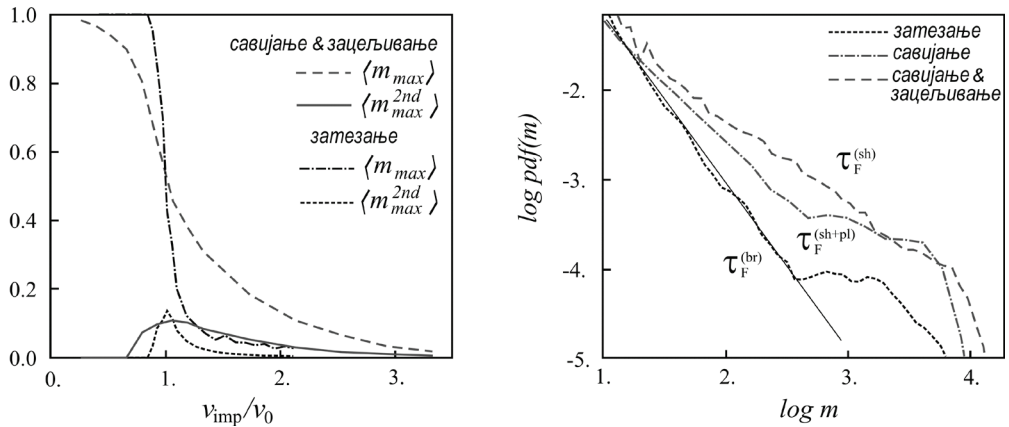
допринос угловима савијања у чворовима греде,  $\theta_i$  и  $\theta_j$ , тако да лом греда којим доминира савијање — у смислу израза (4.29) — карактерише зачеће прслина услед преовлађујућег утицаја смицања. Као и у претходним случајевима коришћења критеријума (4.15), и у овоме преиначеном облику (4.29) усвајањем вредности прагова лома  $\varepsilon_{\max}^{(b)}$  и  $\theta_{\max}$  контролише се релативна важност промене дужине и савијања тако што се повећавањем одређене вредности смањује утицај одговарајућег начина лома греде. Истакнута новина у критеријуму лома (4.29) је да аксијална деформација није ограничена само на издужење греде (позитивне вредности  $\varepsilon_{ij}^{(b)}$ ) као у случају лома кртих материјала. Треба уочити да, с обзиром на негативну вредност првог сабирка у (4.29) у случају притиснуте греде, на лом греде претежно утичу савијање или смицање, тако што повећано скраћивање везе услед притиска има за последицу повећавање отпорности греде на смицање. Још једна новина важна за моделирање понашања пластичних материјала је што се уз усвајање претпоставке о еластичном – идеално кртом понашању појединачне греде до лома уводи и нова, недеформисана греда кад год су два зрнаца у контакту дуже од неког карактеристичног времена  $t_h$ . На овај начин, током процеса деформације, међусобни контакти зрнаца могу бити подвргнути следу догађаја лом–зацеливање (на мезоскали) који доводе до расипања пластичне енергије и до појаве сталне (неповратне) деформације (на макроскали). Варирањем времена зацеливања  $t_h$  контролише се динамички одзив материјала:  $t_h = 0$  одговара случају идеалног пластичног смицања док тенденција  $t_h \rightarrow \infty$  подразумева непостојање обнављања веза, односно, потпуно крто понашање. Како би истражили ефекте локалних модова раскидања греда на процес фрагментације, Кун, Херман и коаутори (Timar et al., 2010) су спроводили рачунарске симулације задавањем  $\varepsilon_{\max}^{(b)} = 0.02$  уз варирање границе лома на савијање  $1.0 \leq \theta_{\max} \leq 200$  (при чему наведене границе интервала подразумевају, тим редом, потпуну доминацију савијања, односно, затезања). Симулације су прекинуте када систем досегне стационарно стање, што је поистовећивано са 1000 узастопних временских корака без раскидања иједне греде. Коначни физички изглед оштећеног пројектила при малим брзинама удара добијен симулацијама са доминантним савијањем ( $\theta_{\max} = 1.0$ ,  $t_h = 0$ ) показује изразиту сличност са одговарајућим експерименталним одликама: велика, трајна деформација у контактної зони, доминантна вертикална прслина која готово распоуђује лопту (слика 4.21). Велика трајна деформација лоптастог пројектила последица је следа ломова и зацељења контактних међудејстава зрнаца у сабијеној зони удара. Изнад те процесне зоне, јављају се напони затезања који доводе до раскидања контактних веза.

На слици 4.22 приказани су изабрани параметри фрагментације: просечне масе најтежег фрагмента и другог–најтежег фрагмента (другог по величини масе) у зависности од брзине удара и расподела маса фрагмента за граничне случајеве фрагментација у којима преовладава раскидање контаката услед затезања (крти лом:  $\theta_{max} = 200$ ,  $t_h = \infty$ ), савијања (доминантно смицање:  $\theta_{max} = 1$ .,  $t_h = \infty$ ), и савијања уз могућност зацељивања раскинутих веза (идеално пластични лом на смицање:  $\theta_{max} = 1$ .,  $t_h = 0$ ). Резултати симулација указују да до фазног прелаз оштећење–фрагментација долази када маса другог–најтежег фрагмента постане упоредиве величине са масом најтежег фрагмента, што одговара тачки превоја на дијаграму  $m_{max}$ , односно, највећој вредности  $m_{max}^{2nd}$ . Треба уочити да слика 4.22a указује да је у случају кртог лома фазни прелаз оштећење–фрагментација веома оштар док је код идеално–пластичног лома праћен расплинутом, широком зоном фазног прелаза.

Најтемељније истраживање закона скалирања приликом ударне фрагментације коришћењем горе описаног 3Д-ДЕМ обавили су Кун, Херман и сарадници (Timar et al., 2012) уз поновно коришћење лоптастог пројектила од кртог материјала са фокусом на област фазног прелаз оштећење–фрагментација. Првенствени циљ је био да се одреде критични експоненти закона скалирања али и да се подробније истражи универзалност фазног прелаз (рефлектована непроменљивошћу експонента расподеле маса фрагментата  $\tau_F$  у области фазног прелаз) коју су неке претходне студије (нпр., Ching et al., 1999; Myagkov and Shumikin, 2005; Sator and Nietala, 2010) доводиле у питање увођењем зависности  $\tau_F$  од брзине удара што је, нпр., аналитички формулисано изразом (5.12) и илустровано сликама 2.13 и 2.18. Током симулације удара кртог, лоптастог пројектила у крути зид до лома гредних спојева долази када је испуњен критеријум (4.15). У претходно приказаном раду Кармоне и коаутора (Carmona et al., 2008) детаљно су истражени параметри модела поређењем резултата симулација са експерименталним модovima деформације и лома пројектила. Тимар и сарадници (Timar et al., 2012) су у своме моделу користили сталне вредности граница лома услед издужења и савијања, редом,  $\varepsilon_{max}^{(b)} = 3\%$  и  $\theta_{max} = 3^\circ$ , што значи да узорак карактерише само структурна неуређеност. Рачунарске симулације су обављене варирањем ударних брзина у широком опсегу за четири различите величине система дефинисане полупречницима лопатастих пројектила  $R_{pr} \in \{3.5, 5.63, 7.03, 8.12\}$  [mm], при чему је просечни пречник зрна 1 mm. На основу резултата наведених ДЕМ симулација, аутори су темељно изучавали фазни прелаз оштећење–фрагментација, расподелу маса фрагмената, и развој оштећења; основни резултати су у даљем тексту приказани тим редом.



**Слика 4.21.** (а) Коначно стање експеримента удара пластичне кугле о тврди зид поткритичном брзином. (б) Симулација ДЕМ показује добро квалитативно слагање са експерименталним резултатом: сличан механизам макролома једном доминантном меридијалном прслином и велика, трајна пластична деформација у околини тачке удара. (Преузето са допуштењем издавача из (Timar et al, 2010). Copyright (2010) by the American Physical Society).



**Слика 4.22.** (а) Просечне масе два најтежа фрагмента: најтежег ( $m_{max}$ ) и следећег по тежини ( $m_{2nd}$ ) у зависности од брзине удара за два гранична случаја кртог лома и идеално-пластичног лома смицањем; и (б) репрезентативне криве густина расподеле маса фрагмената  $pdf(m)$  за три различита начина лома (при чему је маса фрагмента нормализована са укупном масом пројектила,  $M_{tot}$ .) (Преузето са допуштењем издавача из (Timar et al, 2010). Copyright (2010) by the American Physical Society).

Механизми лома и фрагментације на макроскали већ су детаљно описани тако да ћемо овде прећи директно на сажетак квантитативних параметара. Први параметар фрагментације који ће овде бити анализиран је

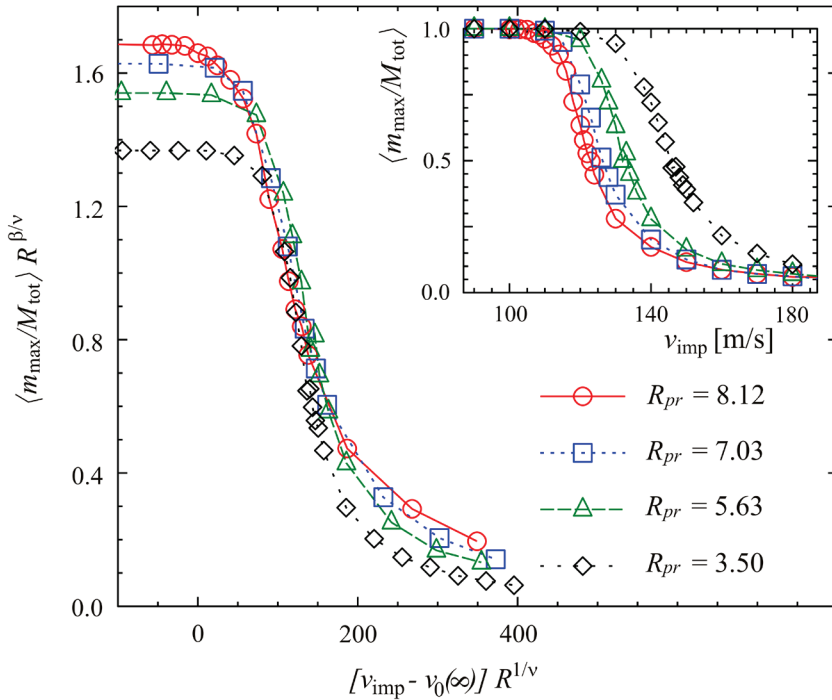


максимална маса фрагмента која је, нормализована са укупном масом пројектила  $m_{\max} / M_{\text{tot}}$ , приказана у зависности од брзине удара на уметку слике 4.23 за четири величине пројектила. (Овде треба поново нагласити да се, сходно увреженој пракси, максималним фрагментом сматра највећи део пројектила преостао после удара чиме се долази у, донекле, парадоксалну ситуацију да фази оштећења — коју карактерише одсуство фрагментације — одговара највећа величина „фрагмента”,  $\bar{m}_{\max} = m_{\max} / M_{\text{tot}} \approx 1$ .) Уочљиво је да монотонно опадајуће криве  $\bar{m}_{\max} = \hat{m}_{\max}(v_{\text{imp}})$  показују добро познату промену кривине при критичној брзини удара  $v_{\text{imp}} = v_0$ , што је у ранијим радовима већ идентификовано са прагом фазног прелаза оштећење–фрагментација (Kun and Herrmann, 1999; Behara et al., 2005). Резултати приказани на уметку слике 4.23 јасно указују на смањење критичне брзине  $v_0$  са повећањем величине система (упоредити са сликом 2.27), што је праћено и повећавањем оштрине прелаза (са тенденцијом ка теоријском сингуларитету при пројектилу „бесконачне” величине). Скалирани облици кривих  $\bar{m}_{\max} = \hat{m}_{\max}(v_{\text{imp}})$  коришћењем израза

$$\langle \bar{m}_{\max}(v_{\text{imp}}, R_{pr}) \rangle = R_{pr}^{-\beta/\nu} F \left\{ \left[ v_{\text{imp}} - v_0(\infty) \right] R_{pr}^{1/\nu} \right\} \quad (4.30)$$

приказани су на главном панелу слике 4.23 уз уочљиво добро преклапање кривих у области фазног прелаза (вредности експонената скалирања дати су у потпису слике). У изразу (4.30),  $F$  означава функцију (која је предмет) скалирања (Timar et al., 2012) а  $\beta$  експонент закона скалирања  $\bar{m}_{\max}$ . Скалиране криве, приказане на главном панелу слике 4.23, показују да се са повећањем величине система квалитет преклапања брзо повећава.

Кун и Херман (Kun and Herrmann, 1999) су још у раној фази свога истраживања фрагментације разматрали разне параметре уређености фазног прелаза, између осталих и  $\bar{m}_{\max}$ , о чему је било речи у потпоглављу 2.6. Том приликом су указали да је фазни прелаз уочљивији када се као параметар уређености користи просечна маса фрагмента (2.46) дефинисана преко момената расподеле маса (2.47). Криве  $m_{ave} = \hat{m}_{ave}(v_{\text{imp}})$  имају изражени максимум у критичној тачки ( $v_0$ ), који је уочљивији од одговарајуће промене кривине функције  $\bar{m}_{\max} = \hat{m}_{\max}(v_{\text{imp}})$ . Као и у случају  $\bar{m}_{\max}$ , и криве  $m_{ave} = \hat{m}_{ave}(v_{\text{imp}}, R_{pr})$  постају све оштрије са повећавањем величине система и њихов врх одговара све мањим критичним брзинама (2.45) што је типични тренд за континуалне фазне прелазе (Campi, 1988; Kun and Herrmann, 1999; Åström et al., 2000). Експонент скалирања просечне масе фрагмента,  $\gamma = 0.10 \pm 0.02$ , обезбеђује најбоље преклапање кривих  $m_{ave} = R_{pr}^{\gamma/\nu} F^{(2)} \left\{ \left[ v_{\text{imp}} - v_0(\infty) \right] R_{pr}^{1/\nu} \right\}$ .



**Слика 4.23.** Уметак: Просечна маса најтежег фрагмента (нормализована са укупном почетном масом лоптастог пројектила) у зависности од брзине удара за четири различита полупречника пројектила. Главни панел: Преклапање кривих  $\bar{m}_{\max} = \hat{\bar{m}}_{\max}(v_i)$  аналитички описано са степеном функцијом (4.30) при следећим параметрима скалирања:  $v_0(\infty) = 107 \text{ m/s}$ ,  $\nu = 1.00 \pm 0.05$ , и  $\beta = 0.25 \pm 0.03$  (Преузето са допуштењем издавача из (Timar et al, 2012). Copyright (2012) by the American Physical Society)

Следећи сегмент рада (Timar et al., 2012) односио се на најважнију карактеристику система подвргнутог фрагментацији, а то је расподела маса фрагмената  $pdf(m)$ . Како је утврђено на основу бројних експеримената и резултата рачунских симулација,  $pdf(m)$  има облик степене функције (4.18) у домену малих (и, донекле, средњих) фрагмената. Универзалност експонента расподеле маса  $\tau_F$  је најупечатљивије опажање у појавама фрагментације: експерименти на великом броју хетерогених материјала (за листу референци погледати изворни рад (Timar et al., 2012)) показали су да вредност  $\tau_F$  не зависи нити од микроструктуре материјала, нити од врсте динамичког оптерећења (начина уношења кинетичке енергије у систем), нити од релевантне дужинске скале – одређена је само димензионалношћу проблема (1Д, 2Д, 3Д) и преовлађујућим механизмима динамичког одзива материјала (крти или дуктилни). Како је већ наведено, с обзиром на то да су неке претходне студије (нпр., Ching et al., 1999; Myagkov and Shumikin, 2005; Sator and Nietala, 2010) доводиле у питање

непроменљивост  $\tau_F$  у зависности од брзине удара у *широј области фазног прелаза* оштећење–фрагментација (нпр., логаритамска зависност типа (5.12)), Тимар и коаутори (Timar et al., 2012) су овоме питању од суштинског теоријског и практичног значаја посветили дужну пажњу. Изведен је велики број 3Д-ДЕМ симулација при наткритичним брзинама удара ( $v_{imp} \geq v_0$ ) и спроведена анализа скалирања расподела маса фрагмената.

Како је већ било речи у сажетку рада (Carmona et al., 2008), анализа је показала да се, при брзинама удара *нешто мало* већим од критичне,  $pdf(m)$  лоптастих пројектила састоји из два дела: (i) за мале и средње фрагменте расподела је у облику степене функције са експоненцијалним одсечком (4.27), а (ii) за велике фрагменте у облику Вејбулове (4.28) или лог-нормалне расподеле. Тимар и сарадници (Timar et al., 2012) су избор брзина мало већих од критичне —  $v_{imp} \in \{130, 160, 190\} [m/s] > v_0 (R_{pr} = 8.12 \text{ mm}) = 122 \text{ m/s}$  — образлагали потребом да се у највећој могућој мери умањи ометајући ефекат великих фрагмената. Резултати симулација указују на то да се расподела маса фрагмената слаже квалитативно са изразом  $(4.27)_{\beta=0} \therefore pdf(m) \propto m^{-\tau_F} \exp(m/m_0)$ .

При анализи резултата симулација приказаних на слици 4.24, прво можемо да уочимо да је *извесно* повећање нагиба (у приближно линеарном делу расподеле маса фрагмената у опсегу малих маса) много мање од истих о којима су извештавали, нпр., Чинг и сарадници (слика 2.13) и Сатор и Хиетала (Sator and Nietala, 2010). Пре свега, за ово може да се понуди неколико могућих објашњења заснованих на коришћењу не само очигледно побољшаног модела (3Д наспрам 2Д фрагментације, коришћење већег броја зрнаца) него и ужег опсега кинетичких енергија непосредно изнад критичне вредности која одговара фазном прелазу. Тимар и сарадници (Timar et al., 2012) су детаљној анализи резултата симулација, ради објективног одређивања експонента расподела маса фрагмената  $\tau_F$ , посветили велику пажњу. Њихова основна теза је била да повећање нагиба кривих у домену малих маса фрагмената *привидно* указује на повећање  $\tau_F$  (коришћен је израз “spurious increase” – привидно, „лажно” повећање) услед неизбежног, ометајућег ефекта постојања у ДЕМ несаломивих зрнаца (основних мезоструктурних елемената) минималне величине. (Узгред, чини се да ово објашњење намеће потребу потврде ове кључне тезе коришћењем МД симулација код којих величина атома дефинише природну величину најмањег, несаломивог фрагмента.)

Даље, како је већ раније коментарисано приликом прегледа рада Чинг и сарадника (Ching et al., 1999), процена  $\tau_F$  (коришћењем нагиба приближно линеарног сегмента у опсегу малих и средњих маса фрагмената на слици 4 изворне референце) је неизбежно скопчана са одређеном произвољношћу у одређивању самог опсега маса које припадају дотичном линеарном сегменту.

С тим у вези, аутори су истакли да се са приближавањем ударне брзине критичној брзини са горње стране ( $v_{\text{imp}} \rightarrow v_0^+$ ), експоненцијални одсечак расподеле помера ка већим величинама маса што ствара *привид* смањивања нагиба. Да би проверили евентуалну зависност  $\tau_F = \hat{\tau}_F(v_{\text{imp}})$ , аутори су израчунали  $m_{\text{ave}}$  коришћењем израза (2.46) а потом са њом скалирали, по обе осе, изворне криве приказане у уметку слике 4.24:  $pdf(m) \rightarrow pdf(m)m_{\text{ave}}^{\delta_F}$  и  $m \rightarrow m/m_{\text{ave}}^{\kappa_F}$ . Слика 4.24 приказује веома успешно преклапање кривих за вредности експонената  $\delta_F = 2.15 \pm 0.02$  и  $\kappa_F = 1.15 \pm 0.02$ . Извесно одступање, од иначе веома квалитетног преклапања кривих, у области најмањих фрагмената, аутори су, како је већ било речи, објашњавали постојањем несаломивих зрнаца у ДЕМ; стиче се утисак да овај важан аргумент није довољно образложен.

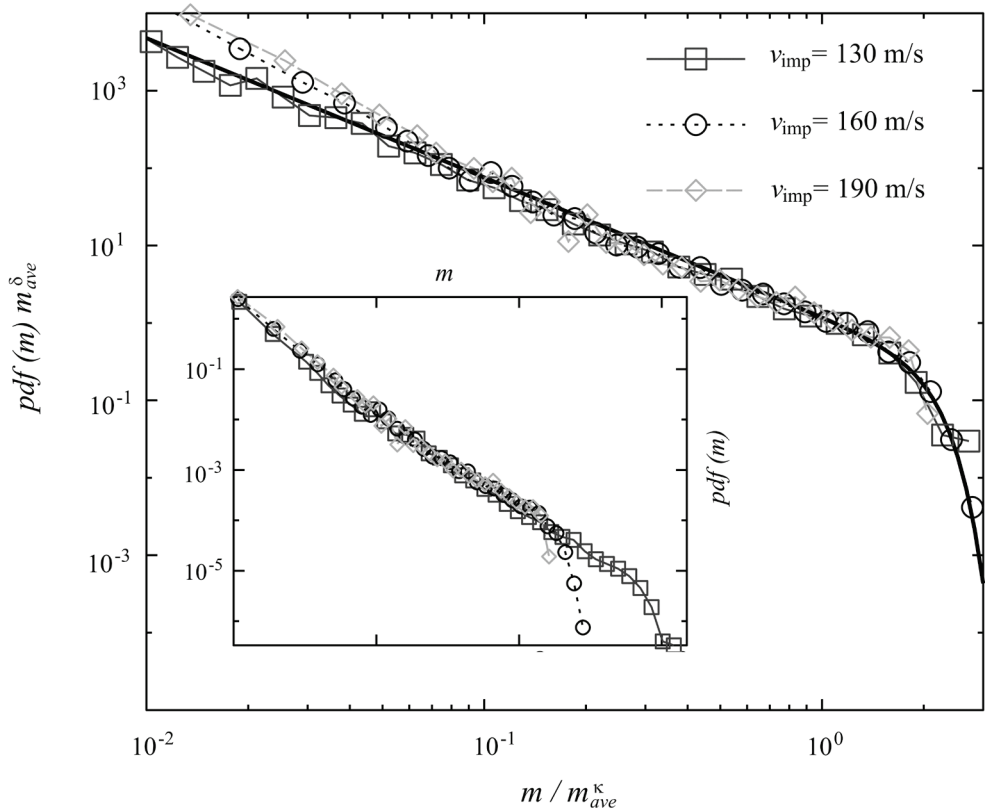
Сходно резултатима скалирања, аутори су извели закључак да је  $pdf(m, v_{\text{imp}})m_{\text{ave}}^{\delta_F}$  функција искључиво  $m/m_{\text{ave}}^{\kappa_F}$  те да расподела маса фрагмената има облик

$$pdf(m, v_{\text{imp}}) = m_{\text{ave}}^{-\delta_F} \Phi(m/m_{\text{ave}}^{\kappa_F}) \quad (4.31)$$

где је утицај  $v_{\text{imp}}$  узет у обзир индиректно преко  $m_{\text{ave}} = \hat{m}_{\text{ave}}(v_{\text{imp}})$ . Пошто је  $\kappa_F \approx 1$ , израз (4.31) је конзистентан са широко-распрострањеним изразом (4.27) $_{\beta=0} \therefore pdf(m) \propto m^{-\tau_F} \exp(m/m_0)$ . На слици 4.24, пуна, дебела линија одговара вредности експонента  $\tau_F = 1.80 \pm 0.05$ . Из услова нормализације следи да мора бити испуњен услов  $\delta_F = \tau_F \cdot \kappa_F$ , што горе наведене величине експонената и испуњавају. Аутори су изразили своје очекивање да би релација скалирања (4.31) у функцији просечне масе фрагмента, требало да важи не само у околини критичне тачке (у широј области фазног прелаза оштећење–фрагментација) него и у фази фрагментације јер она претпоставља само хомогеност функције расподеле маса фрагмената (Timar et al., 2012). Крајњи закључак по овом питању је био да се величина експонента расподеле масе фрагмената  $\tau_F$  мора одређивати узимањем у обзир и експоненцијалног одсечка, из чега проистиче независност  $\tau_F$  од брзине удара у околним критичним тачкама, а тиме и универзалност фрагментације у смислу изложеном у (Oddershede et al., 1993).

Последњи сегмент рада (Timar et al., 2012) односио се на еволуцију оштећења током ударне фрагментације. Аутори су користили најједноставнији, скаларни параметар оштећења,  $D(t) = n_b^{(b)}(t)/N_{\text{tot}}^{(b)}$ , где  $n_b^{(b)}(t)$  и  $N_{\text{tot}}^{(b)}$  представљају, редом, број раскинутих веза (у одређеном временском тренутку) и укупни број веза у узорку. (Подсећања ради, горњи индекс (b) односи се на гредне везе.) Како је већ било речи, строго узев, овај облик параметра оштећења је погодан само за напонска стања која одликује приближно исти интензитет главних напона (било да се ради о оптерећењима на затезање или притисак) што има за последицу приближно једнообразну расподелу напона по целом узорку (нпр., хидростатички притисак) (Krajinovic and Mastilovic, 1995). Без обзира на то,

скаларни параметар оштећења се, зарад своје једноставности, веома често користи у рачунарским методама прекидних средина као прва апроксимација и поред тога што занемарује просторну расподелу и оријентацију раскинутих веза (односно, микропрелина). Добро је познато да је скаларни параметар оштећења — у одсуству могућности зацељивања раскинутих веза — монотono растућа величина [ $0 \leq D(t) \leq 1$ ], где се доња међа односи на неоштећени материјал а горња на материјал који је прошао кроз терминалну фрагментацију ( $m_{\max} \equiv m_0$ ,  $n_F \equiv N_{\text{tot}}^{(b)}$ ). Аутори су анализу оштећења узорка почели обрадом резултата симулација  $D(t, v_{\text{imp}})$  у циљу добијања брзине оштећења,  $dD(t, v_{\text{imp}})/dt$ . При томе су били усредсређени на поткритичне брзине удара (фаза оштећења) и *наткритичне* брзине непосредно након фазног прелаза (у раној фази фрагментације).



**Слика 4.24.** Уметак: Расподела маса фрагмената за три различите брзине удара мало веће од критичне брзине ( $v_0 = 123.5$  m/s) за највећи коришћени полупречник пројектила  $R_{pr} = 8.12$  mm. Главни панел: Преклапање кривих приказаних у уметку после скалирања са просечном масом фрагмента подигнутом на одговарајуће степене по обе осе ( $\delta_F = 2.15 \pm 0.02$  и  $\kappa_F = 1.15 \pm 0.02$ ). (Преузето са допуштењем издавача из (Timar et al, 2012). Copyright (2012) by the American Physical Society)

У првом случају, временске историје брзине пораста параметра оштећења биле су звонастог облика за све брзине удара,  $v_{\text{imp}} \in \{30, 40, 50, 60\}$  [m/s], с тим што повећавање брзина прати јасно уочљив, добро познати, тренд да врхови кривих постају израженији (тј., звонасти облици оштрији) уз досежање максимума при мањим критичним брзинама док се, притом, сама вредност тог максимума наравно повећава. Кун, Херман и сарадници (Timar et al., 2012) су потом извршили веома успешно преклапање кривих еволуције брзина оштећења при различитим брзинама удара коришћењем следећег закона скалирања у поткритичној области

$$\frac{dD(t, v_{\text{imp}})}{dt} = v_{\text{imp}}^{\xi_F^{(1)}} \Psi^{(1)}\left(t v_{\text{imp}}^{\eta_F^{(1)}}\right) \quad (4.32)$$

У изразу (4.32),  $\Psi^{(1)}$  означава функцију скалирања а најбоље преклапање кривих постигнуто је коришћењем експонената  $\xi_F^{(1)} = 4.7 \pm 0.2$  и  $\eta_F^{(1)} = 0.25 \pm 0.05$ .

У фази фрагментације при наткритичним брзинама удара ( $v_{\text{imp}} \in \{110, 120, 130, 140\}$  [m/s], мало већим од  $v_0(\infty) = 107$  m/s), брзине оштећења досежу за ред величина веће интензитета од оних добијених при поткритичним брзинама. Звонасти облик кривих је нешто поремећене симетрије због израженог заносења у леву страну (супротно позитивном смеру временске осе). Аутори су поново успели да изврше веома успешно преклапање кривих брзина оштећења, које одговарају различитим брзинама удара, коришћењем закона скалирања

$$\frac{dD(t, v_{\text{imp}})}{dt} = [v_{\text{imp}} - v_0(\infty)]^{\xi_F^{(2)}} \Psi^{(2)}\left(t [v_{\text{imp}} - v_0(\infty)]^{\eta_F^{(2)}}\right) \quad (4.33)$$

уз коришћење експонената  $\xi_F^{(2)} = 0.33 \pm 0.05$  и  $\eta_F^{(2)} = 0.11 \pm 0.02$ . Дакле, исход пажљиве анализе резултата ДЕМ симулација указује да је структура скалирања (4.33) истог облика као и претходна (4.32), са важном разликом да је брзина удара  $v_{\text{imp}}$  замењена са „удаљеношћу” од критичне тачке  $v_{\text{imp}} - v_0(\infty)$ . (Упоредити са (Stauffer and Aharony, 1992).)

Вредност параметра оштећења достигнута на крају процеса фрагментације добија се интеграцијом израза за брзине оштећења (4.32) и (4.33)

$$D_{\text{fin}} = \int_0^{\infty} \frac{dD(t, v_{\text{imp}})}{dt} dt \quad (4.34)$$

чиме се добијају одговарајући облици скалирања за фазе оштећења и фрагментације, редом

$$D_{\text{fin}} \propto v_{\text{imp}}^{\alpha_F^{(1)}}$$

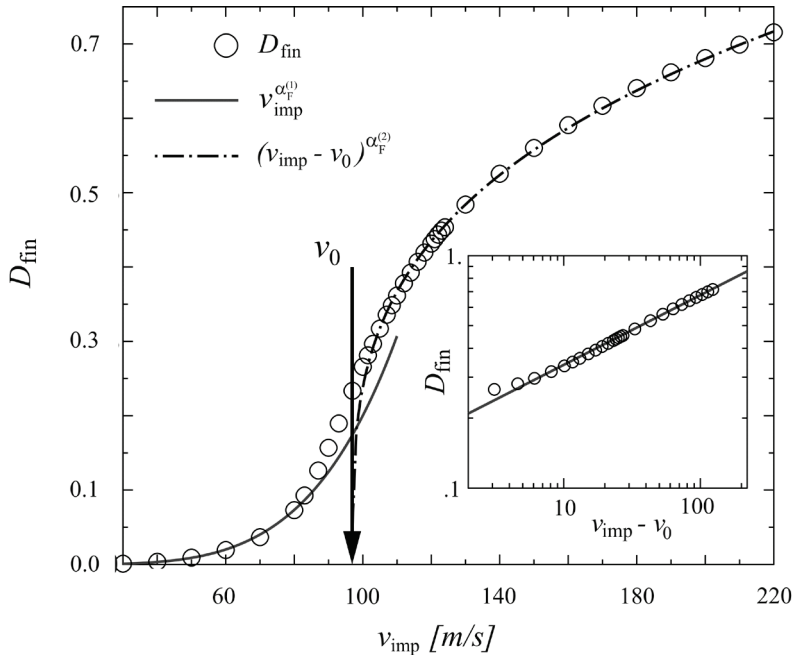
(4.35)

$$D_{\text{fin}} \propto (v_{\text{imp}} - v_0)^{\alpha_F^{(2)}}$$

Пошто је критични експонент коначног оштећења  $\alpha_F$  дефинисан експонентима скалирања брзине оштећења

$$\alpha_F = \zeta_F - \eta_F,$$

слиеди, на основу горе процењених вредности експонената, да у фазама оштећења и фрагментације има вредности  $\alpha_F^{(1)} = 4.45$  и  $\alpha_F^{(2)} = 0.22$ . Зависност коначне вредности параметра оштећења од брзине удара (4.35) илустрована је на слици 4.25.



**Слика 4.25.** Коначно оштећење у зависности од брзине удара. Пуна црвена линија и испрекидана плава линија илуструју, редом, законе скалирања (4.35<sub>1</sub>) и (4.35<sub>2</sub>) при вредностима експонената  $\alpha_F^{(1)} = 4.5$  и  $\alpha_F^{(2)} = 0.29$ . Уметак: Зависност у логаритамском простору  $D_{\text{fin}}$  од  $(v_{\text{imp}} - v_0)$  при чему је за критичну брзину коришћено  $v_0 = 98$  m/s; одређивањем нагиба праве линије, 0.29, процењена је вредност експонента. (Преузето са допуштењем издавача из (Timar et al, 2012). Copyright (2012) by the American Physical Society). Резултате ДЕМ симулација приказане кружићима, занимљиво је упоредити са резултатима Шен и коаутора (Shen et al., 2017) који при мањем опсегу брзина оптерећивања добијају линеарну зависност оштећења од брзине.

На слици 4.25, кружићима су обележене вредности коначног оштећења добијене симулацијама. Пуна црвена линија и испрекидана плава линија демонстрирају успешност, закона скалирања (4.35<sub>1</sub>) и (4.35<sub>2</sub>), тим редом, у репродуковању тих резултата. Зависност  $D_{\text{fin}}$  од удаљености од критичне тачке  $v_{\text{imp}} - v_0(\infty)$ , приказана у уметку исте слике у логаритамском простору, омогућава да се одређивањем нагиба (0.29) провери исправност горње процене експонента  $\alpha_F^{(2)} = 0.22$ .



## 5 Честичне методе

Честични модели представљају један од многих покушаја да се премости јаз између микроскопске и макроскопске просторне скале (слика 1.1). За њих се може рећи да су генерализације модела мрежа опруга који укључују динамичке ефекте а могу се сматрати и инжењерским изданком МД на произвољно одабраној просторној скали (Van Mier, 2007). Пошто у корену имају МД технике, честичне методе се понекад називају и квази-МД методе. Дакле, основна особеност честичних модела у односу на МД лежи у грубљој просторној скали (од микроскале кристалних решетки; види слику 1.1) и, с тим у вези, феноменолошком конститутивном моделу који дефинише међучестичну интеракцију. Као што ће се видети из примера који следе, овај конститутивни модел може али и не мора да има директно исходиште у међуатомским реакцијама које емпиријски потенцијали настоје да обухвате. Изузев тога, усвојене технике рачунских симулација коришћењем честичних модела су углавном исте оне које су добро познате из традиционалне МД литературе (Allen and Tildesley, 1987; Naile, 1992; Rapaport, 2004). Без обзира на многе повољности које пружа, овај моћни метод тек од недавно почиње да стиче заслужено место у рачунској механици прекидних система. За развој честичних метода најзаслужнији је Гринспен (Greenspan, 1989, 1997) који је уочио њихову вредност као алтернативе рачунским методама физике континуума за проблеме који постају или неизводиви или претерано захтевни са становишта трајања симулације у случају примене атомистичких, МД, или хибридних метода.

У основи, систем се састоји од  $N_{par}$  честица познатих маса  $m_i$ , и положаја  $\mathbf{r}_i$  ( $i = 1, \dots, N_{par}$ ), распоређених, у зависности од материјала који се моделира, насумично или, чешће, правилно у складу са топологијом неке мреже. Позната почетна конфигурација карактерише нулто (референтно) напонско стање. Методологија прорачуна захтева апроксимативно решавање система диференцијалних једначина са задатим почетним условима. У произвољном временском тренутку

( $t > 0$ ), положај и количина кретања сваке честице дефинисани су другим Њутновим законом. Кретање сваке честице и сваког ансамбла, т.ј. свака физичка реализација неког типа неуређености, је детерминистичка. Како је већ поменуто, уходане МД технике прилагођене су у претходне две деценије за симулирање материјала на грубљим просторним скалама при чему улогу атома или молекула преузима неки већи комад материјала, који се често назива честица континуума или квази-честица. Материјалне честице су често у међусобној интеракцији у складу са једноставним законом централне силе који у потпуности одређује функцију густине деформационе енергије (“strain energy density function”) у зависности од њихових положаја (2.1б) (Van Mier, 2007). Као последица избора централних међудејстава међу паровима честица, укупна еластична деформациона енергија система зависи искључиво од положаја честица,  $\mathbf{r}_i$  ( $i = 1, \dots, N_{par}$ ). Систем од  $N_{par}$  Њутнових диференцијалних једначина кретања система честица са дефинисаним количинама кретања  $\mathbf{p}_i = m_i \dot{\mathbf{r}}_i$ , дат изразом (2.2), најчешће се апроксимира одговарајућим системом коначних разлика и потом решава коришћењем неког од многих расположивих алгоритама (поглавље 2).

Занимљиво је да се уочи да временски реверзибилна једначина за израчунавање наредног положаја честице система (2.3) може да се модификује у следећи облик

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \eta [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \delta t)] + \delta t^2 \mathbf{a}_i(t) \quad (5.1)$$

где је  $\eta$  коефицијент пригушења. Реверзибилна шема (5.1) се користи, најчешће са вредношћу коефицијента пригушења  $\eta = 0.95$ , при симулацијама квазистатичких проблема ради дисипације кинетичке енергије у циљу добијања равнотежне конфигурације.

Претпостављајући да су међучестичне силе конзервативне, интензитети централне силе којом честица  $j$  делује на суседну честицу  $i$  и резултујуће силе којом на честицу  $i$  делују сви први суседи, могу се израчунати коришћењем израза (2.2б). Сем најчешће коришћених, Верлејевог (2.3) и Стормеровог (2.4), алгорита остале интеграционе методе као што су Биманов алгоритам, полукорачни „жабљи скок” (позициона Верлејева шема), Гирова метода предвиђања и исправке (“the half-step ‘leap-frog’, Gear predictor-corrector”) разматране су у литератури а неке су приказане и у овом прегледу.

У циљу повећавања брзине извршавања програма корисно је направити и одржавати листу суседа за сваку честицу као што је уобичајена пракса у МД. Између периодичних ажурирања листе суседа, програм не проверава могућа међудејства између свих честица у систему него само оних које се на налазе на листи.

У свим честичним моделима, међучестични потенцијал (који, како је већ напоменуто, у овом случају представља конститутивни закон) мора бити усвојен на самом почетку истраживања. Уз просторно-временску скалу симулација, овај потенцијал представља основну разлику између МД и честичних модела. Избор потенцијала је од суштинске важности из најмање два разлога: (i) тачност и адекватност потенцијала диктирају квалитет резултата симулација (као и код МД), (ii) сложеност потенцијала одређује ефикасност програма у погледу времена извршавања. Један од најчешће коришћених пар-потенцијала за међучестичне интеракције

$$\phi(r_{ij}) = -\left(\frac{1}{p-1}\right) \frac{P}{r_{ij}^{p-1}} + \left(\frac{1}{q-1}\right) \frac{Q}{r_{ij}^{q-1}}, \quad q > p > 1 \quad (5.2)$$

$$f_{ij} = -\frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} = -\frac{P}{r_{ij}^p} + \frac{Q}{r_{ij}^q}$$

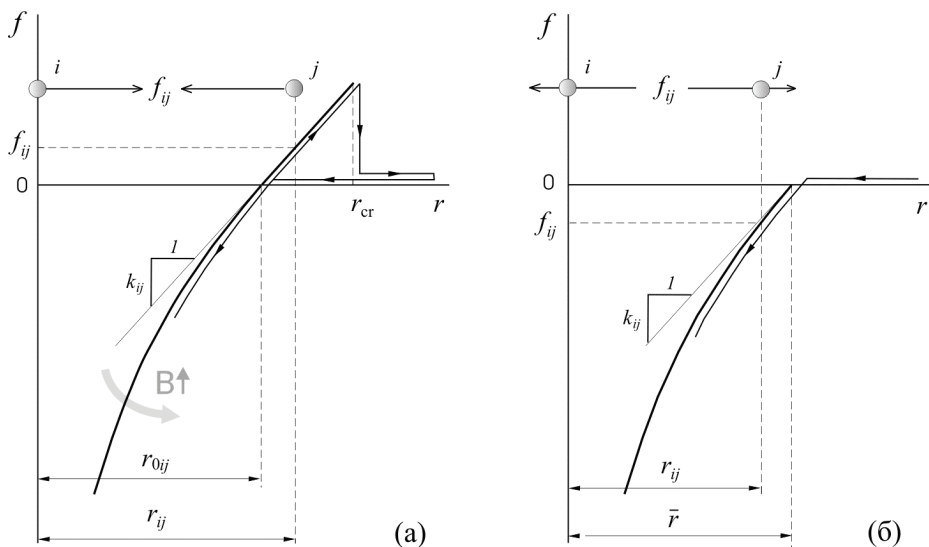
представља поопштење добро познатог Ленард-Џоунсовог 6-12 потенцијала (2.5). Гранични случај експонента  $p = 1$  детаљно је анализиран у референци (Wang and Ostoja-Starzewski, 2005) са алтернативним обликом потенцијала који је неопходан због сингуларности (5.2) за ту вредност експонента. У вези са релацијом (5.2),  $P$ ,  $Q$ ,  $p$  и  $q$  су позитивне константе, и  $q > p$  како би се добио одбојни ефекат који је неопходно да буде много јачи од привлачног. Класична честична метода Гринспена (Greenspan, 1997), заснована на међучестичној интеракцији (5.2), нашла је широку примену у даљем развоју ових метода као што ће се видети из прегледа који следи. Овде само треба уочити да из услова нултог напонског стања у равнотежној конфигурацији,  $f_{ij} = 0$  (5.2<sub>2</sub>), следи израз за равнотежно међучестично растојање

$$r_{ij0} = \left(\frac{Q}{P}\right)^{\frac{1}{q-p}} \quad (5.3)$$

дефинисан вредностима четири параметра међучестичног потенцијала (5.2<sub>1</sub>). У принципу, равнотежно међучестично растојање може да се смањи до нивоа пар ангстрома у ком случају се честични модел своди ма МД модел (Wang et al., 2010). Метода је заснована тако да одржава непроменљивост масе и енергије честичног система и задовољава законе међучестичне интеракције између свих честица. Гринспен је локалност деловања међучестичних сила обезбедио дефинисањем граничног растојања локалне интеракције који се може посматрати као параметар прекидач који искључује интеракцију између честица чије међусобно

растојање је веће од граничног. Вредност овога параметра је касније била предмет расправе о којој ће бити речи, али је локалност међудејстава између честица неизоставни састојак свих честичних метода.

Још један од потенцијала који је нашао широку примену у честичним моделима (Mastilovic and Krajinovic, 1999a) за симулације понашања кртих материјала на мезоскали представља комбинацију Борн-Мејеровог (Born-Mayer) (5.4<sub>1</sub>) и Хуковог (Hookean) (5.4<sub>2</sub>) потенцијала. Резултујуће особине истезања везе апроксимирани су линеарном релацијом сила-издужење са одсецањем приликом затезања (Хуков потенцијал идеално кртог система), и нелинеарном релацијом сила-издужење приликом притискања (слика 5.1). Ова потоња инспирисана је Борн-Мејеровим потенцијалом (2.6) првобитно развијеним зарад моделирања одбојних међудејстава између јонских кристала са максимално попуњеним енергетским нивоима електронског омотача (“closed-shell repulsion in ionic crystals”) (Born and Huang, 1956; Vitek, 1996). Релација сила-растојање, илустрована сликом 5.1) уведена је у циљу репродуковања неких важних одлика деформационог процеса *типичних* за разматране квази-крте материјале као што су: крто понашање при затезању, повећање брзине ударног таласа и смањење стишљивости са повећањем притиска. Овај хибридни потенцијал има следећи облик



**Слика 5.1.** Хибридни потенцијал (5.4). Шематски приказ интеракције између честица које (а) или јесу или су биле први-најближи суседи, и (б) нису у почетној (референтној) конфигурацији биле први-најближи суседи. Сива стрелица указује на ефекат повећавања параметра  $B$  који дефинише стрмину одбојног зида. (Преузето из референце (Mastilovic and Krajinovic, 1999a) са допуштењем издавача. Copyright (1999) by Elsevier)

$$\phi^r(\bar{r}_{ij}) = \frac{k_{ij} r_{0ij}^2}{(B-2)} \left( \frac{1}{B} e^{B(1-\bar{r}_{ij})} - \bar{r}_{ij}^{-1} \right), \quad \bar{r}_{ij} < 1 \quad ; \quad \phi^a(\bar{r}_{ij}) = \frac{1}{2} k_{ij} r_{0ij}^2 (\bar{r}_{ij}^2 - 2\bar{r}_{ij}), \quad \bar{r}_{ij} \geq 1$$

$$f_{ij}^r(\bar{r}_{ij}) = \frac{k_{ij} r_{0ij}}{(B-2)} \left( e^{B(1-\bar{r}_{ij})} - \bar{r}_{ij}^{-2} \right), \quad \bar{r}_{ij} < 1 \quad ; \quad f_{ij}^a(\bar{r}_{ij}) = k_{ij} r_{0ij} (\bar{r}_{ij} - 1), \quad \bar{r}_{ij} \geq 1$$
(5.4)

где горњи индекси  $r$  и  $a$  означавају, тим редом, одбојну и привлачну грану интеракције,  $k_{ij}$  крутост везе при затезању (чија се просечна вредност одређује на основу жељеног модула еластичности), док подешавајући параметар  $B$  дефинише стрмину одбојног зида (слика 5.1) и може бити одабран, на пример, коришћењем балистичке једначине стања.<sup>18</sup> Дакле, параметри међучестичног потенцијала се не докучују разматрањем понашања материјала на микро него на макро скали.

Треба уочити да се линеарне интеракције, карактеристичне за еластично-крто понашање материјала, могу сматрати специјалним случајем горе наведеног хибридног потенцијала с тим што се привлачни део потенцијала (5.4<sub>1</sub>) користи и у одбојном домену (Крајсџинович и Вујосевић, 1998). Међутим, по аналогији са  $\alpha$ - $\beta$  решеткастим моделом представљеним у поглављу (3.2), могуће је додати у међучестичну интеракциону шему и угаону опругу

$$f_{ij}(\bar{\varphi}_{ij}) = k_{ij}^{\varphi} \varphi_{0ij} (\bar{\varphi}_{ij} - 1)$$

где је  $\bar{\varphi}_{ij} = \varphi_{ij} / \varphi_{0ij}$  текући угао између честица  $i$  и  $j$  нормализован са одговарајућом вредношћу истог угла у референтној равнотежној конфигурацији (у почетном тренутку). Коefицијент угаоне крутости

$$k_{ij}^{\varphi} = \frac{\sqrt{3} r_0^2 (1 - 3\nu_0) E_0}{18(1 - \nu_0^2)}$$

је функција не само еластичних константи изотропног материјала у неоштећеном стању ( $E_0, \nu_0$ ) него и параметра мреже ( $r_0$ ) (Wang et al., 2009a).

Динамика придруживања честица (морфолошки) идеалној решетки, подвргнутој униформном напонском стању, је потпуно детерминистичка. Међутим, конфигурације честица, кристалних зрна или молекулских ланаца које сачињавају инжењерски материјал нису идеалне. Неуређеност може бити тополошка (неједнак координациони број (који дефинише број првих суседа)), геометријска (неједнака дужина међучестичних веза) или структурна (неједнаке крутости и/или чврстоће међучестичних веза). Неуређеност се повећава са

<sup>18</sup> Балистичком једначином стања назива се функционална веза између брзине простирања поремећаја и брзине честице,  $C = C_0 + S_1 u_p + S_2 u_p^2 + \dots$  (Meyers, 1994).

развојем оштећења током процеса деформације (индукована неуређеност). Стога је, ради описивања деформације кртог материјала са насумичном структуром на нижим просторним скалама, неопходно увести затечену неуређеност (“quenched disorder”; неуређеност која постоји још пре оштећења материјала деловањем оптерећења) у рачунарски модел. Та иницијална неуређеност, затечена замрзнута у систему, може бити уведена кроз расподеле вероватноћа чврстоћа, крутости, и система изостављених међучестичних веза (који имитира порозност). Неуређеност која се приписује деловању примењених механичких и термичких оптерећења (индукована) треба да буде одређена симулацијом и апроксимирана аналитички на основу коришћеног модела. Због те иницијалне стохастичности мезоструктуре, природа оштећења је такође стохастичка.

Како је већ било речи у поглављу 2, строго узев, параметри стања дискретног система могу бити повезани са концептима континуума (попут чврстоће, напона, температуре и оштећења) само када је термодинамички систем: (i) довољно велики да буде статистички хомоген, и (ii) или у равнотежи или довољно близу равнотеже (мерено Дебориним бројем) (Крајснoвић, 1996). Уколико ови предуслови нису испуњени значење концепата континуума постаје упитно. Општи изрази за тензоре напона (2.11), чврстоће (2.12), и релативне деформације (2.14) користе се и у честичним моделима.

## 5.1 Примери примена честичних модела

*Гринспен* (Greenspan, 1989, 1997) је поставио темеље честичног моделирања коришћењем међучестичних међудејстава типа (5.2) која су касније широко примењивана и развијана. Његова класична монографија (Greenspan, 1997) је сажетак тридесетогодишњег развоја рачунских метода у преко 70, углавном самосталних, научних радова импресивног опсега тема. Избор референце (Greenspan, 1989), која се односи на симулацију раста иницијалне прелине и лома бакарне плоче је, дакле, колико субјективан толико и у доброј мери произвољан. Гринспен је метод звао квази-молекуларном динамиком и основна замисао му је била да се молекуларни систем прво „препакује” груписањем молекула у агрегатне честице које је звао квази-молекули. Типични израз за међучестичну интеракцију (5.2<sub>2</sub>) је, потом, одређиван на основу закона о одржању енергије. Морсов потенцијал за бакар је фитован коришћењем методе најмањих квадрата са потенцијалом (5.2) и параметрима  $(p^{MD}, q^{MD}) = (7, 13)$  и  $(P^{MD}, Q^{MD}) = (8.38840 \cdot 10^{-10}, 1.866125 \cdot 10^{-7})$ , при чему је  $\phi[erg]$  а  $r[\text{Å}]$ . (Горњи индекс МД означава да се ради о емпиријском међуатомском потенцијалу на

скали атомске решетке.) Сходно усвојеним вредностима параметара, равномерно међуатомско растојање у референтној конфигурацији  $r_0^{МД} = 2.46 \text{ \AA}$  следи из (5.3). Узорак је правоугаона бакарна плоча ( $8 \times 11.4 \text{ cm}$ ) коју сачињава 2713 честица распоређених у чворове идеалне троугаоне мреже, дефинисане изабраним међучестичним растојањем  $0.2 \text{ cm}$ , које представља параметар мреже. Честице ступају у међусобну интеракцију само са првим-најближим суседима и листа суседа се не ажурира током симулације. Аутор је потом у границама правоугаоне плоче истих димензија распоредио у правилној троугаоној мрежи атоме бакра са  $r_0^{МД} = 2.46 \text{ \AA}$ . Знајући масу атома бакра, конфигурацију мреже, и димензије плоче једноставно је израчунати масу плоче (дебљине једног атома) распоређену између 2713 честица исте масе. За одређивање параметара међучестичне реакције (5.2), Гринспен је користио услов еквивалентности енергија МД система и честичног система на следећи начин. Знајући: (i) дубину потенцијалне јаме за два атома бакра на међусобном растојању  $r_0^{МД} = 2.46 \text{ \AA}$  из (5.2<sub>1</sub>) и (ii) број међуатомских веза који одговара троугаоној мрежи на атомској скали, аутор је био у стању да израчуна укупну енергију атомског система као производ ове две величине (усвајајући, притом, претпоставку о нултој кинетичкој енергији). Гринспен је, потом, *усвојио* величине експонената међучестичне интеракције (5.2),  $(p, q) = (3, 5)$ . Услов еквивалентности енергија захтева да иста (потенцијална) енергија буде распоређена између 2713 честица мезоскопског модела што дефинише минимум потенцијала (5.2<sub>1</sub>) који одговара одабраним параметрима честичног модела  $r_0 = 0.2 \text{ cm}$  и  $(p, q) = (3, 5)$ . На тај начин, решавањем система две једначине са две непознате, добијају се тражени параметри  $(P, Q) = (3.24224, 0.12969)$  тако да међучестична сила добија облик

$$f_{ij} = -\frac{3.24224}{r_{ij}^3} + \frac{0.12969}{r_{ij}^5} \quad (5.5)$$

На овом месту, Гринспен је увео појам параметра локалне интеракције са образложењем да, са становишта динамике, међучестична сила мора да буде локалног карактера у присуству гравитације. Сходно томе, сматрао је потребним увођење нормализирајућег множитеља  $\alpha_{\Gamma}$  — параметра локалне интеракције — таквог да је на растојању  $2 \cdot r_0 = 0.4 \text{ cm}$  сила између две честице занемарљиво мала у поређењу са силом гравитације. Гринспен је сматрао да је увођење овог параметра од суштинске важности због ограничавања међучестичног дејства само на прве суседе. Занемарљиво малу интеракцију у односу на силу гравитације између других-најближих суседа аутор је произвољно дефинисао као 0.1% силе гравитације. Према томе, из другог Њутновог закона следи

$$\alpha_{\Gamma} f_{ij}(r_0 = 0.2 \text{ cm}) = \alpha_{\Gamma} \left| -\frac{3.24224}{0.2^3} + \frac{0.12969}{0.2^5} \right| < mg$$

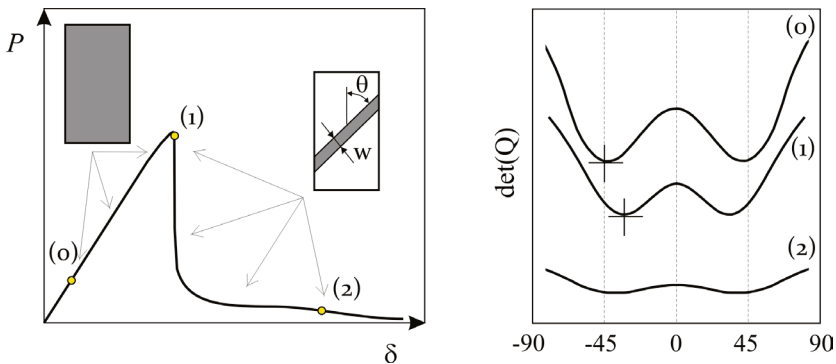
На основу претходне неједначине усвојена је вредност Гринспеновог параметра локалне интеракције  $\alpha_{\Gamma} = 1.25 \cdot 10^{-10}$ . Овај параметар је, потом, уведен у други Њутнов закон чиме је Гринспен концепт редукован, у терминологији Ванга и Остоја-Старжевског (Wang and Ostoja-Starzewski, 2005), на псеудо-динамички модел. Ваља такође да се истакне да је Гринспен за међучестично растојање при коме долази до раскидања међучестичне везе користио  $1.033 \text{ cm} \approx 5 \cdot r_0$ . Ова вредност је прилично велика са становишта макро/мезо скале, чак и када се има у виду да је моделиран изузетно дуктилан материјал (бакар, чија је граница извлачења пре кидања типично око 40%), што је јасан показатељ да је аутор на свој концепт моделирања гледао пре као на квази-МД (премошћавање јаза између микро и макро нивоа) него на феноменолошко конститутивно моделирање мезоструктуре. Међутим у самом закључку, Гринспен (1989) наводи да је овакав концепт моделирања могућ кад год је доступан емпиријски потенцијал материјала, али ако исти није доступан могуће је проценити параметре међучестичне интеракције (5.2) коришћењем резултата лабораторијских мерења кривих напон-деформација (Reeves and Greenspan, 1982).

Коначно, аутор је користио описани модел за симулацију једноосног истезања бакарне плоче са иницијалном косом прслином у средини. Резултати симулација се слажу са основним појавним облицима процеса истезања, преношења напона у унутрашњост узорка, отварања иницијалне прслине и, на крају, симетричног раста иницијалне прслине кидањем међучестичних веза на њеним врховима и даљом пропагацијом двеју секундарних прслина у правцу управном на деловање оптерећења.

*Крајчиновић и Вујосевић* (Krajinovic and Vujosevic, 1998) користили су 2Д честични модел решеткастог типа за симулацију квази-статичког двоосног притиска у циљу испитивања појаве локализације у хомогеном квази-дуктилном материјалу. Локализација деформације и оштећења у облику трака (појасева) клизања је честа у геоматеријалима (слика 5.2а). Овај модел је претеча хибридног решеткасто-честичног модела који су Остоја-Старжевски и сарадници (Wang et al., 2009а) развили десетак година касније, утолико што су потпуно динамичке „честице континуума” постављене у чворовима решетке без директног узимања у обзир њихових димензија. Експериментални подаци наведени у раду (праћење акустичне емисије приликом деформисања) представљали су физичку основу за конципирање и примену честичног модела.



Виртуелни узорак генеричке стене, одговарајуће виткости, представљен је масеним честицама распоређеним у чворовима тополошки уређене троугаоне Деланејева решетке дуалне Воронојевог мозаику граница кристалних зрна. Затечена неуређеност, која проистиче из велике разноликости величина и облика кристалних зрна и присуства заосталих напона и структурних нехомогености (шупљине, честице других фаза,...) на границама зрна, узета је у обзир одговарајућим избором почетних дужина веза и чврстоће кидања веза из Гаусове, односно униформне, вероватноће расподеле, тим редом; док су све крутости веза претпостављене једнаке. Међучестичне силе засноване су на хармонијском потенцијалу, дефинисаном изразом (5.4<sub>2</sub>), за цео интеракцијски домен (и затезање и притисак), односно  $k_{ij} = Const.$  на слици 5.1а. У циљу имитације стварног експеримента, честична мрежа је прво подвргнута хидростатичком притиску, одржаваном на одређеном нивоу дефинисаном циљном бочном стешњеношћу, а потом једноосном натпритиску монотонно нанесеном применом контролисаног померања на подужним границама узорка. После сваке примене прираштаја подужног скраћења, систему је дозвољено да се опусти у стање квази-статичке равнотеже дефинисано са унапред одабраним али занемарљиво малим нивоом граничне кинетичке енергије. Елементарна оштећења настају са прогресивним кидањем појединачних веза и њиховим уклањањем из решетке кад год нека међучестична сила задовољи критеријум раскидања везе који су аутори дефинисали преко задате микроскопске затезне чврстоће (3.24<sub>1</sub>). Кинетика процеса локализације деформације и оштећења повезана је са брзином повећања корелационе дужине снимањем растојања  $\lambda_{i,j}^{\min}$  између две узастопне раскинуте везе (имитација сигнала акустичне емисије).



**Слика 5.2.** Шематски прикази: (а) криве сила-померања на макроскали у правцу nanoшења оптерећења и сивим пољима означени простори доминантног развоја оштећења, и (б) зависности детерминанте акустичног тензора од угла у односу на осу узорка (правац nanoшења главног оптерећења). (Инспирирано подацима из референце (Krajcinovic and Vujosevic, 1998)).

Уз осврт на слику 5.2, одзив неуређеног система је првобитно био хомоген све док се процес оштећења састојао од поступне акумулације појединачних појава зачећа разубђених, некорелисаних микропрслина (преткритични режим очвршћавања). Превладавање малих растојања  $\lambda_{i,j}^{\min}$  на врхунцу оптерећења и снимци образаца оштећења после њега (треници 1 и 2, на слици 5.2а) указују на локализацију шематски илустровану на истој слици. Аутори су закључили да је „омекшавање повезано са растућом улогом аутокаталитичког раста највећег кластера” (Krajinovic and Vujosevic, 1998). Вредно је истаћи да су Лендис и Шах (Landis and Shah, 1995) нешто раније уочили разлику између модова појаве микропрслина: у околини критичне тачке (која одговара тачки (1) на слици 5.2а) преовладава комбиновани мод отварања и смицања (I и II) док у посткритичном режиму омекшавања доминира мод смицања (II) што је у сагласности са растом и перколацијом критичног кластера код Крајчиновића и Вујошевићеве после чега следи, грубо речено, релативно макроскопско клизање растеређених блокова испод и изнад траке микропрслина.

У предметном раду је расправљано о кључним аспектима геометрије локализованог оштећења. Аутори су користили статистичку анализу за демонстрацију микромеханизма процеса локализације. Такође су одредили детерминанту акустичног тензора, која се користи у механици континуума за идентификацију прага бифуркације, која одговара појави локализације (таласи смицања остају заробљени у траци локализоване деформације јер њихова брзина постаје једнака нули) (Krajinovic and Vujosevic, 1998). Добијену детерминанту акустичног тензора приказали су у зависности од угла мереног у односу на осу узорка за неколико стања дуж  $P$ - $\delta$  криве, као што је шематски приказано на слици 5.2б. У почетном стању узорка угао је  $45^\circ$ . Са постепеном акумулацијом оштећења угао, који одговара минимуму детерминанте акустичног тензора, показује тенденцију смањивања (слици 5.2б). У критичној тачки која одговара максимуму  $P$ - $\delta$  криве, угао мерен у односу на осу нашошења натпритиска досеже вредност  $\approx 34^\circ$ . Овај угао, при коме акустични тензор за дато стање (критична тачка и област стрмог пада  $P$ - $\delta$  криве) има минималну вредност, је у изванредној сагласности са предвиђањима заснованим на механици континуума. Обрасци распрострањања оштећења добијени симулацијама подвлаче ово слагање резултата. Такође, резултати симулација честичним моделима верно репродукују експерименталне резултате, указујући да оштећења узорака од камена карактеришу појасеви (траке) локализованог оштећења неправилних облика и замућених граница. Крајчиновић и Вујошевић (1998) су уочили да је „неухватљива” дебљина траке локализованог оштећења изузетно зависна од детаља опажања и, сходно томе, понудили су само делимичан опис те величине

не инсистирајући на детаљима. Уместо мерења геометрије, која је у лабораторијским условима готово увек неосмотрива с обзиром да је скривена унутар узорка, аутори су закључили да би било продуктивније и рационалније да се одреди „дебљина” траке локализованог оштећења, мерењем њеног ефекта на ефективне транспортне карактеристике узорка. Методолошки приступ је демонстриран применом простирања еластичних таласа притиска кроз узорак премошћен траком локализованог оштећења, у циљу процене дебљине те траке. Основна премиса је да ће таласу притиска нанесеном преко врха оштећеног узорка бити потребно више времена да досегне дно него у случају неоштећеног узорка и да ће то временско кашњење бити пропорционално дебљини траке оштећења. У складу са резултатима симулација, аутори су предложили да је дебљина траке (пропорционална временској задршци) дата законом скалирања

$$w \propto (\dot{\epsilon})^{0.35} \quad (5.6)$$

где је  $\dot{\epsilon}$  брзина нанесеног деформационог (притисног) пулса. Скалирајућа релација (5.6) подразумева да ширина траке локализованог оштећења тежи ка нули за статички случај, што је образложено последицом квази-статичког третирања динамичке појаве.

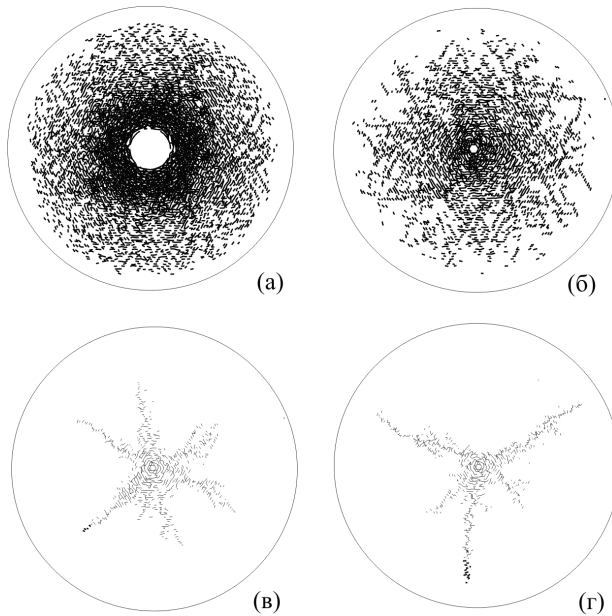
*Мастиловић и Крајчиновић* (Mastilovic and Крајчиновић, 1999a) су користили 2Д честични модел за симулације динамичког ширења кружног отвора у хетерогеном, кргом материјалу као извор података (на мезо скали) за аналитичко моделирање ширења цилиндричног отвора великом брзином. Изабрана насумична, честична мрежа је била тополошки уређена усвајањем претпоставке да свака запреминска (“bulk”) честица (дакле, све сем оних које се налазе на границама узорка) ступа у интеракцију са шест најближих суседа. Решетка је била геометријски и структурно неуређена пошто су равнотежна растојања између честица и крутости одговарајућих веза додељиване независно коришћењем нормалне, односно униформне, расподеле, тим редом. Свака честица је повезана са својим најближим суседима нелинеарном релацијом сила-померање која је дефинисана хибридном потенцијалом (5.4). Критеријум кидања везе је био дефинисан у виду критичног истегања везе: (хемијска) веза између честица  $i$  и  $j$  се раскида (чиме она трајно губи могућност преношења затежуће силе) када њено издужење досегне критичну вредност  $\epsilon_{ij} = \Delta r_{ij} / r_{0ij} = \epsilon_{cr}$ . Могућност зацељивања микропрслине је искључена спречавањем поновног успостављања кохезивне интеракције како између честица које иницијално нису биле најближи суседи тако и између две честице чија је међусобна веза претходно раскинута током процеса деформације. Међутим, одбојна контактна сила може да буде успостављена између две честице које иницијално нису биле

повезане јер нису биле најближи суседи или су у једном тренутку деформације раздвојене истезањем њихове међусобне везе преко границе кидања.

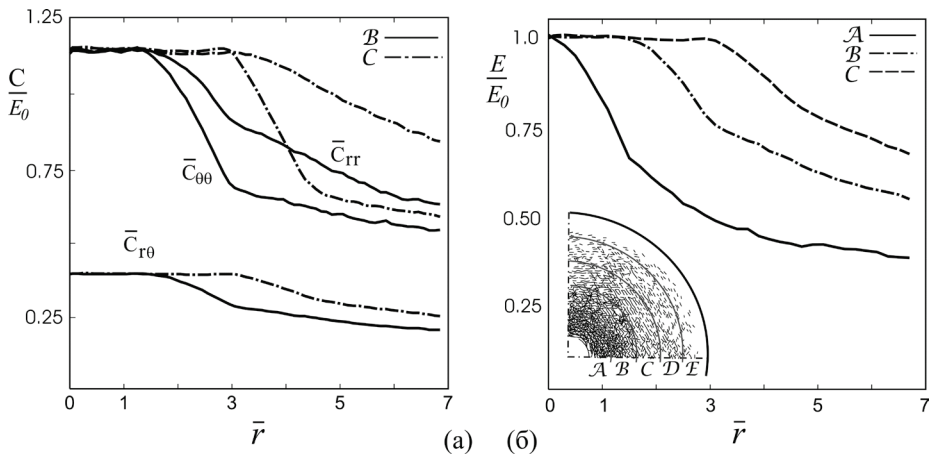
Рачунарске симулације динамичког ширења отвора у насумичној честичној мрежи су концептуално веома једноставне. Централни отвор је инициран уклањањем једне честице из средине честичне мреже; по уклањању, најближи суседи уклоњене честице дефинишу ивицу отвора, која се радијално шири контролисаним померањем прописаном константном брзином ширења  $\dot{a}$  (где је са  $a$  означен пречник отвора). Овај начин наношења оптерећења концептуално је сличан са симулацијом детонације тачкастог експлозива постављеног у средини кружног диска Куна и Хермана (Kun and Herrman, 1996).

Типични обрасци распрострањања оштећења за различите брзине ширења отвора у кртом материјалу илустровани су на слици 5.3. Деформација и обрасци распрострањања оштећења зависе од снаге оптерећивања (величине саопштене деформационе енергије у јединици времена). Образац распрострањања оштећења настао при највећој брзини ширења отвора (слика 5.3а) је аксијално симетричан. Овом образцу одговара брзина простирања фронта оштећења (0.8-0.9)  $C_L$ , што је у завидној сагласности са експерименталним резултатима (Mastilovic and Krajcinovic, 1999a и тамо наведене референце). Пошто се у првој фази деформицања највећи део оштећења у процесној зони може приписати радијалним микропрслинама, компонента тензора (ефективне) еластичности у тангенцијалном правцу деградира много брже од радијалне компоненте тензора еластичности (слика 5.4а). Градијент смањења радијалне чврстоће зависи од радијалног растојања од центра кружног отвора. Насупрот томе, опадање ефективне тангенцијалне чврстоће карактеришу два засебна градијента који су, судећи по резултатима илустрованим сликом 5.4а, независни од радијалне координате.

Анализом резултата симулација уочено је да је максимални нормални напон у радијалном правцу (радијални напон) на ивици отвора — који је од суштинске важности за моделирање у механици продора (пенетрације) — приближног интензитета као радијални напон на фронту еластичног таласа (Mastilovic and Krajcinovic, 1999a и тамо наведене референце) за који постоје аналитичка решења која су на слици 5.5а означена са пуним круговима. При различитим брзинама ширења отвора, однос стационарне и максималне вредности радијалног напона се налази у веома уском оквиру, што је коришћено за феноменолошко моделирање функционалне зависности радијалног напона од брзине раста прслине (Mastilovic and Krajcinovic, 1999b).

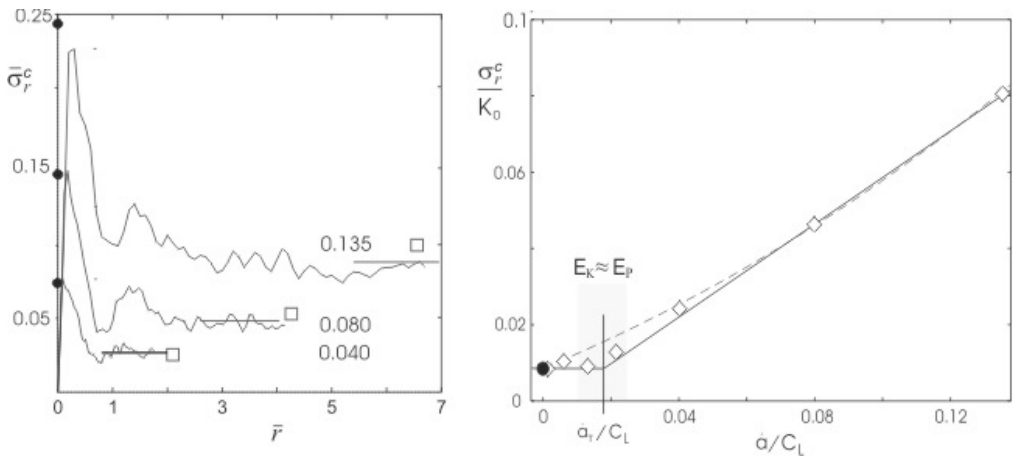


**Слика 5.3.** Зависност образаца распрострањања оштећења од брзине ширења кружног отвора: (а)  $\dot{a} = 0.135 C_L$ , (б)  $\dot{a} = 0.0135 C_L$ , (в)  $\dot{a} = 0.00135 C_L$ , and (г)  $\dot{a} = 0.000135 C_L$ , где је  $C_L$  брзина подужних еластичних таласа, а свака кратка линија представља раскинуту везу. (Преузето из референце (Mastilovic and Kraјcinovic, 1999a) са допуштењем издавача. Copyright (1999) by Elsevier)



**Слика 5.4.** Временска историја ефективних особина материјала: (а) компоненте тензора еластичности у прстенастим областима осредњавања  $\mathcal{B}$  и  $\mathcal{C}$ , и (б) модул еластичности у прстенастим областима осредњавања  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$ , и  $\mathcal{C}$ . Рачунски домен је подељен у пет прстенастих области осредњавања једнаких дебљина означених словима абецеде од  $\mathcal{A}$  до  $\mathcal{E}$ , у којима се врши осредњавање параметара поља.  $E_0$  означава модул еластичности неоштећеног материјала. (Преузето из референце (Mastilovic and Kraјcinovic, 1999a) са допуштењем издавача. Copyright (1999) by Elsevier)

Параболичка и билинеарна релација — илустроване, тим редом, на слици 5.5б са испрекиданом и пуном линијом — успешно су коришћене за аналитичко моделирање дубине продора пројектила заобљеног носа у кречњачке и бетонске мете (Mastilovic and Krajcinovic, 1999b). Уочљиво је да је те две релације могуће одредити познавањем три тачке у простору приказаном на слици 5.5б: статичко решење (пуни круг) се добија решавањем одговарајућег проблема механике лома; остале две тачке најупутније је одређивати за велике брзине деформисања, при којима је зачеће микропрслина доминантни механизам оштећења, што процесе деформације и оштећења чини осно симетричним (слике 5.3а,б). Ова осна симетрија не само што поједностављује аналитичко решавање проблема (Mastilovic and Krajcinovic, 1999a), него доприноси и поузданости решења јер га чини мање стохастичним (у смислу еволуције образаца оштећења илустрованих на слици 5.3).

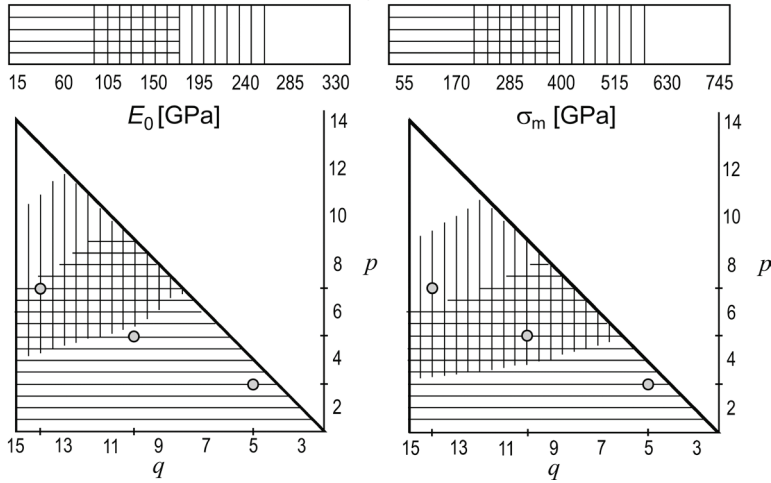


**Слика 5.5.** (а) Еволуција радијалног напона на површини кружног отвора за три брзине његовог ширења, и (б) промена радијалног напона на површини отвора у зависности од брзине његовог ширења. (Преузето из референце (Mastilovic and Krajcinovic, 1999a) са допуштењем издавача. Copyright (1999) by Elsevier)

Ванг, Остоја-Старжевски и сарадници (Wang and Ostojca-Starzewski, 2005 и Wang et al., 2006, 2009a, 2010) усвојили су Гринспенов (Greenspan, 1997) метод честичног моделирања за симулацију појаве динамичког лома у хомогеним и хетерогеним материјалима. Честични модел решеткастог типа инспирисан је традиционалном МД методом, укључујући и коришћење међучестичног потенцијала инспирисаног типичним Ленард-Џоунсовим моделом (5.22) али на макроскопској просторној скали (реда величине центиметра) о чему је већ било речи на почетку овог поглавља. Сем решавања непосредног физичког проблема

који је био предмет њиховог истраживања (дробљење и уситњавање хетерогених материјала), Ванг и Остоја-Старжевски (2005) су велику пажњу посветили постављању саме честичне методе на чврсте темеље. Полазећи од основа које је поставио Гринспен, Ванг и Остоја-Старжевски су — уместо *a priori* усвојених претпоставки о величинама неких кључних параметара модела — систематски анализирали како избор параметара међучестичног потенцијала утиче на основне показатеље одзива моделираног материјала на макро скали (модул еластичности, затезну чврстоћу, начин настанка и раста прслина и самог лома). Такође су детаљно испитивали и како на модул еластичности утиче запремина симулираног система ( $V$ ) и међучестично растојање (параметар мреже,  $r_0$ ).

Типични проблем честичног моделирања — од суштинске важности за подесност модела за симулацију сложених механичких одзива материјала — представља прелаз са доступног међуатомског потенцијала (микро ниво) на међучестични потенцијал (мезо/макро ниво) који има много сложеније физичке корене. С тим у вези, Ванг и Остоја-Старжевски (Wang and Ostoja-Starzewski, 2005) су, пратећи Гринспенову замисао, увели две новине. Прво, исправили су Гринспенов концепт „локалног параметра интеракције”,  $\alpha_r$ , који је његову теорију чинио псеудо-динамичким системом, постулирањем (на основу резултата многих симулација) да  $\alpha_r$  мора бити једнак јединици како би била обезбеђена пуна динамичност система. Друго, установили су принцип *еквиваленције* између мезоскопског честичног модела и микроскопског МД модела материјалног система успостављањем четири услова њихове једнакости (који се односе на масу, еластичну деформациону енергију, модул еластичности и затезну чврстоћу) у циљу одређивања четири непозната параметра *међучестичног* потенцијала (5.2<sub>1</sub>) (означених са  $P$ ,  $Q$ ,  $p$  и  $q$ ). При томе су коришћени добро познати изрази за модул еластичности (2.7а) и теоријску затезну чврстоћу (2.7б) који су у основи међуатомске везе. На тај начин су успели да изведу једначине за  $P$ ,  $Q$ ,  $p$  и  $q$ , и спроведу одговарајућу параметарску студију ради истраживања различитих ефеката  $p$ ,  $q$ ,  $V$  и  $r_0$ , првенствено на модул еластичности. Делови те анализе приказани су овде у знатно скраћеном облику. На слици 5.6 приказана је зависност модула еластичности и затезне чврстоће од параметара ( $p$ ,  $q$ ) међучестичног потенцијала (5.2<sub>1</sub>), до које су Ванг и Остоја Старжевски (2005) дошли симулацијама при непроменљивим вредностима  $V$  и  $r_0$ . Са слике се види да се жељене вредности  $E'$  и  $\sigma_m$  могу добити различитим комбинацијама параметера ( $p$ ,  $q$ ) и да, уопште узев, из веће вредности ( $p$ ,  $q$ ) произилазе веће вредностима  $E'$  и  $\sigma_m$ . Илустрације ради, у табели 5-1 приказане су вредности параметара ( $P$ ,  $Q$ ) потенцијала (5.2<sub>1</sub>) и  $E'$  и  $\sigma_m$  за три различите комбинације ( $p$ ,  $q$ ).



**Слика 5.6.** Модул еластичности ( $E'$ ) и затезна чврстоћа ( $\sigma_m$ ) у зависности од пара параметара ( $p, q$ ) при фиксираним вредностима међучестичног растојања ( $r_0 = 0.2$  cm) и запремине узорка ( $V = 8.0 \times 11.4 \times 3.1$  cm<sup>3</sup>). (Репродуковано на основу података из референце (Wang and Ostoja-Starzewski, 2005))

**Табела 5-1.** Параметри  $P$  и  $Q$  потенцијала (5.21), модул еластичности и затезна чврстоћа одређени за различите парове параметара ( $p, q$ ) приказане на слици 5.6. Изворна референца (Wang and Ostoja-Starzewski, 2005) нуди прецизнију процену ових величина као и промену модула еластичности са повећањем почетног међучестичног растојања у датом опсегу која је овде пренета у последњем реду.

$(p, q)$	(3, 5)	(5, 10)	(7, 14)
$P$	$2.5 \cdot 10^7$	$1.8 \cdot 10^6$	$1.1 \cdot 10^5$
$Q$	$9.9 \cdot 10^5$	$5.7 \cdot 10^2$	1.4
$E_0$ [GPa]	15.	70.	150.
$\sigma_m$ [MPa]	90.	270	440.
$\Delta E_0$ [%] $r_0: (0.1 \rightarrow 0.5)$ cm	-15.	-16.	-16.

Имајући у виду опсег физичких карактеристика бакра (Cu) и његових легура ( $E_0 = 120\text{--}150$  GPa и  $\sigma_m = 250\text{--}1000$  MPa) за које су Ванг и Остоја-Старжевски (Wang and Ostoja-Starzewski, 2005) били заинтересовани, очигледно је да је, између три понуђене опције, најповољнија ( $p, q$ ) = (7, 14). Важно је да се



поново нагласи, да сличне вредности  $E'_0$  и  $\sigma_m$  могу да се добију и нешто другачијим комбинацијама параметара  $(p, q)$  из којих, с друге стране, могу да проистекну *различите* вредности ломне жилавости материјала на макро скали. Сходно томе, аналитичару стоји на располагању додатни „степен слободе” за подешавање физичко-механичких особина циљног материјала у одређеној мери. Уопште узев, примећено је да веће вредности параметара  $(p, q)$  одговарају бржем процесу лома и повећавању кртости (а у вези са апликативним фокусом ове монографије, и повећавању броја фрагмената). Подешавање ломне жилавости у већем обиму од онога који дозвољавају мале варијације  $(p, q)$  захтевало би усложњавање потенцијала (5.2<sub>1</sub>) увођењем додатних параметара. Исто тако, подешавање Поасоновог коефицијента на вредност различиту од 0.25 захтевало би додатни параметар у потенцијалу; и тако даље, за сваку нову физичко-механичку особину материјала на макро скали.

У циљу систематског анализирања утицаја параметара међучестичних дејстава, Ванг и Остоја-Старжевски (Wang and Ostojca-Starzewski, 2005) су симулирали исти случај једноосног истезања бакарне плоче са косом средишном прслином, који је раније испитивао Гринспен (Greenspen, 1989). Геометрија модела ( $8.0 \times 11.4$  cm,  $r_0 = 0.2$  cm), брзина деформисања ( $\dot{\epsilon} \approx 2$  s<sup>-1</sup>), и временски корак ( $\delta t = 0.1$   $\mu$ s) били су идентични за све симулације док је испитиван утицај експонената међучестичне интеракције на еволуцију образаца оштећења коришћењем три различита пара параметара  $(p, q) = (3, 5)$ ,  $(5, 10)$ , и  $(7, 14)$ . Поређење образаца оштећења указује да смањење  $(p, q)$  успорава процес простирања прслина и чини га жилавијим (дуктилнијим). Повећање  $(p, q)$  доводи до пораста кртости одзива што се рефлектује и повећаним бројем фрагмената на крају симулације. Квантитативни утицај наведена три пара параметара на вредности  $P$ ,  $Q$ ,  $E'_0$ , и  $\sigma_m$  приказани су у табели 5-1. Осим тога, у табели 5-1 илустрована је и процентуална промена почетног модула еластичности (у неоштећеном стању) при промени равнотежног међучестичног растојања у референтној конфигурацији са 0.1 cm на 0.5 cm.

Из датих података произилази да петоструко повећање  $r_0$  води релативно умереном смањењу  $E'_0$  за свега  $\approx 15\%$ . Ово је значајан податак за обављање симулација у условима скромних рачунарских ресурса, јер би удвостручавање  $r_0$  са 0.1 cm на 0.2 cm, при непромењеној  $V$  у 3Д симулацијама, довело до смањења броја честица  $3^3$  пута из чега, при коришћењу МД алгоритама, проистиче временска уштеда од, отприлике,  $(3^3)^3 \approx 500$  пута (уз одговарајуће смањење  $E'_0$  од 7 GPa при  $(p, q) = (7, 14)$  што не представља неразумну компензацију). Коначно, Ванг и Остоја-Старжевски (Wang and Ostojca-Starzewski, 2005) су варирали запремину узорка при константном  $r_0$  за различите вредности  $(p, q)$  и

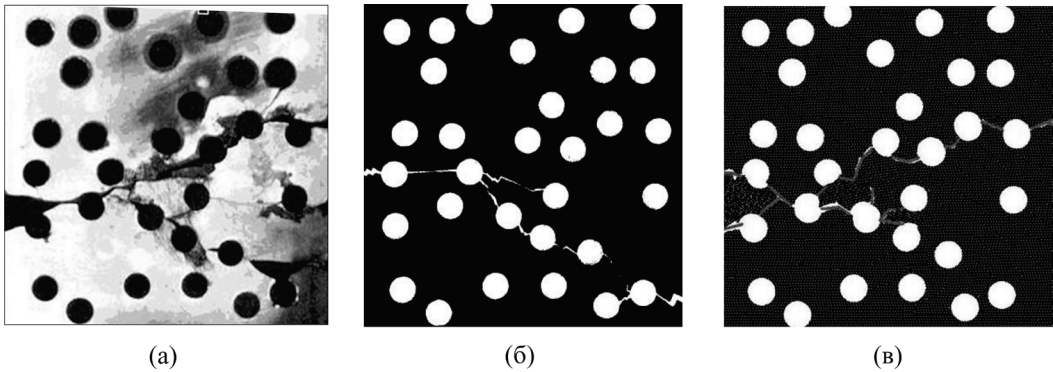
показали да пораст запремине узорка, при свакој  $(p, q)$  комбинацији, доводи до пораста  $E'_0$ , који је прво прилично стрм, касније много блажи и, коначно, асимптотски тежи сталној вредности.

У другом раду ове серије, Ванг, Остоја-Старжевски и коаутори (Wang et al., 2006) су применили описани честични модел са непосредним циљем бољег разумевања процеса дробљења и експлозивне фрагментације минерала који је од великог индустријског значаја. Методолошку новину је представљало увођење могућности интеракције између честица које у референтној конфигурацији нису биле први-најближи суседи увођењем произвољно-дефинисаног окружења других суседа који ступају у међусобно дејство када  $r_{ij} < r_{ij0}$ . Ово унапређење честичне методе од суштинске је важности за избегавање проблема међусобног преклапања честица које иницијално нису биле први-најближи суседи (речником механике континуума: проблема кршења услова компатибилности деформација) у случају снажних динамичких оптерећења које карактерише велики транспорт масе услед комадања материјала. Мاستиловић и Крајчиновић (Mastilovic and Krajinovic, 1999a) су исти проблем решили на начин графички илустрован на слици 5.1б. Ванг, Остоја-Старжевски и коаутори (Wang et al., 2006) су потом симулирали низ типичних случајева динамичког оптерећења од интереса у инжењерској пракси: фрагментацију 2Д једнофазних и вишефазних материјала испуштањем терета и 3Д фрагментацију једнофазних материјала динамичким затезањем или притиском узрокованим различитим начинима nanoшења оптерећења. Ове симулације су показале обрасце и трендове фрагментације материјала у функцији њихових конститутивних параметара, геометријских облика, и начина nanoшења динамичког оптерећења.

Коначно, Ванг, Остоја-Старжевски и сарадници (Wang et al., 2009a; Wang et al., 2010) су предложили методу хибридног решеткасто-честичног моделирања (“hybrid lattice particle modelling – HLPM”) за симулирање динамичког лома хомогених и хетерогених материјала на макроскали. Модел се заснива на дефинисању израза за међучестичне интеракције (различитих типова) између првих-најближих суседа распоређених у чворовима решетки (различитих облика). Ови изрази (нпр., за еластичне константе,  $E'$  и  $\nu'$ ) се, потом, уносе у честични модел и прорачунска шема даље прати технике честичног моделирања, чиме се добија хибридни модел. Основне предности хибридног решеткасто-честичног модела у односу на традиционални честични модел су што превазилази ограничења у вредности Поасоновог коефицијента и предодређеност простирања прслина. Слика 5.7, преузета из (Wang et al., 2010) љубазношћу аутора, илуструје предности хибридне методе у односу на МКЕ у погледу репродукције експериментално-добијених образаца лома на примеру

перфориране епокси плоче оптерећене на једноосно затезање. Вредно је помена, да је коришћени хибридни решеткасто-честични модел био заснован на  $\alpha$  моделу за епокси са фиксираним Поасоновим коефицијентом  $1/3$  (3.10<sub>1</sub>).

Осим насумичног раста прелина у перфорираним епокси плочама, хибридни решеткасто-честични модел је примењен и у серији студија симулација динамичке фрагментације, термалних ефеката при ломљењу руде, утискивања (индентације) полимерних материјала, лома изазваног простирањем таласа, удара кругог пројектила (консултовати Wang et al. (2010) за листу референци).

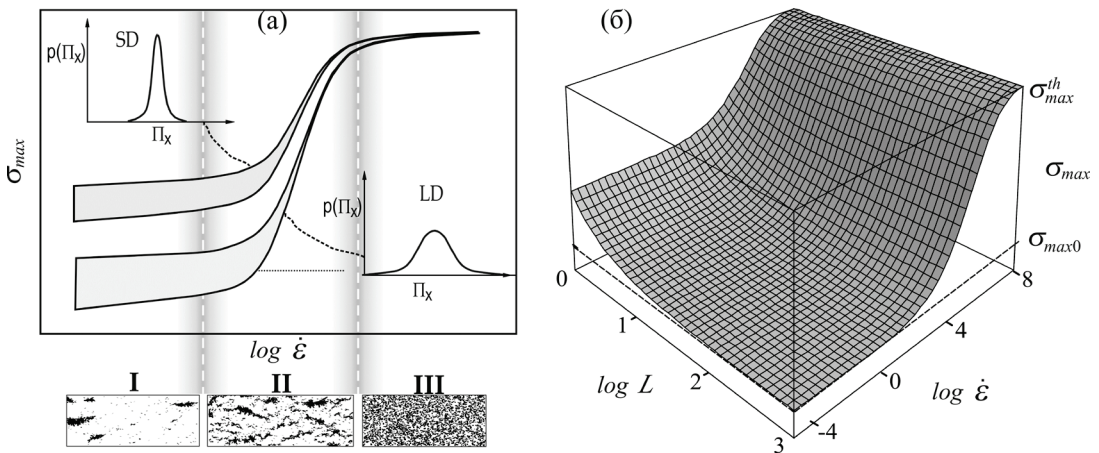


**Слика 5.7.** Експериментална и рачунарске симулације образаца лома насумично избушене епокси плоче оптерећене на затезање: (а) експеримент, (б) МКЕ, и (в) честична метода (Преузето из референце (Wang et al., 2010) са допуштењем аутора).

*Мастиловић и коаутори* (Mastilovic et al., 2008; Mastilovic, 2011a, 2011b, 2013) користили су честични модел за симулацију динамичког, једноосног теста на затезање квази-кртог материјала са неуређеном мезоструктуром и малом енергијом лома. Хибридни потенцијал (5.4), илустрован на слици 5.1, коришћен је за дефинисање међудејстава тачкастих честица између првих-најближих суседа. Модел је геометријски и структурно неуређен. Критеријум раскидања међучестичне везе оптерећене на затезање дефинисан је преко критичног релативног издужења (3.24<sub>2</sub>). Проблем наношења динамичког, затезућег оптерећења при изузетно великим брзинама деформисања, укључујући и једнообразну расподелу оптерећења дуж узорка, решен је задавањем тренутног поља брзина у почетном тренутку на све честице у правцу једноосног затезања,  $\dot{x}_1(t=0^-) = \dot{\epsilon}_1 x_1$ , и управно на њега,  $\dot{x}_2(t=0^-) = -\nu_0^{(\epsilon)} \dot{\epsilon}_1 x_2$ . Иницијално поље брзина дефинисано је у функцији задате брзине деформисања,  $\dot{\epsilon}_1 = \dot{L}/L$ ; где је са  $L$  означена димензија квадратног узорка а тачка изнад симбола означава извод по времену. Координате се односе на тежишни координатни систем квадратног узорка а  $\nu_0^{(\epsilon)}$  је привидни Поасонов коефицијент у условима раванског стања деформација (1.4a) (Mastilovic, 2008a). Накнадно, за  $t \geq 0$ ,

оптерећење се наноси искључиво контролисаним померањем честица у подужном правцу,  $\dot{x}_1 = \pm \dot{\epsilon}_1 L/2$ , на одговарајућим границама узорка ( $x_1 = \pm L/2$ ), док је кретање осталих честица дефинисано другим Њутновим законом (2.2).

Анализом кривих напон–релативна деформација ( $\sigma$ – $\epsilon$ ) у правцу деловања оптерећења аутори су идентификовали највећи напон и поистоветили га са затезном чврстоћом,  $\sigma_m$ . Тачка на кривој која одговара  $\sigma_m$ , назива се и критичном тачком јер раздваја режим очвршћавања од режима омекшавања код квазидуктилних материјала. Приликом испитивања утицаја повећавања брзине оптерећења на затезну чврстоћу примећен је монотони пораст  $\sigma_m$ , карактеристичног сигмоидног облика (слика 5.8). Две осенчене сигмоидне површине на слици 5.8а шематски приказују расипање вредности  $\sigma_m$  у зависности од брзине деформисања, при различитим статистичким реализацијама неуређености система, за случајеве велике (ВН) и мале (МН) неуређености система. Велико расипање затезне чврстоће, које одликује мале брзине деформисања (област означена са I), постепено се смањује да би при изузетно великим брзинама деформисања (област III) практично нестало, што се подудара са асимптотским прилазом „горњој хоризонталној међи” која дефинише теоријску чврстоћу система ( $\sigma_m^{th}$ ) при детерминистичком одзиву.



**Слика 5.8.** (а) Зависност затезне чврстоће ( $\sigma_m$ ) од брзине деформисања која илуструје уређујући ефекат кинетичке енергије и утицај геометријске и структурне неуређености система (ВН и МН означавају, тим редом, велику и малу неуређеност система); одговарајући типични обрасци распрострања оштећења приказани су на дну слике (Mastilovic, 2011a). (б) Шематски приказ зависности просечне затезне чврстоће од брзине деформисања ( $\dot{\epsilon}$ ) и величине узорка ( $L$ ) (преузето из референце (Mastilovic, 2013) са допуштењем издавача. Copyright (2013) by Springer).

У овим честичним симулацијама,  $\sigma_m^{th}$  се показала независном како од величине узорка тако и од својствене (затечене) и индуковане структуре дефеката на мезоскали (затечена и индукована неуређеност, стр. 220-221) (Mastilovic, 2011b, 2013). Сходно томе, аутори уводе у разматрање прелаз са стохастичког на детерминистичко понашање — одсликан поступним смањењем статистичког расипања вредности  $\sigma_m$  и све уређенијим обрасцима еволуције оштећења (Mastilovic et al., 2008) — који је израженији у случају велике неуређености система (слика 5.8а). Слика 5.8б илуструје зависност просечне затезне чврстоће од брзине деформисања и величине узорка. Мاستиловић (Mastilovic, 2011a, 2011b, 2013) је, на основу фитовања резултата симулација методом најмањих квадрата, предложио емпиријски израз за ову зависност,  $\sigma_m = f(\dot{\epsilon}, L)$ , за материјалне системе са малом енергијом лома. На слици 5.8б, означена је и вредност затезне чврстоће која одговара доњој међи ( $\sigma_{m0}$ ), која представља основну квази-статичку затезну чврстоћу неограниченог узорка ( $\log L \rightarrow \infty$ ). Једнообразност еволуције оштећења при екстремно великим брзинама деформисања, приказана на слици 5.8а (регион III), указује на одсуство кооперативних појава, у супротности са груписањем микропрслина у „облаке” карактеристично за прелазне брзине оптерећења (слика 5.8а, регион II). Еволуција ових „ројева” микропрслина можда представља доминантни механизам очвршћавања код кртих материјала који нису склони микромеханизмима заснованим на активностима дислокација. Проистичуће повећавање квазидуктилности се одражава кроз наглашену промену ка нееластичнијим облицима  $\sigma$ - $\epsilon$  кривих, не само у посткритичном режиму омекшавања, него и у режиму очвршћавања (Mastilovic and Krajcinovic, 1999a).

У изворним радовима су испитиване и друге величине стања које одговарају критичној тачки  $\sigma$ - $\epsilon$  криве: време лома ( $t_m$ ), и снага оштећивања (дефинисана као брзина промене енергије оштећивања у времену,  $\dot{E}_{Dm}$ ). Анализом резултата честичних симулација у (Mastilovic, 2011b) уочена је линеарност

$$t_m \dot{\epsilon} = Const., \quad \dot{E}_{Dm} \dot{\epsilon}^{-1} = Const. \quad (5.7)$$

између наведених величина стања са једне, и брзине деформисања са друге, стране. Осим тога, резултати симулација су понудили и везу између макроскопских параметара стања и мезоскопског критеријума лома ( $\epsilon_{cr}$ )

$$t_m \dot{\epsilon} \propto \epsilon_{cr}^{-1}, \quad \dot{E}_{Dm} \dot{\epsilon}^{-1} = \epsilon_{cr}^{-1/6}$$

у широком опсегу брзина деформисања, који обухвата разноврсне механизме оштећења. Како је примећено у (Mastilovic, 2011b), израз (5.7<sub>1</sub>) је идентичан:

(i) емпиријској релацији између брзине пузања и времена лома при квази-статичком оптерећењу константним напоном (Tetelman and McEvily Jr., 1967), и (ii) изразу који је извео Лазар Качанов (Kachanov, 1986) за случај кртог лома при динамичком оптерећењу контролисаном деформацијом (када је  $\varepsilon_m = Const.$ ). Такође, скалирање (5.7<sub>1</sub>) је веома слично изразу за време лома који је извео Мишњаевски (Mishnaevsky, 1998), комбинујући основне идеје механике оштећења континуума са статистичким и кинетичким теоријама чврстоће.

Мастиловић (Mastilovic, 2013) је такође испитивао и ефекат брзине деформисања на еволуцију оштећења и репрезентативне величине елемента (површинског или запреминског, у зависности од димензионалности система; РВЕ). Монотono растућа динамичка чврстоћа (слика 5.8) има карактеристичан сигмоидни облик, чије дефинишуће особине су: (i) релативно умерена зависност од брзине деформисања рубних региона (I и III на слици 5.9) који одговарају малим-до-умереним и изузетно великим брзинама деформисања, и (ii) нагли пораст, ограничен релативно-уским опсегом брзина деформисања (II). (Граничне вредности брзина деформисања које дефинишу ове регионе мењају се од материјала до материјала.) Овакво понашање квалитативно осликава и експонент скалирања ( $\delta$ ) броја раскинутих веза у зависности од параметра оштећења у критичној тачки (5.8), који је веома информативан показатељ оштећења кртог система. Позивајући се на (Mastilovic, 2013), број раскинутих веза који одговара максимуму  $\sigma$ - $\varepsilon$  криве ( $n_m$ ) одговара закону скалирања (5.8<sub>1</sub>), дефинисаном континуалним спектром експонената скалирања зависних од брзине деформисања (5.8<sub>2</sub>).

$$n_m \propto L^\delta, \quad \delta_0 = 1 < \delta = \hat{\delta}(\dot{\varepsilon}) < \delta_\infty = 2 \quad \forall \dot{\varepsilon} \quad (5.8)$$

У скалирајућој релацији (5.8<sub>1</sub>),  $L \times L$  је димензија узорка или мерне површине уз испуњен услов  $L \geq L_r$ . Према резултатима симулација (Mastilovic, 2013), континуални спектар вредности експонента скалирања, неопходан за потпуни опис 2Д система у целом опсегу брзина деформисања, омеђен је неједначином (5.8<sub>2</sub>). Теоријско оправдање за зависност у облику степене функције (5.8)<sub>1</sub> није тренутно доступно. Међутим, може се приметити да вредност  $\delta$  у критичној тачки (која одговара времену лома  $t \equiv t_m \propto (\varepsilon_{cr} \dot{\varepsilon})^{-1}$ ; Mastilovic, 2011a) динамички-оптерећеног, неуређеног, кртог система одсликава доминантну просторну расподелу оштећења илустровану уметцима на слици 5.8 који приказују типичне 2Д обрасце распрострањања оштећења. Шта више, при квази-

статичким брзинама деформисања<sup>19</sup> вредност  $\delta$  функције прилази доњој асимптоти ( $\delta_0 = 1$ ) (Mastilovic, 2013). Са повећавањем брзине деформисања, вредност експонента  $\delta$  постепено се повећава према горњој асимптоти ( $\delta_\infty = 2$ ), како процес оштећивања постаје све равномерније распоређен састојећи се из, све мање корелисаних, зачећа мезопрлина. Коначно, у области изузетно великих брзина деформисања (III), типични образац оштећења састоји се од мезопрлина које равномерно прекривају целу површину узорка.<sup>20</sup> Како се види са слике 5.9, до преласка експонента скалирања

$$\delta = 2 - \exp \left[ - \ln(2) \cdot \left( \frac{\log(\dot{\epsilon}) - a}{\log(\dot{\epsilon}_{0.5}) - a} \right)^c \right], \quad \log(\dot{\epsilon}) \geq a \quad (5.9)$$

од доње ка горњој хоризонталној међи долази у највећој мери у прелазној области (означеној са II).

Осетљивост експонента скалирања  $\delta$  на брзину деформисања уско је везана са одговарајућом осетљивошћу РВЕ. Величину квадратног узорка при којој  $\sigma_m$  постаје независна од те величине, аутор је идентификовао са РВЕ у односу на динамичку затезну чврстоћу ( $I_{br}$ ). Смањење РВЕ са повећањем брзине деформисања, шематски приказано испрекиданом линијом на слици 5.9 — са градијентима који изразито варирају у зависности од области брзине деформисања — квалитативно се чине одразом у огледалу (у односу на апсцису) одговарајућег пораста просечне затезне чврстоће (слика 5.8). Типичне појавне одлике — две области релативно скромне зависности  $I_{br}$  од  $\dot{\epsilon}$ , које одговарају екстремно малим и великим брзинама деформисања са стрмоглавим падом ка доњој асимптоти у прелазној области — квалитативно су представљене феноменолошким изразом

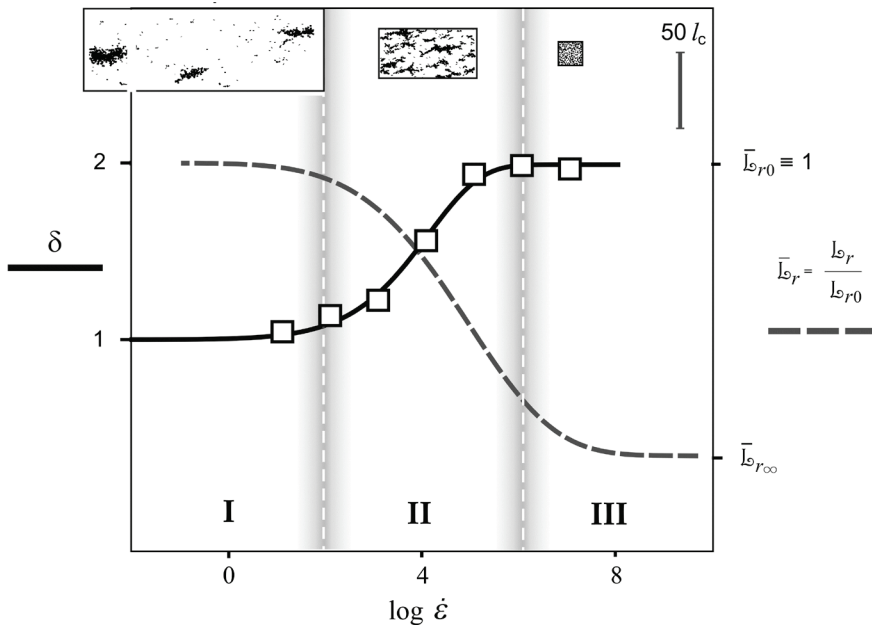
$$\bar{I}_{br} = \frac{I_{br}}{I_{br0}} = 1 + (\bar{I}_{br\infty} - 1) \cdot \left\{ 1 - \exp \left[ - \left( \frac{\log(\dot{\epsilon}) - P}{R} \right)^Q \right] \right\}, \quad \log(\dot{\epsilon}) \geq P \quad (5.10)$$

<sup>19</sup> Када појединачна раскидања везе показују тенденцију локализације у једну доминантну прлину, мање или више заталасаног и неправилног (назубљеног) облика, али глобално оријентисану управно на правац деловања оптерећења (Mastilovic and Крајчиновић, 1999с).

<sup>20</sup> Слична промена вредности експонента запажена је и при изучавању фазног прелазу из режима очвршћавања (коме је својствена униформна нуклеација микропрлина „разблажене” концентрације по целом узорку без кооперативних ефеката) у режим омекшавања, појавом локализације деформације и оштећења. Риналди и коаутори наводе “...a fractal exponent close to one makes intuitive sense for the invariant set driving the propagation, as much as a fat fractal (са експонентом 2; примедба С.М.) suits the phenomenology of the nucleation” (Rinaldi et al., 2006).

инспирираним Вејбуловом функцијом. У изразу (5.10), РВЕ при квази-статичком оптерећењу означена је са  $l_{r0}$ , а три велика слова абецедe (P, Q, R) означавају параметре подешавања. Доња хоризонтална међа РВЕ ( $l_{r\infty} \ll l_{r0}$ ), која одговара уређеном, хомогеном обрасцу распрострањања оштећења при највећој допуштеној брзини деформисања (Qi et al., 2009), зависи од дужинске резолуције система,  $l_c$ , и дефинисана је на просторној скали која дефинише одзив материјала и представља природно својство његове текстуре. Типични обрасци оштећења — повезани са областима умерених (I), прелазних (II), и изузетно-великих брзина деформисања (III) — уприличавају графичку илустрацију монотоног, неравномерног смањења РВЕ датог емпиријским изразом (5.10).

Један од циљева описаних истраживања је био усмерен ка испитивању универзалних трендова, којима неуређеност мезоструктуре и брзина деформисања утичу на динамичко понашање идеализованог кртог материјала.



**Слика 5.9.** Сигмоидна зависност експонента скалирања броја раскинутих веза ( $\delta$ ) у критичној тачки  $\sigma$ - $\epsilon$  криве од брзине деформисања. Квадратни симболи означавају резултате симулација, а пуна линија Вејбулову функцију (5.9) са параметрима  $a = -10$ ,  $c = 12$ , и  $\log(\dot{\epsilon}_{0.5}) = 3.7$ . Испрекидана крива шематски приказује ефекат брзине деформисања на нормализовани РВЕ (5.10) илустрован и са типичним обрасцима распрострањања оштећења, при чему су величине скалиране ради дочаравања тренда. Три карактеристичне области означене римским бројевина одговарају истима означеним на слици 5.8. (Засновано на резултатима објављеним у референци (Mastilovic, 2013)).



Виртуелни експерименти су обављени при практично идентичном напонском стању у широком опсегу брзина деформисања. Резултати, добијени осредњавањем понављаних симулација при различитим статистичким реализацијама улазних микро-особина, указују на уређујући ефекат кинетичке енергије на динамички одзив генеричког кртог материјала, који се одражава прелазом са стохастичког ка детерминистичком понашању. Овај прелаз је очигледан, имајући у виду смањење расипања затезне чврстоће и одговарајуће обрасце распрострањања оштећења, а одражава се и смањењем РВЕ. Уређујући ефекат кинетичке енергије може да се тумачи смањивањем осетљивости на структурне несавршености и затечену неуређеност текстуре материјала при повећању снаге оптерећивања.

## 5.2 Примена честичних модела на проблеме фрагментације

*Сатор и сарадници* (Sator et al., 2008; Sator and Nietala, 2010) изучавали су генеричке аспекте ударне фрагментације коришћењем стандардних МД рачунарских техника за стварање једноставног мезоскопског модела за симулацију удара диска у крути зид. Честице модела су дефинисане на мезоскопској скали и представљају кристална зрна или грануле неког генеричког кртог материјала не претендујући на опис било које специфичне морфологије. Управо због те општости, овај модел је сврстан у честичне моделе са потенцијалом типа (5.2):

$$\phi(\bar{r}_{ij}) = 107.37 \varepsilon_S \left[ \left( \frac{1}{\bar{r}_{ij}} \right)^{80} - \left( \frac{1}{\bar{r}_{ij}} \right)^{78} \right] \quad (5.11)$$

У потенцијалу (5.11), нормализовано међучестично растојање,  $\bar{r}_{ij} = r_{ij}/r_0$ , је количник растојања између честица  $i$  и  $j$  и карактеристичног дужинског параметра модела,  $r_0$ , који је типично пречник честице. Одабрани параметри ( $P = Q = 107.37 \cdot \varepsilon_S$ ,  $p = 78$ , и  $q = 80$ ) централне међучестичне интеракције (5.11), уместо специфичног материјала, моделирају општа својства кртих система: снажну одбојну силу приликом контакта и привлачну силу веома кратког опсега (нпр.,  $\phi/\varepsilon_S \approx \{-0.01, -0.00002\}$  при  $\bar{r}_{ij} = \{1.1, 1.2\}$ ). Параметар модела  $\varepsilon_S$  дефинише енергетску скалу, док је множитељ одабран тако да минимум потенцијала одговара вредности  $-\varepsilon_S$ . Интеграција Њутнових једначина кретања честица извршена је коришћењем Верлејевог алгоритма (2.3). Дужина временског корака је  $\delta t = 0.0005 t_0$ , где  $t_0 = \sqrt{\varepsilon_S r_0^2 / m_0}$  означава јединично време, при чему је  $m_0 = 1$  (јединична) маса конститутивне честице, коју не треба мешати са масом

фрагмената,  $m$ . Резултати симулација, представљени у даљем тексту, односе се на релативно мали систем од 1457 честица, али је осетљивост на величину модела испитивана до величина система од 36289 честица. Кружни диск чини идеална троугаона мрежа у чијим се чворовима налазе честице чије почетно међусобно растојање одговара минимуму потенцијала (5.11) без икакве затечене неуређености. Диск је припремљен на нултој температури са почетном густином честица густина  $\rho^* = \rho r_0^2 = 1.16$ , потом је заокренут око свога средишта за угао насумично одабран из униформне расподеле и задат му је интензитет почетне брзине управне на крути зид. Овај интензитет брзине удара коришћен је као природни контролни параметар процеса фрагментације. Сатор и сарадници су користили неуобичајен критеријум раскидања међучестичних веза: две суседне честице нису међусобно повезане од тренутка када кинетичка енергија њиховог релативног кретања (једне у односу на другу честицу) достигне апсолутну вредност њихове међусобне интеракционе (потенцијалне) енергије. Расподела величина фрагмената,  $n(m)$ , израчунавана је осредњавањем резултата добијених на основу 1000 симулација са различитим вредностима насумично изабраног угла почетног обртања диска. На овај начин се осредњавањем резултата великог броја статистичких реализација тежи добијању стабилних просечних вредности, неподложних великим колебањима. Резултати симулација фрагментације су представљени коришћењем нормализоване кумулативне масе фрагмената (2.31) која, како је већ раније било речи, у случају важења  $n(m) \propto m^{-\tau_f}$ , треба такође да се скалира са истим експонентом  $N(m) \propto m^{-\tau_f}$ .

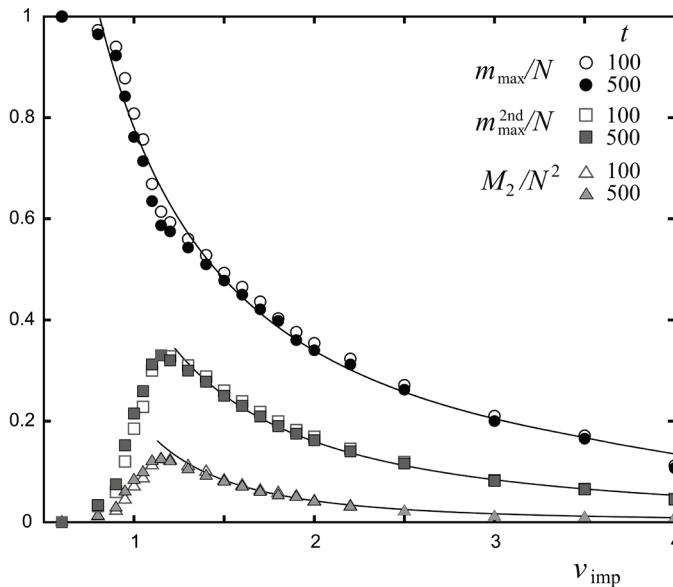
У циљу бољег разумевања процеса фрагментације, Сатор и сарадници (Sator et al., 2008) су израчунавали средњу масу најтежег ( $m_{\max}$ ), и другог-најтежег ( $m_{\max}^{2nd}$ ) фрагмента, као и просечну масу фрагмента ( $m_{ave}$ ) дефинисану другим моментом расподеле њихових маса

$$M_2 = \sum_m m^2 n(m) \propto m_{ave}$$

при чему сабирање не узима у обзир највећи фрагмент. Промене три наведене величине у функцији брзине удара илустроване су сликом 5.10 у два различита временска тренутка. На слици 5.10 се јасно види да се средње вредности маса два највећа фрагмента и другог момента расподеле не мењају значајно између временских тренутака 100 (празни симболи) и 500 (пуни симболи), што указује да је у  $t = 500$  достигнута стационарна расподела фрагмената. Као што је било и за очекивати,  $m_{\max}$  се поступно смањује са повећањем брзине удара што одсликава повећање интензитета процеса распада узорка са повећањем унесене енергије. С друге стране,  $m_{\max}^{2nd}$  и  $M_2$  имају максималне вредности при отприлике

истој брзини удара  $v_{\text{imp}} = 1.15 = v_0$ , што је у складу са опажањима Куна и Хермана (Kun and Hertmann, 1999) који су ту појаву интерпретирали као знак критичности фрагментације (отуд индекс “0” резервисан у овим разматрањима за критичну тачку фазног прелаза оштећење–фрагментација). Сатор и сарадници (2008) су, такође, учили да се са повећавањем величине система  $v_0$  мало смањује, што је очекивани тренд у критичној тачки. Како се види на основу кривих приказаних на слици 5.10 (пуне линије), опадања  $m_{\text{max}}$ ,  $m_{\text{max}}^{2\text{nd}}$  и  $M_2$  са повећањем брзине удара су верно приказана степеном функцијом са експонентима 1.2, 1.6 и 2.6, тим редом. Резултати симулација показују да представљање ових зависности са наведеним степеним функцијама важи не само у околини критичне тачке него и за све брзине удара закључно са 3.5.

Што се тиче нормализоване кумулативне масе фрагмената (2.31) за  $v_{\text{imp}} > v_0$ , резултати симулација показују да се она скалира са истим експонентом,  $N(m) \propto m^{-\tau_f}$ , у средњем домену маса фрагмената, без обзира на величине параметара међучестичне интеракције (5.11). Конкретно, променом комплета параметара (107.37, 80, 78) у (16.29, 13, 11), односно (4, 12, 6), не долази до промене експонента  $\tau_f$ , што је у складу са тврдњама Одершедеа и сарадника (1993) да је фрагментација, у доброј мери, независна од типа материјала.



**Слика 5.10.** Зависност нормализованих параметара фрагментације  $m_{\text{max}}$ ,  $m_{\text{max}}^{2\text{nd}}$  и  $M_2$  од брзине удара  $v_{\text{imp}}$  у временским тренуцима 100 и 500. Време је дато у јединицама  $t_0$  а интензитети брзина удара дати су у јединицама  $\sigma/t_0$ . (Преузето из референце (Sator et al., 2008) са допуштењем издавача. Copyright (2008) by EPLA).

Такође је важно да се нагласи да симулације Сатора и сарадника (2008) указују на постојање зависности у облику степене функције,  $N(m) \propto m^{-\tau_F}$ , не само у околини критичне тачке  $v_0$  него и у посткритичном домену.

Међутим, аутори су, при томе, уочили тренд повећања експонента  $\tau_F$  са повећањем енергије удара интеракције

$$\tau_F = \alpha_F \ln v_{\text{imp}} + \beta_F \quad (5.12)$$

што је у сагласности са ранијим опажањима Чинг и сарадника (1999, 2000) и Мјагкова и Шумикина (2005), али у супротности са резултатима нумеричких симулација које су, између осталих, објавили Кун и Херман (1999), Дил и сарадници (2000), Арарипе и сарадници (Araripe et al., 2005), у којима је експонент  $\tau_F$  практично неосетљив на промене улазне енергије у *широј околини* критичне тачке (дакле,  $\alpha_F = 0$ ). Сатор и сарадници су коефицијенте зависности (5.12) идентификовали као  $\alpha_F = 0.70 \pm 0.01$  и  $\beta_F = 1.00 \pm 0.01$  у домену ударних брзина  $v_0 \leq v_{\text{imp}} \leq 3$ . Разрешење ове контраверзе<sup>21</sup> је важно стога што би евентуална зависност експонента  $\tau_F$  од енергије удара била у супротности са теоријом о постојању само-организоване критичности у фрагментацији (Oddershede et al., 1993). Сатор и сарадници су на основу резултата својих честичних симулација устврдили да је зависност (5.12) генеричка особина фрагментације и истакли су слагање са експерименталним резултатима (Matsui et al., 1982; Moukarzel et al., 2007). Такође, аутори су варирали величину модела за два реда величине и показали да су вредности експонента  $\tau_F$  независне од величине модела (“locality”). Ово важно опажање баца ново светло на претпоставку Дила и коаутора (2000) да је зависност  $\tau_F$  од енергије удара, у симулацијама Чинг и коаутора (1999), последица релативно малог модела (јер је модел који су они користили више од десет пута већи од најмање величине модела који су испитивали Сатор и сарадници).

На крају, Сатор и сарадници су се сагласили са ранијим закључцима Куна и Хермана (1999), да зависност у облику степене функције расподеле маса фрагмената и максимума њеног другог момента од масе указује да фрагментација представља континуални фазни прелаз, слично као у случају перколационе транзиције. Међутим, они су нагласили да је за разлику од континуалних фазних прелаза, зависност у облику степене функције примећена не само у критичној тачки (која представља праг фазног прелаза) него и при већим брзинама удара.

Користећи исти честични модел, Сатор и Хиетала (2010) су анализирали зачеће и развој оштећења током ударне фрагментације. При томе су користили

<sup>21</sup> Видети анализу у (Timar et al., 2012) која је сажето приказана у поглављу 4.3.

најједноставнији, скаларни параметар оштећења, дефинисан количником броја раскинутих веза и укупног броја веза између честица. Параметри модела су готово идентични онима коришћеним у њиховом претходно описаном раду; временски корак интеграције је смањен на  $\delta t = 0.0001 t_0$  а симулације се прекидају после милион циклуса ( $t = 100$ ) када се фрагментирани систем, према резултатима претходне студије (Sator et al., 2008), довољно приближио стационарном стању. Такође, за разлику од претходне анализе, Сатор и Хиетала (2010) су као контролни параметар уместо брзине удара користили без-димензиони параметар јачине удара  $E_R$  представљен односом почетне кинетичке енергије и почетне потенцијалне енергије,  $E_R = m_0 v_{\text{imp}}^2 / 2 | -2.87 \varepsilon_S |$ . (За коришћењу величину система  $N_{\text{par}} = 1345$ , израз под апсолутном вредношћу представља просечну потенцијалну енергију запреминске честице са координационим бројем једнаким 6 у складу са троугаоном решетком.)

Сатор и Хиетала су прво анализирали промену коначног броја фрагмената,  $n_{\text{fin}} = \sum_m n(m)$ , са енергијом удара. Коначни број фрагмената, досегнут на крају процеса фрагментације, је илустративна количинска мера степена распада диска приликом удара (Behara et al., 2005). На основу резултата симулација, Сатор и Хиетала су закључили да се при умереним енергијама удара ( $E_R < 1$ ) број фрагмената мења линеарно са енергијом (упоредити, нпр., са Shen et al., 2017), док при већим брзинама удара ( $1 \leq E_R \leq 10$ ) зависност постаје логаритамска

$$\frac{n_{\text{fin}}}{N_{\text{par}}} = \alpha_{\text{nF}} \ln E_R + \beta_{\text{nF}} \quad (5.13)$$

са коефицијентима  $\alpha_{\text{nF}} = 0.26 \pm 0.01$  и  $\beta_{\text{nF}} = 0.23 \pm 0.01$ . (У изразу (5.13),  $N_{\text{par}}$  представља укупни број честица у узорку.) Ово опажање је у сагласности са резултатима Бехаре и сарадника (Behara et al., 2005), добијених коришћењем софистициранијег модела. Слични резултати су у (Mastilovic, 2018) добијени коришћењем 2Д-МД симулација; упоредити са изразом (2.49) и сликом (2.29).

После анализе развоја оштећења у диску у зависности од енергије удара, Сатор и Хиетала су анализирали коначно (завршно) оштећење,  $D_{\text{fin}}$ , које одговара вредности горе-дефинисаног скаларног параметра оштећења досегнутој на крају фрагментације када се стање система асимптотски приближило стационарном режиму). Резултати симулација су указивали да је зависност коначног оштећења од енергије удара облика

$$D_{\text{fin}} = \alpha_{Df} \ln \frac{E_R}{E_{R0}} \quad (5.14)$$

где је са  $E_{R0}$  означен бездимензиони параметар енергије удара који одговара првој критичној тачки фрагментације (тј. прагу фазног прелаза из оштећеног стања у фрагментирано стање). Коефицијент логаритамске зависности (5.14) је процењен на  $\alpha_{Df} = 0.256 \pm 0.005$  што је, случајно или не, веома блиско вредности коефицијента  $\alpha_{nF} = 0.26 \pm 0.01$  у (5.13). (Такође је блиско и вредности одговарајућег логаритамског множитеља,  $\alpha_F = 0.26 \pm 0.01$ , када за логаритамску зависност (5.12) као контролни параметар уместо  $v_{imp}$  користи  $E_R/E_{R0}$ . Наведена логаритамска зависност  $D_{fin}$  од  $E_R$ , била је позната из ранијих радова (Thornton et al., 1996; Behara et al., 2005).

На основу уочених логаритамских зависности (5.12), (5.13) и (5.14), Сатор и Хиетала су извели феноменолошке изразе за функционалне зависности  $\tau_F$  и  $n_{fin}/N_{par}$  од  $D_{fin}$ . Показали су, такође, да је и енергија фрагментације линеарно пропорционална коначној вредности скаларног параметра оштећења уз дискусију ефикасности процеса фрагментације. Аутори су наведене линеарне зависности протумачили као последицу генеричности њиховог модела.

*Бејкер и Ворнер* (Baker and Warner, 2012) су користили честичне моделе за симулацију једноосног динамичког истезања и фрагментације 1Д нити, 3Д греде и 3Д плоче, са или без кластерске подструктуре на мезо нивоу. Аутори су користили јавно доступну МД платформу (LAMMPS: Sandia National Laboratories) са међучестичном силом

$$f(r_{ij}) = -\frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} = -k (r_{ij} - r_0) \left[ \exp\left(r_{ij} \frac{\Xi}{r_{break}} - \Xi\right) + 1 \right] \quad (5.15)$$

дефинисаном у функцији међучестичног растојања  $r_{ij}$  (Buehler and Gao, 2006). У изразу (5.15),  $k$  ( $= 332$ ) је параметар крутости,  $r_0$  ( $= 2^{1/6}$ ) је међучестично растојање између најближих суседа,  $r_{break}$  ( $= 1.2$ ) је критично растојање при коме долази до раскидања међучестичне везе, а  $\Xi$  ( $= 1000$ ) је параметар изглађености (Buehler et al., 2003). Промена вредности  $k$  утиче на еластичне параметре малих деформација, док променом вредности  $r_{break}$  може да се подешава макроскопска релативна деформација лома и кохезивни напон  $\sigma_{coh} \propto d\phi/dr$ . Критично међучестично растојање  $r_{break}$  и параметар изглађености  $\Xi$  одговарају Фермијевој енергији и температури у Ферми-Дираковој функцији, тим редом (Buehler and Gao, 2006). Међучестични потенцијал  $\phi$  који одговара сили (5.15) је за изабране параметре готово хармонијски, све до критичног растојања када нагло пада у нулу, што га чини погодним за моделирање кртих материјала. С тим у вези, енергија неопходна за раскидање једне везе је  $\epsilon_{break} \approx k(r_{break} - r_0)^2 / 2 = 1.00$ .

По раскидању везе, међучестична сила (5.15) замењује се одговарајућом силом без затезне компоненте (тј., раскидањем, веза од хемијске постаје механичка). Честице су распоређене у складу са конфигурацијом атома у Бравеовој (Bravais) кубној површински-центрираној решетки. Ради рачунске ефикасности и универзалности, симулације су рађене са бездимензионалним параметрима модела: маса честица  $m_0 = 1$ ; међучестично растојање које одговара  $\phi = 0$ ,  $\sigma_0 = 1$ ; Болцманова константа,  $k_B = 1$ . Сходно томе, сви резултати симулација добијени у овој раду су функције  $\sigma_0$ ,  $m_0$ , и  $\epsilon_{break}$  за дати материјал (Allen and Tildesley, 1987).

Симулације су вршене за две различите подструктуре материјалног система. У кластерисаној подструктури честице су груписане у несаломиве кластере у оквиру којих честице „комуницирају” преко међудејстава сличних (5.15), али без могућности раскида међучестичних веза док је међусобна сила између честица које припадају различитим кластерима дефинисана са (5.15). У некластерисаној подструктури, постоје само међучестичне интеракције типа (5.15), те једна честица дефинише најмањи могући фрагмент. Једноосна динамичка деформација наноси се преко линеарног профила брзина ( $\dot{x} = \dot{\epsilon} x$ ) док величина домена у друга два правца остаје непромењена. Овај почетни распоред брзина онемогућава настанак ударних таласа као што је илустровано у ранијим студијама (нпр., Holian and Grady, 1988; Mastilovic and Krajcinovic, 1999c). До лома долази типично при  $\epsilon_x \approx 3\%$  али се симулације настављају до 200% у циљу достизања равнотежне расподеле фрагмената. Предмет истраживања било је једноосно динамичко оптерећење (брзином деформисања  $\dot{\epsilon}$ ) са три геометријске конфигурације честица

- (i) 1Д нит (ниска од  $2 \cdot 10^4$  честица),
- (ii) 3Д греда ( $2 \times 2 \times 1 \cdot 10^4$  ћелија кубне површински-центриране конфигурације са  $1.6 \cdot 10^5$  честица), и
- (iii) 3Д плоча ( $2 \times 200 \times 200$  ћелија кубне површински-центриране конфигурације са  $3.2 \cdot 10^5$  честица).

У почетном тренутку свакој честици је додељена случајна брзина изабрана из униформне расподеле што одговара дефинисању почетне температуре сходно екипартиционој теореме статистичке механике (2.15a). Термичко уравнотежење узорка се постиже у неколико хиљада рачунских циклуса пре доношења једноосног динамичког оптерећења. Избор почетне температуре има велики утицај на процес фрагментације што је већ разматрано у ранијим студијама (нпр., Diehl et al., 2000). Уколико је почетна температура ниска, међучестичне везе могу максимално да се растегну пре почетка фрагментације – ова велика деформациона енергија трансформише се у енергију лома што има за последицу велики број фрагмената мање просечне масе. Насупрот томе, више почетне температуре значе повећање количине термалне

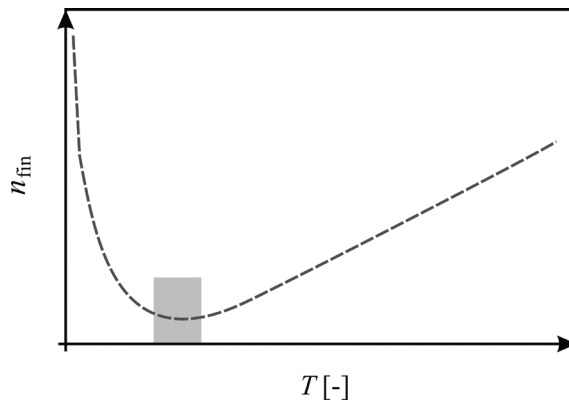
енергије расположиве за стварање (зачетак) прелина, чиме се промовише појава фрагментације при мањим деформационим енергијама, што смањује укупни број фрагмената. На веома високим почетним температурама термална активација настанка прелина постаје доминантна, а максимална акумулирана деформациона енергија прелази у други план, што за последицу има поновно повећање броја фрагмената (слика 5.11).

Бејкер и Ворнер су почели своје истраживање са најједноставнијом од горе наведених конфигурација – 1Д ниском честица. Овај модел је због своје једноставности темељно изучен у класичним студијама (нпр., Mott and Linfoot, 1943 или Grady and Kipp, 1985) у којима је третиран као нит случајно раскидана на различитим међусобно независним локацијама. У том случају расподела фрагмената зависи искључиво од густине дефеката, те процес раскидања нити спада у категорију континуалних Поасонових процеса, са вероватноћом налажења фрагмента масе  $m$  дефинисаном густином расподеле

$$pdf(m) = \frac{1}{m_{ave}} \exp\left(-\frac{m}{m_{ave}}\right) \quad (5.16a)$$

и одговарајућом комплементарном кумулативном расподелом

$$ccdf(m) = 1 - \int_0^m pdf(x) dx = \exp\left(-\frac{m}{m_{ave}}\right) \quad (5.16b)$$



**Слика 5.11.** Зависност укупног броја фрагмената од почетне температуре. Температура је приказана у бездимензионалној форми; температура која одговара минимуму  $n_{fin}$  центрирана је отприлике око  $T=0.15$  (осенчена област) док је, поређења ради, температура површинске сублимације 0.57. (Репродуковано на основу података из референце (Baker and Warner, 2012)).



Важно је да се уочи да се границе симулационе ћелије током целе симулације равномерно крећу брзинама  $\dot{x}(t, x = \pm L/2) = \dot{\varepsilon} L/2$ , што не треба мешати са почетним профилем брзина,  $\dot{x}(t_0 = 0, x) = \dot{\varepsilon} x$ , примењеном *на све* честице ниске у циљу избегавања инерцијалних ефеката. На крају, свим честицама је додељена и случајна брзина (изабрана из униформне расподеле) како би се пореметила симетричност структуре и дефинисала почетна температура ( $T = 0.0360$ ). Симулације су вршене при  $\dot{\varepsilon} = 2.94 \cdot 10^{-4}$  и окончане при  $\varepsilon = 2.00$ .

Резултати симулација, приказани у виду комплементарне кумулативне расподеле фрагмената, квалитативно се слажу са (5.16б), међутим квантитативна разлика је веома приметна. Аутори су ово неслагање између експоненцијалног модела фрагментације непрекидних средина (континуума) и симулација методом прекидних (дискретних) система објашњавали утицајем величине честице на расподелу маса фрагмената. У циљу илустрације ове тезе користили су комплементарну кумулативну функцију геометријске расподеле

$$ccdf(m^{\mathbb{D}}) = \left(1 - \frac{1}{m_{ave}^{\mathbb{D}}}\right)^{m^{\mathbb{D}}} \quad (5.17)$$

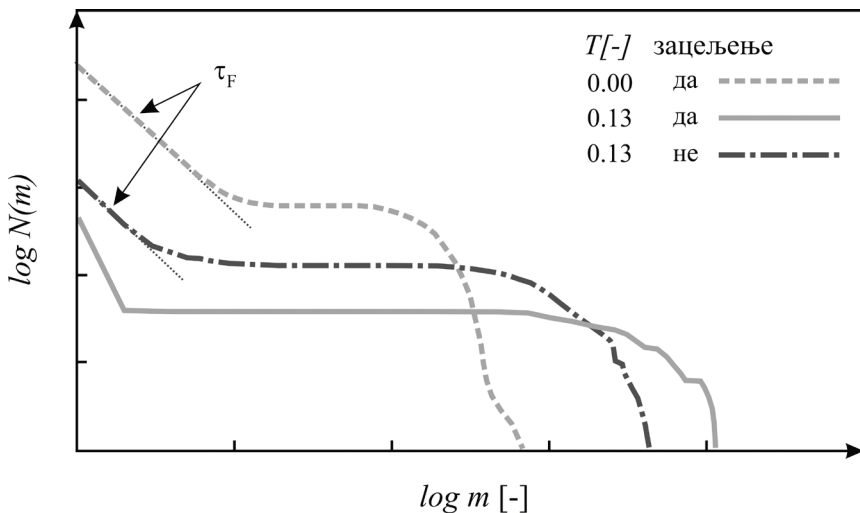
која представља дискретну аналогију експоненцијалне функције. У изразу (5.17) горњи индекс  $\mathbb{D}$  означава дискретне верзије одговарајућих континуалних величина. Геометријска расподела (5.17) је показала веома добро квантитативно поклапање са дискретном расподелом добијеном коришћењем честичних симулација. Међутим и ова расподела показује системска одступања од резултата симулација на репу расподеле који одговара највећим фрагментима. Бејкер и Ворнер (Baker and Warner, 2012) су ово неслагање тумачили неспецифицираним динамичким ефектима, неизбежним у честичним симулацијама, који доводе до међудејстава између еластичних таласа, али није потпуно јасно о каквим се међудејствима ради у условима примене почетног брзинског поља.

Друга конфигурација коју су Бејкер и Ворнер анализирали била је 3Д греда при чему је акценат стављен на утицаје груписања честица у кластере, зацељивања раскинутих веза и почетне температуре. У случају кластерисаних честица, 3Д греда је представљена 1Д ниском кластера различитих величина (24, 52, 128 и 256 честица распоређених у конфигурацији Бравеове кубне површински-центриране решетке), ради поређења са резултатима претходно добијеним за 1Д ниску честица. Све симулације су урађене са  $T = 0.360$  са осредњавањем резултата добијених за две симулације по свакој од величина кластера. Комплементарне кумулативне расподеле показују добро слагање свих кластерисаних симулација (без обзира на број честица), уз омогућено зацељивање раскинутих веза са (5.16б) све до величине фрагмента која одговара

отприлике двострукој просечној величини фрагмента; потом долази до одступања резултата на начин већ описан код 1Д ниски честица. Дакле, ниска кластера (3Д греда) има квалитативно исту расподелу фрагментата као 1Д ниска честица. У случају греда састављених од некластерисаних честица расподела фрагмената је наизглед квалитативно другачија, без обзира да ли је омогућено зацељивање раскинутих веза.

Међутим, занимљиво је опажање аутора да се у случају не узимања у обзир најмањих фрагмената (при чему је за честичне моделе са зацељивањем веза потребно да се игноришу само једночестични фрагменти,  $m = 1$ , а за оне са зацељивањем  $m \leq 10$ ) комплементарна кумулативна расподела маса фрагмената враћа експоненцијалну форму (5.166) карактеристичну за Поасонове процесе. На основу овога опажања, аутори су извели закључак да је основна разлика у процесу фрагментације кластерисаних и некластерисаних честица у постојању додатног механизма, у случају ових других, који доводи до настанка великог броја превасходно једночестичних фрагмената. Бејкер и Варнер су појаву образложили у контексту некорелативне кинетичке енергије одговорне за термичку активацију раскидања веза, која са енергетског становишта фаворизује „откидање” изолованих честица, односно, настанак једночестичних фрагмената. (Напомена: у случају модела се кластерисаним честицама број једнокластерских фрагмената није тако изражен.) Ово објашњење је засновано на претпоставци да површине лома великих фрагмената нису глатке (тј., не одговарају (100) равнима), него су неправилног облика типичног за хрпаве површине макроскопских објеката. Резултати симулација сугеришу да је кључни предуслов појаве огромног броја једночестичних фрагмената у некластерисаним симулацијама претходни настанак великих фрагмената са неправилним, хрпавим површинама лома. Постојање додатног механизма лома код система некластерисаних честица доводи до особене расподеле фрамената, која је за мале фрагменте описана степеним функцијама, док нешто већи фрагменти прате линеарно-експоненцијалну расподелу (упредити са мултилинеарно-експоненцијалном расподелом у (Mastilovic, 2015, 2016)). Расподела највећих фрагмената није описана ни са једном од претходне две функције, већ је слична оној коју су предложили Џоу, Молинари и Рамеш (нпр., Zhou et al., 2006). Што се тиче утицаја зацељивања раскинутих веза, први закључак је да се квалитативни изглед расподеле фрагмената не мења: степена функција за мале, а линеарно-експоненцијална за средње величине фрагмената. Међутим, у складу са интуитивним очекивањима, типична величина фрагмента у линеарно-експоненцијалном домену који доминира расподелом је значајно већа за системе са зацељивањем веза. Бејкер и Варнер су, на снову тога, нагласили аналогију

између утицаја незацељивања раскинутих веза и повећања брзине деформисања, у смислу да оба ефекта не мењају карактер расподеле, али утичу на смањење просечне масе фрагмента (видети такође, Holian and Grady, 1988). Коначно, што се тиче утицаја почетне температуре, на слици 5.12 су јасно уочљива три ефекта њеног повећања: (i) смањује се ширина опсега малих фрагмената описаних степеном функцијом а повећава ширина опсега фрагмената умерене величине описаних линеарно експоненцијалном расподелом, (ii) повећава се експонент степене функције  $\tau_F$ , и (iii) смањује се број фрагмената. Примарна разлика између симулација при коначној температури у односу на  $T = 0$  је у постојању насумичног дела брзине подрхтавања (2.16), који дефинише термалну енергију насумичног вибрационог кретања представљену апсолутном температуром (слика 2.3). На основу тога при симулацијама на нултој температури долази до много већег нагомилавања деформационе енергије у систему пре почетка фрагментације, што процес чини интензивнијим (ослобађање веће количине енергије у краћем времену). Крајњи ефекат је већи број фрагмената мање просечне величине (поново аналогија са повећањем брзине деформисања). Без обзира на све, линеарно-експоненцијална расподела опстаје у, нужно, суженом домену умерених величина фрагмената. Једна од последица постојања почетне температуре  $T \neq 0$  је и широка расподела истегнутих веза пре nanoшења механичког оптерећења (обрнуто сразмерна „резерви затезне чврстоће”).



**Слика 5.12.** Динамичко једноосно истезање 3Д греде: шематски приказ зависности расподеле комплементарног кумулативног броја фрагмената у зависности од почетне температуре и могућности зацељивања раскинутих веза. Експонент степене функције у назначеним деловима кривих има вредност 2.7. (Репродуковано на основу података из референце (Baker and Warner, 2012)).

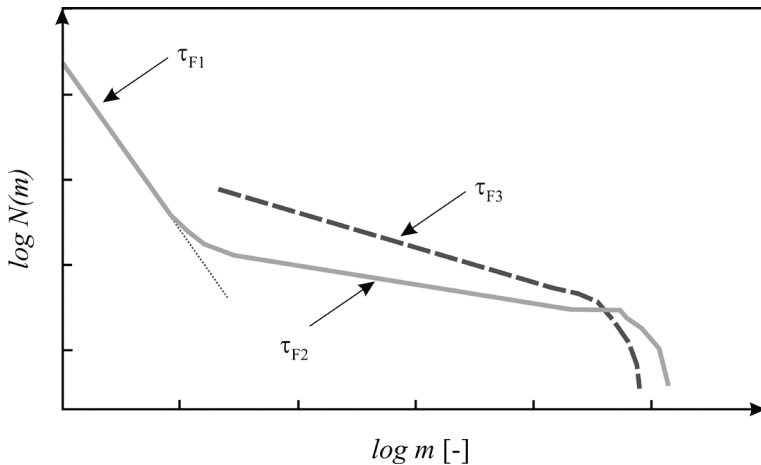
Приликом накнадног повећавања механичког оптерећења, брзина настанка прслина поступно расте пратећи нормалну расподелу (у складу са укореењеним аргументима статистичке механике ефективна дужина међучестичних веза је у складу са нормалном расподелом стандардне девијације  $\sqrt{k k_B T}$ ). Ово је у супротности са симулацијом на нулној почетној температури где долази до, готово истовременог, настанка великог броја прслина приликом достизања критичног оптерећења. Постојање везе између брзине зачећа прслина и одговарајуће расподеле фрагмената је примећено и у другим нумеричким студијама (нпр, Zhou et al., 2006). Коначно, занимљиво је да се уочи, да примећена вредност експонента степене функције  $\tau_F = 2.7$ , заједничка за симулације на нулној температури са зацељивањем, и коначној температури без зацељивања, може да сугерише да је еволуција најмањих фрагмената у складу са процесом фазне промене коју су Бејкер и Ворнер (2012) поистоветили са површинском сублимацијом.

На крају је анализирана и 3Д плоча под идентичним оптерећењем, са циљем испитивања утицаја кластерске мезоструктуре, величине кластера и зацељивања веза. У односу на 3Д греду, динамичка фрагментација плоча укључује многе додатне физичке процесе због раванске геометрије, оријентације прслина и концентрације напона на њиховом врху. Места зачећа прслина немају више доминантан утицај на величину фрагмената, јер са растом прслина долази до њихове међусобне интеракције и пресецања. Такође, гранање прслине може да доведе до настанка фрагмената пресецањем различитих грана исте прслине, без међудејстава са другим прслинама. Поређење резултата 3Д греде и 3Д плоче омогућава увид у ефекте наведених додатних механизма лома. Пре увида у резултате симулација упутно је да се напомене да у случају некластерисаних система у тренутку прекида симулација ( $\varepsilon = 2.0$ ) *није* досежута стационарна расподела фрагмената. На слици 5.13 приказана је расподела комплементарног кумулативног броја фрагмената у логаритамском простору за кластерисану и некластерисану мезоструктуру, без могућности зацељивања раскинутих веза. Бејкер и Ворнер су изводили по три симулације са три величине кластера (са 24, 48, и 80 честица по кластеру) и показано је да величина кластера нема утицаја на расподелу фрагмената, па црвена испрекидана крива на слици 5.13 представља квалитативни тренд заједнички за све величине кластера.

Такође је утврђено да је квалитативни облик расподела исти и за случај фрагментације система са зацељивањем веза, с тим што се, у одређеној мери, мењају вредности експонента степене функције,  $\tau_F$ , у различитим доменима расподела (слика 5.13). Конкретно,  $(\tau_{F1}, \tau_{F2}, \tau_{F3}) = (3.0, 1.2, 1.5)$  за случај

симулација са могућношћу зацељивања раскинутих веза постаје  $(\tau_{F1}, \tau_{F2}, \tau_{F3}) = (5.0, 1.3, 1.3)$ . С тим у вези, ипак треба да се нагласи да је у случају система са могућношћу зацељивања раскинутих веза примећено одсуство фрагмената између 5 и 300 честица, што су Бејкер и Варнер тумачили на неколико начина (Baker and Warner, 2012). Уопште узев, најочљивија разлика у односу на резултате симулација 3Д греда је да расподела фрагмената у средњем опсегу (умерених величина) није више линеарно-експоненцијална него прати засебну степену функцију. Значи, приликом фрагментације 3Д плоча расподела малих и средњих фрагмената описана је са две степене функције изразито различитих вредности експонената  $\tau_F$ .

Симулације једноосних динамичких истезања 1Д ниски честица, 3Д греда и 3Д плоча, коришћењем честичних метода Бејкера и Ворнера (Baker and Warner, 2012) истакле су три различита физичка механизма који контролишу процес фрагментације: зачеће прслина, сублимацију слободних површина (фазни прелаз) и раст и гранање прслина. Релативне утицајности ових физичких процеса контролишу гранични услови, особине и мезоструктура материјала, и — у случају симулација — дискретизација рачунског домена. Расподеле фрагмената код 1Д ниски честица и 3Д греда су у највећој мери контролисане местима зачећа прслина те представљају Поасонове процесе што води до линеарно-експоненцијалних расподела.



**Слика 5.13.** Динамичко једноосно истезање 3Д плоче: шематски приказ зависности расподеле комплементарног кумулативног броја фрагмената за кластерисану (црвене испрекидана линија) и некластерисану мезоструктуру (сива, пуна линија) за симулације без могућности зацељивања раскинутих веза. У случају симулација са могућношћу зацељивања раскинутих веза, расподеле остају квалитативно исте, али се мењају вредности експонента степене функције. (Репродуковано на основу података из (Baker and Warner, 2012)).

Фазни прелази и еволуција прслина (раст, гранање и укрштање), као што је предвиђено аналитичким теоријама и опажено у експериментима, доминантно одређују расподелу фрагмената облика степене функције. Симулација динамичке фрагментације коришћењем честичних метода представља велики изазов због интеракција између неизбежног увођења вештачке просторне (дужинске) скале приликом дискретизације и суштинске природе физичких процеса.

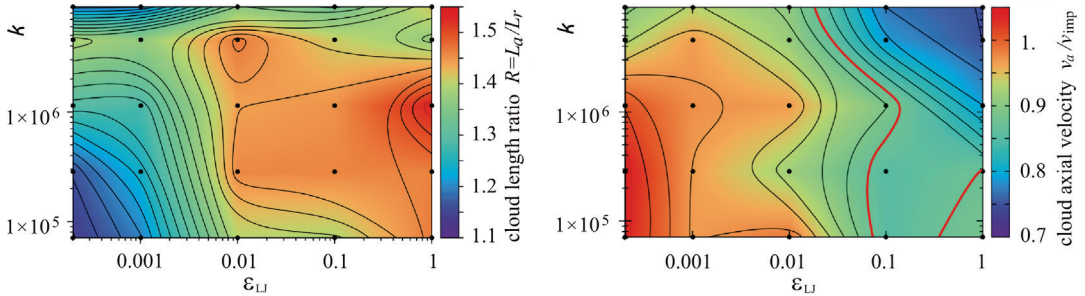
*Вотсон и Штајнхаузер* (Watson and Steinhauser, 2017) су користили честичне методе за моделирање хипербрзинског удара алуминијумске лопте о фиксирану танку плочу од истог материјала. Аутори су изложили квантитативну рачунску анализу резултујућег облака фрагмената, уз свеобухватно проучавање различитих кључних параметара честичног модела. Посебан квалитет овога рада је у томе што су аутори били у могућности да добијене резултате упореде са резултатима одговарајућих експеримената, непосредно пре тога изведених у истој установи (Fraunhofer–Institute for High–Speed Dynamics, Ernst–Mach–Institut, Freiburg, Germany). Вотсон и Штајнхаузер су закључили да је њихова честична метода веома стабилна и рачунарски ефикасна за симулације ове врсте.

За моделирање су коришћене честице идентичних маса,  $m_i = m_0$ , постављене у чворове тополошки и геометријски уређене кубне решетке (дакле, са идентичним међучестичним растојањем  $r_{0ij} = r_0$ ). Овај распоред представља само дискретизацију рачунског домена на мезоскали и нема никакве везе са кристалном решетком алуминијума која је хексагонална густо-пакована (“HCP – hexagonal closed-packed”). Међучестичне силе су дефинисане на основу пар потенцијала. Слично нелинеарном хибридном потенцијалу Мاستиловића и Крајчиновића (слика 5.1) препозната су два основна типа међудејстава: (i) контактнo/притисна, моделирана у овом случају Ленард-Џоунсовим 6-12 потенцијалом (2.5), и (ii) кохезивна, моделирана Хуковим потенцијалом (5.4<sub>2</sub>) са одсецањем. Разлика је, дакле, само у одбојној грани јер је у (5.4<sub>1</sub>) због моделирања кртих система коришћен Борн-Мејеров потенцијал, док Вотсон и Штајнхаузер користе традиционалнији Ленард-Џоунсов 6-12 потенцијал јер имају за циљ да репродукују, што је могуће верније, особине алуминијума. За међучестично растојање одсецања, при коме долази до раскидања везе, усвојено је  $r_{cr} = 1.5 r_0$ . Међутим, две честице и по раскидању кохезивне везе могу да наставе да међусобно реагују једна са другом (или било којом честицом са којом дођу у додир) преко контактнoг потенцијала, докле год је  $r_{ij} < r_0$ . Међучестичне интеракције су у потпуности дефинисане са свега три параметра: (i) дубином

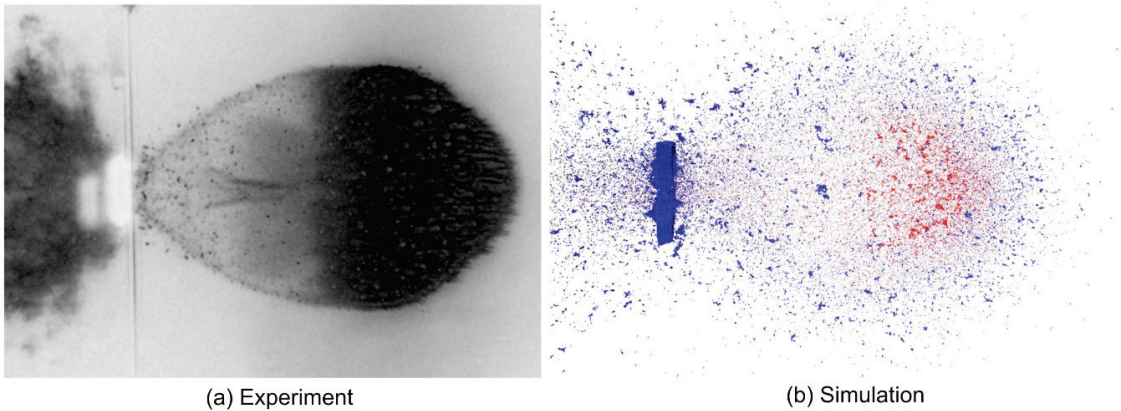
потенцијалне јаме,  $\varepsilon_{LJ}$  (2.5), (ii) константом крутости везе при затезању,  $k_{ij} = \mathcal{K}$  (5.4), и (iii) међучестичним растојањем одсецања  $r_{cr}$  које дефинише мезоскопски лом. Одређивање ових параметара представља кључни корак у дефинисању честичног модела, јер они у највећој мери дефинишу резултате симулација. Аутори су у овом случају ставили акценат на три особине материјала за које су сматрали да су од пресудне важности за верну симулацију хипербрзинског удара: (i) отпорност на притисак, (ii) кохезивна сила која држи елементе на окупу и омогућава формирање чврстог тела, и на крају (iii) мезоскопски лом. Веома је важно да се истакне да су при симулацијама занемарени енергетски губици у облику трења и пригушења, што се показало као веома важно за резултате симулација о чему ће бити речи касније.

Вотсон и Штајхаузер су велику пажњу посветили анализи свога модела са становишта његове објективности и рачунске конвергенције с обзиром на величину (број честица). Први циљ су постигли увођењем параметара инваријантних на дужину, нормализацијом са константом кубне решетке (равнотежним међучестичним растојањем),  $\varepsilon_{LJ} \rightarrow \varepsilon_{LJ} / r_0$  и  $\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K} / r_0$ . На овај начин резултати симулација су независни од величине модела или броја честица, што су аутори показали и аналитички и рачунски (преко примера система који се разликују за два реда величина, а који дају резултирајуће енергије независне од броја коришћених честица). По питању рачунске конвергенције, студија Вотсона и Штајхаузера показује да симулације почињу да конвергирају када број честица досегне око четврт милиона. Утврђено је да стабилан временски корак одговара величини  $\delta t = 0.1$  ns. Коначно, за потребе избора два основна параметра модела,  $\varepsilon_{LJ}$  и  $\mathcal{K}$ , аутори су се послужили инверзном анализом подешавања облика и брзине простирања облака фрагмената коришћењем експерименталних резултата. Снимке облака фрагмената узрокованог ударом при брзини удара  $v_{imp} = 6.7$  km/s и односу дебљине циљне плоче и пречника лопте  $t_{pl}/D_{pr} = 0.425$ , организовали су у релевантни опсег простора ( $\varepsilon_{LJ}$ ,  $\mathcal{K}$ ) параметара. Конкретно, дубину потенцијалне јаме су варирали за четири реда величина у опсегу  $[2 \times 10^{-4}, 1]$  а константу крутости за два реда величина у опсегу  $[7.1 \times 10^4, 9.1 \times 10^6]$ . За коначно одређивање параметара модела у наведеним опсезима, који најбоље одговарају експерименталним резултатима, аутори су користили визуелно, квалитативно поређење облака фрагмената, али и следећа квантитативна својства: однос дужине и ширине облака фрагмената, и брзину аксијалног простирања облака (напредовања фронта облака у правцу удара) (слика 5.14). Ова анализа резултирала је оптималним вредностима параметара  $\varepsilon_{LJ} = 0.01$  и  $\mathcal{K} = 4.56 \times 10^6$ . Коришћење ових вредности параметара у честичним симулацијама резултира облаком фрагмената који је визуелно веома сличан експерименталном резултату, као што се види на слици 5.15. Оцењујући

погодност модела, аутори су закључили да се постиже добра подударност између симулација и експеримената када судари доводе до јаких ударних таласа који се шире кроз материјал, али не тако добра подударност када сложена геометрија модела или релативно скромне брзине удара отежавају стварање ударних таласа.



**Слика 5.14.** (а) Промена односа подужне (у правцу удара) и попречне дужине облака фрагмената у простору ( $\epsilon_{LJ}$ ,  $\mathcal{A}$ ) параметара. (б) Промена нормализоване брзине простирања облака фрагмената у правцу удара у истом простору. Црвена контурна линија представља експерименталне резултате. (Преузето из референце (Watson and Steinhauser, 2017) на основу услова дефинисаних у “the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)”. Copyright (2017) by the authors).



(a) Experiment

(b) Simulation

**Слика 5.15.** Валидација модела упоређивањем облика облака фрагмената добијених при брзини удара,  $v_{\text{imp}} = 6.7 \text{ km/s}$ , и односу дебљине циљне плоче и пречника лопте,  $t_{pl}/D_{pr} = 0.425$ . (а) Експериментално добијени снимак и (б) одговарајући резултат симулације. (Преузето из референце (Watson and Steinhauser, 2017) на основу услова дефинисаних у “the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)”. Copyright (2017) by the authors).



Детаљнијом анализом резултата и поређењем са експериментима, Вотсон и Штајхаузер су дошли до два закључка.

Прво, брзина простирања облака фрагмената у симулацијама је прецењена. Друго, граница облака фрагмената јасније је изражена на фотографији (слика 5.15а) него у случају рачунских симулација (слика 5.15б). Ова опажања објашњена су недостатком дисипативних механизма у честичном моделу који би узели у обзир загревање и топљење материјала. Самим тим, сва енергија ударног таласа (осим релативно малог дела искоришћеног за раскидање веза) трансформише се у кинетичку и потенцијалну енергију што резултира у прецењивању брзина одређених честица, па тиме и брзине простирања облака фрагмената у поређењу са експерименталним резултатима. Секундарни ефекат недостатка дисипације енергије огледа се у мање оштрој (дифузивнијој) граници облака фрагмената у симулацији узрокованој превеликом варијацијом у брзинама честица. Насупрот томе, загревање и топљење при лабораторијском експерименту ограничавају брзине честица и помажу да се створи оштрија граница облака, попут оне која може да се виде на слици 5.15а. Сходно томе, аутори су нагостили да ће у наставку истраживања унапредити свој честични модел увођењем дисипативних механизма који би узели у обзир наведене недостатке.

## Поговор

Акцент ове монографије је на *традиционалним*, основним методама рачунске механике прекидних средина (молекуларна динамика, методе решетке, методе дискретних елемената, честичне методе). Суштинска разлика између наведених метода је у нивоу просторно-временске резолуције и, сходно томе, природи међудејстава основних градивних елемената одговарајућих модела. Молекуларном динамиком се моделира структура на нивоу атома/молекула (нано до микро скале) чија су међудејства дефинисана избором међуатомског потенцијала који тежи да више или мање детаљно репродукује елементарне физичке интеракције на наведеном нивоу. Остале три методе покривају широки простор од микро до макро скале и разликују се како по врсти основних структурних елемената (нпр., 1Д, 2Д, 3Д) којима се врши дискретизација рачунског домена тако и *конститутивним релацијама* (укључујући и раскидање веза) којима се моделирају њихова међудејства. Мотив овог сажетог прегледа је да се увидом у резултате вишедеценијских истраживања, углавном од средине 80-тих година прошлог века до данашњих дана, истакне да се рачунска механика прекидних средина развила у значајну истраживачко-инжењерску област, комплементарну (ако не алтернативну) широко-распрострањеним моделима механике континуума. Почетак овог развоја омогућила је појава рачунара приступачнијих цена а све веће снаге (што је подржано у скорије време и могућностима извођења лабораторијских експеримената на све мањим просторним и временским скалама) чиме су модели рачунске механике прекидних средина прерасли ексклузивност малог броја водећих рачунских центара и почели да стичу упоришта у широј истраживачко-инжењерској заједници. Тај тренд је брзо резултирао обиљем метода и понудом решења на многе сложене проблеме, како у научним истраживањима тако и привреди, чија језгровита илустрација у овом прегледу само грубо скицира врх леденог брега. Рачунска механика прекидних средина се на тај начин временом наметнула као све значајнија и утицајнија грана рачунске механике да би коначно постала саставни део истраживања у најразличитим делатностима (нанотехнологија, истраживања матичних ћелија, медицинско инжењерство, пропулзија, балистика, рударство, грађевинарство, обрада метала, фармација, наука о материјалима...) о чему сведоче многи тематски научни скупови. Верујемо да нема разлога да се овај тренд не настави и убудуће имајући у виду све веће ослањање на масивне рачунарске симулације

(виртуелне експерименте) у научним истраживањима, инжењерским анализама и инжењерингу сложених материјалних система.

И поред назначене распрострањеније употребе ових метода за моделирање различитих класа материјала, мора да се нагласи да се чини да су најприродније и најуспешније примене нађене у симулацијама одзива материјала који имају *исту топологију* (на циљној просторној скали) као репрезентујућа структура модела. Шта више, модерне, напредне примене заговарају приступ моделирању где се, у мери у којој је то могуће, инсистира на непосредној кореспонденцији између експериментално утврђене структуре материјала и структуре коју експлицитно представља нумерички модел (тзв., виртуелна реконструкција микро/мезо/макро текстура). Овим се поспешује описивање физичких процеса на финијим просторним скалама у циљу *дедукције* одзива материјалног система на макроскопској скали; односно, истраживање проблема деформације, оштећења и лома коришћењем јединствене перспективе „одоздо према горе”. Наведени приступ не замењује традиционални аналитички принцип метода механике континуума „одозго према доле”, већ нуди комплементарну стратегију која може да се користи у синергији са увреженим методама структурне анализе ради моделирања и контролисања сложених понашања и сложених материјалних система. Могућност „кројења по мери” (коришћењем структурних елемената чија је разноврсност облика и начина међудејстава ограничена само маштом, потребама и ресурсима аналитичара) представљају предност без преседана у моделирању „егзотичних” и сложених система које намећу модерне технологије. Сигурно је да рачунске методе механике прекидних средина имају пред собом још дуг пут како би постале потпуно развијени, у потпуности квантитативно-оријентисани, инжењерски алати. Међутим са великом поузданошћу може да се очекује да ће при томе бити подржане даљим развојем трендова који су их и изродили: рачунарских технологија и програмерских могућности, иновативних експерименталних техника, па и нових могућности за виртуелну реконструкцију микроструктура.

Динамичка фрагментација чврстих материјала одабрана је као изузетно илустративна област примене у којој елеганција и могућности метода рачунске механике прекидних средина долазе до пуног изражаја. Нагли механички распад чврстог материјала је појава својствена *свим* просторним и временским скалама. Без обзира да ли се ради о космичким или атомским распадима, појаве одликује неповратност, нелинеарност, и неравнотежа што их чини изразито тешком за испитивање коришћењем традиционалних аналитичких метода. Типични процес динамичне фрагментације представља катастрофалну, акролошку појаву коју одликују екстремно велики градијенти параметара стања. Овде сажети резултати рачунских симулација фрагментације при екстремно снажним динамичким побудама (експлозивним и ударним оптерећењима) значајно побољшавају разумевање проучаваних процеса, јер осим репродукције експерименталних опажања облика фрагмената, зависности од снаге оптерећења, и расподеле масе, такође нуде и потпун приступ условима ломова и еволуцији оштећења. Илустративан пример је постизање стационарне расподеле фрагмената. Непосредно након нашоња динамичког оптерећења почиње процес фрагментације, настанка и брзог ширења „облака крхотина”. Не може бити пренагла-

шено да се настали фрагменти одликују тиме што је у њима заробљена огромна густина термомеханичке енергије (енергија по јединици запремине) те, сходно томе, акумулирајућим оштећењем, што доводи до наставка процеса њихове фрагментације још дуго по њиховом удаљавању од места удара или експлозије. У лабораторијским условима практично је неизводљиво досезање потпуно неконтаминиране, стационарне расподеле фрагмената. Ултрабрзе камере дају нам само слику стања у одређеном временском тренутку док сакупљање и процесирање фрагмената по окончању лабораторијског експеримента (нпр., коришћењем вештачког снега) неизбежно води до одређене контаминације резултата практично из истог разлога. (У којој мери је процес фрагментације природно окончан а у којој „насилно” прекинут.) У случају метода рачунске механике прекидних средина, неограничена величина виртуелне лабораторије резултира приближавању стационарној расподели фрагмената ограниченом искључиво стрпљењем истраживача и рачунарским могућностима. Сходно томе, можемо без устезања употребљавати израз „стационарна расподела фрагмената”.

Језгровит приказ, превасходно дводимензионалних, дискретних модела оштећења, лома и фрагментације дат у овој монографији представља избор тема и научних доприноса — што је могуће репрезентативнији али ипак некомплетан — мотивисан жељом да се систематски изложе *основни* принципи, илуструје наведена разноврсност истраживачких области и истакну кључни и репрезентативи радови. Упркос напора уложених да овај сажетак буде што свеобухватнији и објективнији, његов садржај нужно трпи због уобичајених недостатака сличних подухвата као што су ненамерна и неизбежна пристрасност аутора условљена како ограниченошћу његове информисаности, знања и истраживачких интересовања, тако и немогућношћу сажимања изобиља релевантног материјала у простор прихватљиве величине. Не може, дакле, бити пренаглашено да избор метода, а поготово резултата, у овом прегледу никако не може да претендује на репрезентативност. С тим у вези, како је већ истакнуто, многи истраживачи који су оставили дубок траг у доменима разних тема које су, често само овлаш, дотакнуте у овој монографији, нису поменути или нису добили простор који заслужују. Самим тим, репрезентативност садржаја је упитна и подложна критици, што је неизбежна последица горе наведених узрока. Али, као што је већ истакнуто у уводу, искрен покушај је начињен да се ови недостаци, у датим околностима, сведу на најмању могућу меру. Без обзира, могућности проширења садржаја и одговарајуће литературе чак и на одабране теме (а остале да и не помињемо) чине се готово неограничени. У циљу ублажавања ових недостатака, наведени су у литератури детаљни прегледи и драгоцене референце који нуде информативну мрежу за самосталан истраживачки рад заинтересованог читаоца који ће, на тај начин, имати могућности да сам дефинише простор развоја својих интересовања, предодређености и предрасуда.

Чини се упутним да се заврши поновном напоменом да иако су у протеклој фази развоја предметни физички модели оштећења и лома у доброј мери сматрани истраживачким алатом математичара, физичара и истраживача у области науке о материјалима, временом су све више пажње задобијали у широј

инжењерској заједници. Захваљујући свему наведеном, можда ће и овај скромни преглед бити од користи и као критички приручник за искусније истраживаче и као уводно штиво за почетнике у рачунској механици прекидних средина.

## Референце

- Alder, B.J., Wainwright, T.E., 1957, "Phase transition for a hardsphere system," *J. Chem. Phys.*, 27, 1208-1209.
- Allen, M.P., Tildesley, D.J., 1987, "Computer Simulation of Liquids," Oxford University Press Inc., New York.
- Alonso-Marroquín, F., Herrmann, H.J., 2005, "The incremental response of soils. An investigation using a discrete-element model," *J. Engng. Math.*, 52, 11–34.
- Alonso-Marroquín, F., Muhlhouse, H.B., Herrmann, H.J., 2008, "Micromechanical investigation of soil plasticity using a discrete model of polygonal particles," *Theoret. Appl. Mech.*, 35, 11–28.
- Araripe, L.E., Andrade, J.S. jr., Costa Filho, R.N., 2005, "Memory effects on the statistics of fragmentation," *Phys. Rev. E*, 71, 036119.
- Arslan, A., Ince, R., Karihaloo, B.L., 2002, "Improved Lattice Model for Concrete Fracture," *J. Eng. Mech.*, 128(1), 57-65.
- Ashby, M.F., Jones, D.R.H., 1996, "Engineering Materials 1: An Introduction to Their Properties and Applications," 2<sup>nd</sup> Edition, Butterworth & Heinemann, Oxford.
- Åström, J.A., 2006, "Statistical models of brittle fragmentation," *Adv. Phys.*, 55, 247-278.
- Åström, J.A., Holian, B.L., Timonen, J., 2000, "Universality in Fragmentation", *Phys. Rev. Lett.* 84 (14), 3061-3064.
- Åström, J.A., Linna, R.P., Timonen, J., Möller, P.F., and Oddershede, L., 2004a, "Exponential and power-law mass distributions in brittle fragmentation", *Phys. Rev. E* 70, 026104.
- Åström, J.A., Ouchterlony, F., Linna, R.P., Timonen, J., 2004b, "Universal dynamic fragmentation in d dimensions," *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 245506.
- B**aker, K.L., Warner, D.H., 2012, "Simulating dynamic fragmentation processes with particles and elements," *Eng. Fract. Mech.* 84: 96–110.
- Bartels, G., Unger, T., Kadau, D., Wolf, D.E., Kertesz, J., 2005, "The effect of contact torques on porosity of cohesive powders," *Granular Matter* 7, 139.
- Bažant, Z.P., 1984, "Size effect in blunt fracture: Concrete, rock, metal," *J. Engrg. Mech., ASCE*, 110 (4), 518–535.

- Bažant, Z.P., 2005, "Scaling of Structural Strength" Butterworth-Heinemann, 2<sup>nd</sup> ed., Oxford.
- Bažant, Z.P., Tabbara, M.R., Kazemi, M.T., Pyaudier-Cabot, G., 1990, "Random Particle Model for Fracture of Aggregate and Fiber Composites," *J. Eng. Mech.*, 116(8), 1686–1705.
- Bažant, Z.P., Oh, B.H., 1983, "Crack band theory for fracture of concrete," *Mater. Struct. (RILEM)*, 16(93), 155–177.
- Bažant, Z.P., Planas, J., 1998, "Fracture and Size Effect in Concrete and Other Quasibrittle Materials," CRC Press, Boca Raton.
- Bažant, Z.P., Jirásek, M., 2002, "Nonlocal integral formulation of plasticity and damage: survey of progress," *J. Engng. Mech., ASCE*, 128(11), 1119–1149.
- Behera, B., Kun, F., McNamara, S., and Herrmann, H.J., 2005, "Fragmentation of a circular disc by impact on a frictionless plate," *Journal of Physics: Condensed Matter* 17, S2439–S2456.
- Bicanic N., 2004, "Discrete Element Methods;" in *Encyclopedia of Computational Mechanics: Fundamentals* (eds. Stein et al.), 311-337, DOI: 10.1002/0470091355.ecm006
- Bierwisch, C., Kraft, T., Riedel, X., Moseler, M., 2009, "Three-dimensional discrete element models for the granular statics and dynamics of powders in cavity filling," *J. Mech. Phys. Solids*, 57(1), 10-31.
- Bolander Jr., J.E., Saito, S., 1998, "Fracture analyses using spring networks with random geometry," *Engng. Fract. Mech.*, 61, 569-591.
- Bolander, J.E., Sukumar, N., 2005, "Irregular lattice model for quasistatic crack propagation," *Phys. Rev. B*, 71, 094106.
- Bolander Jr., J.E., Hong, G.S., Yoshitake, K., 2000, "Structural Concrete Analysis Using Rigid-Body-Spring Networks," *Comput-Aided Civil Infrastruct. Engng.*, 15, 120-133.
- Bolander Jr., J.E., Choi, S., Duddukuri, S.R., 2008, "Fracture of fiber-reinforced cement composites: effects of fiber dispersion," *Int. J. Fract.*, 154, 73-86.
- Born M., von Karman T., 1912, "Über schwingungen in raumgittern," *Physik. Z.*, 13, 297-309.
- Born, M., Huang, K., 1956, "Dynamical Theory of Crystal Lattices." Clarendon Press, Oxford.
- Bourne, N.K., 2011, "Materials' Physics in Extremes: Akrology," *Metallurgical Mater Trans A*; 42A: 2975-2984.
- Buehler, M.J., Abraham, F.F., Gao, H., 2003, "Hyperelasticity governs dynamic fracture at a critical length scale," *Nature* 426: 141-146.
- Buehler, M.J., Gao, H., 2006, "Dynamic fracture instabilities due to local hyperelasticity at crack tip," *Nature* 439: 307-310.
- Callen, H.B., 1961, "Thermodynamics," John Wiley, New York.
- Campi, X., 1988, "Signals of a phase transition in nuclear multifragmentation," *Phys. Lett. B*, 208, 351-354.

- Carmona, H.A., Wittel, F.K., Kun, F., Herrmann, H.J., 2008, "Fragmentation processes in impact of spheres", *Phys. Rev. E* 77: 051302.
- Chandler, D., 1987, "Introduction to Modern Statistical Mechanics," Oxford University Press, New York.
- Cheng, Y.P., Nakata, Y., Bolton, M.D., 2003, "Discrete element simulation of crushable soil," *Geotechnique*, 53(7), 633–641.
- Ching, E.S.C., Yiu, Y.Y., Lo, K.F., 1999, "Energy dependence of mass distributions in fragmentation," *Physica A* 265, 119–128.
- Cleary, P.W., Sawley, M.L., 2002, "DEM modeling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge," *Appl. Math. Modelling J.*, 26, 89.
- Cundall, P.A., 1971, "A computer model for simulating progressive large scale movements in blocky rock systems," In: *Proceedings of the Symposium of International Society of Rock Mechanics*, vol. 1, Nancy: France; 1971. Paper No. II-8.
- Cundall, P.A., 1980, "UDEEC—a generalized distinct element program for modelling jointed rock." Report PCAR-1-80, Peter Cundall Associates, European Research Office, US Army Corps of Engineers.
- Cundall, P.A., 1988, "Formulation of a three-dimensional distinct element model—Part I: a scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. Geomech. Abstr.*, 25(3), 107–116.
- Cundall, P.A., 2011, "Lattice method for modeling brittle, jointed rock." In: "Continuum and distinct element numerical modeling in geomechanics," *Proc. 2<sup>nd</sup> Int. FLAC/DEM Symp.*, Melbourne, Australia, Feb. 14–16, 2011 (Eds. D. Sainsbury et al.), pp. 11–19, ISBN 978-0-9767577-2-6, Itasca International, Minneapolis.
- Cundall, P.A., Hart, R., 1992, "Numerical modeling of discontinua," *J. Eng. Comp.*, 9, 101–113.
- Cundall, P.A., Strack, O.D.L., 1979, "A discrete numerical model for granular assemblies," *Geotechnique*, 29(1), 47–65.
- Curtin, W.A., Scher, H., 1990, "Brittle fracture in disordered materials: A spring network model," *J. Mater. Res.*, 5(3), 535–553.
- Cusatis, G., Bažant, Z.P., Cedolin, L., 2003a, "Confinement-shear lattice model for concrete damage in tension and compression, I. Theory," *J. Eng. Mech.*, 129(12), 1439–1448.
- Cusatis, G., Bažant, Z.P., Cedolin, L., 2003b, "Confinement-shear lattice model for concrete damage in tension and compression, I. Computation and Validation," *J. Eng. Mech.*, 129(12), 1449–1458.
- Cusatis, G., Bažant, Z.P., Cedolin, L., 2006, "Confinement-shear lattice CSL model for fracture propagation in concrete," *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 195, 7154–7171.



**D'**Addetta, G.A., Kun, F., Ramm, E., Herrmann, H.J., 2001, "From solids to granulates - Discrete element simulations of fracture and fragmentation processes in geomaterials," P.A.Vermeer et al. (Eds.): LNP 568, pp. 231–258.

D'Addetta, G.A., Kun, F., Ramm, E., 2002, "On the application of a discrete model to the fracture process of cohesive granular materials," *Granular Matter* 4, 77–90.

Damjanac, B., Board, M., Lin, M., Kicker, D., Leem, J., 2007, "Mechanical degradation of emplacement drifts at Yucca Mountain: A modeling case study, part 2: Lithophysal rock," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 44, 368–399.

Davie, C.T., Bicanic, N., 2003, "Failure criteria for quasi-brittle materials in lattice-type models," *Communications Numerical Meth. Engng.*, 19, 703-713.

Daw, M.S., Baskes, M.I., 1984, "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals," *Phys. Rev. B*, 29, 6443-6462.

Day, A.R., Snyder, K.A., Garboczi, E.J., Thorpe, M.F., 1992, "The elastic moduli of a sheet containing circular holes," *J. Mech. Phys. Solids* 40 (5), 1031-1051.

Delenne, J.-Y., El Youssoufi, M.S., Cherblanc, F., Bénet, J.-C., 2004, "Mechanical behaviour and failure of cohesive granular materials," *Int. J. Numer. Analytical Meth. Geomech.*, 28, 1577–1594.

Diehl, A., Carmona, H.A., Araripe, L.E., Andrade, Jr J.S., Farias, G.A., 2000, "Scaling behavior in explosive fragmentation," *Phys. Rev. E* 62(4), 4742-4746.

Dintwa, E., van Zeebroeck, M., Tijsskens, E., Ramon, H., 2005, "Torsion of viscoelastic spheres in contact," *Granular Matter* 7(2–3), 169–179.

Djordjevic, N., Vignjevic, R., De Vuyst, T., Gemko, S., Campbell, J., Hughes, K., 2017, "Localization and Damage Induced Softening using Finite Element and Smooth Particle Hydrodynamic Methods," *J. Serbian Soc. Computat. Mech.*, 11 (2), 120-129.

Donzé, F.V., Richefeu, V., Magnier, S-A., 2008, "Advances in Discrete Element Method Applied to Soil, Rock and Concrete Mechanics," *Electr. J. Geotech. Engng.*, Bouquet 08, 1-44.

**E**lek, P., Jaramaz, S., 2009, "Fragment Mass Distribution of Naturally Fragmenting Warheads," *FME Transactions* 37 (3): 129-135.

Egami, T., 2011, "Atomic level stress," *Progress Mater. Sci.*, 56, 637–653.

Ercolessi, F., 1997, "A molecular dynamics primer," *Spring College in Computational Physics*, ICTP, Trieste, Italy.

Ercolessi, F., Parrinello, M., Tosatti, E., 1988, "Simulation of gold in the glue model," *Philosophical Magazine A*, 58(1), 213-226.

**F**ish, J., 2009, "Multiscale Methods—Bridging the Scales in Science and Engineering," Oxford University Press, Oxford.

Freddolino, P.L., Liu, F., Gruebele, M., Schulten, K., 2008, "Ten-microsecond molecular dynamics simulation of a fast folding WW domain," *Biophys J.* 94(10): L75–L77.

Fung, Y.C., 1977, "A First Course In Continuum Mechanics," Prentice Hall, Englewood Cliffs.

**G**ermann, T.C., Kadau, K., 2008, "Trillion-atom molecular dynamics becomes a reality," *Int. J. Mod. Phys., C*, 19, 1315, 2008.

Grady, D.E., 1982, "Local inertial effects in dynamic fragmentation," *J. Appl. Phys.* 53(1): 322–325.

Grady, D.E., 1988, "The spall strength of condensed matter," *J. Mech. Phys. Solids* 36(13): 353–384.

Grady, D.E., 2006, "Fragmentation of Rings Shells", Springer, Berlin.

Grady, D.E., Kipp, M.E., 1980, "Local inertial effects in dynamic fragmentation," *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.*, 17, 147–155.

Grady, D.E., Kipp, M.E., 1985, "Geometric statistics and dynamic fragmentation," *J. Appl. Phys.*, 58(3), 1210-1222.

Grady, D.E., Winfree N.A., 2001, "Impact fragmentation of high-velocity compact projectiles on thin plates: a physical and statistical characterization of fragment debris," *Int. J. Impact Eng.*, 26, 249–262.

Grah, M., Alzebdeh, K., Sheng, P.Y., Vaudin, M.D., Bowman, K.J., Ostoja-Starzewski, M., 1996. "Brittle intergranular failure in 2D microstructures: experiments and computer simulations," *Acta Mater.*, 44(10), 4003–4018.

Greenspan, D., 1989, "Supercomputer simulation of cracks and fractures by quasi-molecular dynamics," *J. Phys. Chem. Solids*, 50 (12), 1245–1249.

Greenspan, D., 1997, "Particle Modeling," Birkhäuser Publishing, Boston.

Gullet, P.M., Wagner, G., Slepoy, A., 2004, "Numerical Tools for Atomistic Simulations," SAND2003-8782, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA

**H**ansen, A., Roux, S., Herrmann, H.J., 1989, "Rupture of central-force lattices," *J. Phys. France*, 50, 733-744.

Haule, J.M., 1992, "Molecular Dynamics Simulations," John Wiley & Sons

He, A-M., Wang, P., Shao, J-L., 2015, "Molecular dynamics simulations of ejecta size distributions for shock-loaded Cu with a wedged surface groove," *Computat. Mater. Sci.*, 98, 271-277.

He, A-M., Wang, P., Shao, J-L., 2016, "Heterogeneous fragmentation of metallic liquid microsheet with high velocity gradient," *Chin. Phys. B*, 25 (1), 017102.

Herrmann, H.J., Hansen, A., Roux, S., 1989, "Fracture of disordered, elastic lattices in two dimensions," *Phys. Rev.*, 39, 637–648.

Herrmann, H.J., Roux, C. (Editors), 1990, "Statistical Models for Fracture in Disordered Media," North Holland, Amsterdam.

Hogue, C., 1998, "Shape representation and contact detection for discrete element simulations of arbitrary geometries," *Engng. Comput.*, 15, 374-390.

Holian, B.L., 1988, "Modeling shock-wave deformation via molecular dynamics," *Phys. Rev. A* 37 (7): 2562-2568.

Holian, B.L., Grady, D.E., 1988, "Fragmentation by Molecular Dynamics: The Microscopic "Big Bang." *Phys. Rev. Lett.* 60 (14), 1355-1358.

Holian, B.L., De Groot, A.J., Hoover W.G., Hoover C.G., 1990, "Time-reversible equilibrium and nonequilibrium isothermal-isobaric simulations with centered-difference Stoermer algorithms," *Phys. Rev. A*, 41, 4552-4553.

Holian, B.L., Voter, A.F., Wagner, N.J., Ravelo, R.J., Chen, S.P., Hoover, W.G., Hoover, C.G., Dontje, T.D., 1991, "Effects on pairwise versus many-body forces on high-stress plastic deformation," *Phys. Rev. A*, 43(6), 2655-2661.

Holian, B.L., Voter, A.F., Ravelo, R., 1995. "Thermostatted molecular dynamics: how to avoid the Tada demon hidden in Nose-Hoover dynamics," *Phys. Rev. E* 52, 2338-2347.

Holt, R.M., Kjølås, J., Larsen, I., Li, L., Gotusso Pillitteri, A., Sønstebø, E.F., 2005, "Comparison between controlled laboratory experiments and discrete particle simulations of the mechanical behaviour of rock," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 42, 985-995.

Hoover, W.G., 1985, "Canonical dynamics: Equilibrium phase space distributions," *Phys. Rev. A*, 31, 1695-1697.

Hoover, W.G., 1986, "Molecular Dynamics," Springer-Verlag, Berlin.

Hoover, W.G., 1991, "Computational Statistical Mechanics," North-Holland, Amsterdam.

Hopkins, M.M, 1992, "The Numerical Simulation of Systems of Multitudinous Polygonal Block", US Army Cold Regions Research and Engineering Laboratory, CR 99-22.

Hou, P., 2007, "Lattice model applied to the fracture of large strain composite," *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 47, 233-243.

Hrennikoff, A., 1941, "Solution of problems of elasticity by the framework method," *J. Appl. Mech.*, 8, A169-A175.

Ibrahimbegovic, A., Delaplace, A., 2003, "Microscale and mesoscale discrete models for dynamic fracture of structures built of brittle material," *Comput. Struct.*, 81, 1255-1265.

Ince, R., Arslan, A., Karihaloo, B.L., 2003, "Lattice modelling of size effect in concrete strength," *Eng. Fract. Mech.*, 70, 2307-2320.

Ingraffea, A.R., Wawrzynek, P.A., 2004, "Computational Fracture Mechanics: A Survey of the Field," European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECCOMAS 2004, Neittaanmäki et al. (eds).

Iturrioz, I., 2018, "Numerical DEM simulation of the evolution of damage and AE preceding failure of structural components," *Engng. Fract. Mech.*, <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2018.02.023>

Iturrioz, I., Fleck, L., Miguel, F., Riera, J.D., 2009, "Dynamic fracture analysis of concrete or rock plates by means of the Discrete Element Method," *Latin American J. Solids Struct*, 6, 229–245.

**J**agota, A., Bennison, S.J., 1994, "Spring-Network and Finite Element Models for Elasticity and Fracture." Proceedings of a workshop on Breakdown and non-linearity in soft condensed matter. K.K. Bardhan, B.K. Chakrabarti, A. Hansen (eds). Springer-Verlag Lecture Notes in Physics (Berlin, Heidelberg, New York) ISBN 3-540-58652-0.

Jensen, R.P., Bosscher, P.J., Plesha, M.E., Edil, T.B., 1999, "DEM Simulation of Granular Media—Structure Interface: Effects of Surface Roughness and Particle Shape," *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 23, 531-547.

Jensen, R.P., Plesha, M.E., Edil, T.B., Bosscher, P.J., Kahla, N.B., 2001, "DEM Simulation of Particle Damage in Granular Media – Structure Interfaces," *Int. J. Geomech.*, 1(1), 21–39.

Jing, L., 2003, "A review of techniques, advances and outstanding issues in numerical modelling for rock mechanics and rock engineering," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 40, 283–353.

Jing, L.; Stephansson, O., 2008, "Fundamentals of discrete element methods for rock engineering: Theory and applications," Elsevier, Amsterdam.

Jirásek, M., 2004, "Nonlocal Theories in Continuum Mechanics," *Acta Polytech.*, 44, 16-34.

Jirásek, M., Bažant, Z.P., 1995, "Microscopic fracture characteristics of random particle system," *Int. J. Fract.*, 69, 201-228.

Jou, D., Casas-Vazquez, J., 1992, "Possible experiment to check the reality of a nonequilibrium temperature," *Phys. Rev. A*, 45, 8371-8373.

**K**achanov, L.M., 1986, "Introduction to Continuum Damage Mechanics," Dordrecht, The Netherlands, Martinus Nijhoff Publishers.

Kadono, T., 1997. "Fragment Mass Distribution of Platelike Objects," *Phys. Rev. Lett.*, 78, 1444-1447.

Kale, S., Ostoja-Starzewski, M., 2015, „Lattice and Particle Modelling of Damage Phenomena;” in *Handbook of Damage Mechanics: Nano to Macro Scale for Materials and Structures*, Ed. Voyiadjis G., Springer Science+Business Media, New York (DOI 10.1007/978-1-4614-5589-9\_23, ISBN 978-1-4614-5588-2), 203-238.

Karihaloo, B.L., 1995, "Fracture Mechanics and Structural Concrete," Longman Scientific and Technical, New York.

- Karihaloo, B.L., 2004, "Discussion on "Lattice modelling of size effect in concrete strength" by Ince R, Arslan A, Karihaloo BL [Engineering Fracture Mechanics 2003;70:2307–20]," Eng. Fract. Mech., 71, 1629–1630.
- Karihaloo, B.L., Shao, P.F., Xiao, Q.Z., 2003, "Lattice modelling of the failure of particle composites," Eng. Fract. Mech., 70, 2385–2406.
- Kawai, T., 1978, "New discrete models and their application to seismic response analysis of structures," Nuclear Engng. Design, 48, 207-229.
- Khoei, A.R., Pourmatin, M.H., 2011, "A dynamic lattice model for heterogeneous materials," Comp. Meth. Civil Eng., 2, 1-20.
- Kim, H., Buttlar, W.G., 2009, "Discrete fracture modeling of asphalt concrete," Int. J. Solids Struct., 46, 2593–2604.
- Kitsutaka, Y., Uchida, Y., Mihashi, H., Kaneko, Y., Nakamura, S., Kurihara, N., 2001, "Draft on the JCI standard test method for determining tension softening properties of concrete". In: de Borst et al. (eds). Fracture mechanics of concrete structures, Swets & Zeitlinger, Lisse, 371–376.
- Kozicki, J., Tejchman, J., 2008, "Modelling of fracture process in concrete using a novel lattice model," Granular Mater, 10, 377–388.
- Krajcinovic, D., 1996, "Damage Mechanics," North-Holland, Amsterdam.
- Krajcinovic, D., Mastilovic, S., 1995, "Some fundamental issues of damage mechanics," Mech. Mater 21, 217-230.
- Krajcinovic, D., Vujosevic, M, 1998, "Strain Localization – Short to Long Correlation Length Transition," Int. J. Solids Struct., 35(31-32), 4147-4166.
- Krajcinovic D., Mastilovic, S., 1999, "Statistical models of brittle deformation: Part I: introduction," Int. J. Plast. 15, 401-426.
- Krajcinovic, D., Rinaldi, A., 2005a, "Thermodynamics and Statistical Physics of Damage Processes in Quasi-Ductile Solids," Mech. Mater 37, 299-315.
- Krajcinovic, D., Rinaldi, A., 2005b, "Statistical Damage Mechanics - 1. Theory," J. Appl. Mech., 72, 76-85.
- Kraft, O., Gruber, P.A., Monig, R., Weygand, D., 2010, "Plasticity in confined dimensions," Ann. Rev. Mater. Research 40, 293-317.
- Kruyt, N.P., Rothenburg, L., 1996, "A micro-mechanical definition of the strain tensor for two dimensional assemblies of particles," J. Appl. Mech., 63, 706-711.
- Kruyt, N.P., Rothenburg, L., 2001, "Statistics of the elastic behavior of granular materials," Int. J. Solids Struct., 38, 4879-4899.
- Kumar, K.L., Ghosh, D.H., 2015, "Simulating dynamic fragmentation processes with particles and elements," Comput. Mater. Sci., 98, 117-122.

Kun, F., Herrmann, H., 1996, "A study of fragmentation processes using a discrete element method," *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 138, 3-18.

Kun, F., Herrmann, H.J., 1999, "Transition from damage to fragmentation in collision of solids," *Physical Review E* 59 (3), 2623-2632.

Kun, F., Herrmann, H.J., 2000, "Damage development under gradual loading of composites," *J. Mater. Sci.* 35(18), 4685-4693.

Kun, F., D'Addetta, G.A., Herrmann, H., Ramm, E., 1999, "Two-dimensional dynamic simulation of fracture and fragmentation of solids," *Comput. Assisted Mech. Engng. Sci.*, 6, 385-402.

**L**andau, L.D, Lifshitz, E.M., 1970, "Theory of Elasticity." Pergamon Press, Oxford.

Landis, E.N., Shah, S.P., 1995, "The influence of microcracking on the mechanical behavior of cement based materials," *Adv. Cement Based Mater.*, 2, 105-118.

Landis, E.N., Bolander, J.E., 2009, "Explicit representation of physical processes in concrete fracture" *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42, 214002.

Lauritsen, K.B., Puhl, H., Tillemans, H.J., 1994, "Performanse of Random Lattice Algorithms", *Int. J. Mod. Phys C* 5 (6), 909-922.

Lemaitre, J., 1985, "A Continuous Damage Mechanics Model for Ductile Fracture," *J. Engng. Mater. Technol.*, 107, 83-89.

Lennard-Jones, J.E., Devonshire, A.F., 1939, "Critical and co-operative phenomena," *Proc. Royal Soc. A*, 169(938), 317-333.

Levy, S., Molinari, J.F., 2010, "Dynamic fragmentation of ceramics, signature of defects and scaling of fragment sizes," *J. Mech. Phys. Solids*, 58, 12-26.

Levy, S., Molinari, J.F., Vicari, L., Davison, A.C., 2010, "Dynamic fragmentation of a ring: Predictable fragment mass distribution," *Phys. Rev. E*, 82, 066105.

Li, M., Johnson, W.L., 1992, "Fluctuations and thermodynamic response functions in a Lennard-Jones solid," *Phys. Rev. B*, 46 (9), 5237-5241.

Li, M., Johnson, W.L., 1993, "Ergodicity and convergence of fluctuations in Parrinello-Rahman molecular dynamics," *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 291, 285-290.

Li, Y., Xu, Y., Jiang, S., 2009, "DEM simulations and experiments of pebble flow with monosized spheres," *Powder Technology*, 193, 312-318.

Li, B., Pandolfi, A., Ravichandran, G., Ortiz, M., 2015, "Material-point erosion simulation of dynamic fragmentation of metals," *Mech. Mater.*, 80, 288-297.

Lilliu, G., van Mier, J.G.M., 2003, "3D lattice type fracture model for concrete," *Engng. Fract. Mech.*, 70, 927-941.

Lin, X., Ng, T.T., 1997, "A three-dimensional discrete element model using arrays of ellipsoids," *Geotechnique*, 47, 319-329.

Lineau, C.C., 1936, "Random fracture of a brittle solid," *J. Franklin Inst.* 221, 485–494, 674–686, 769–787.

Liu, J.X., Deng, S.C., Zhang, J., Liang, N.G., 2007, "Lattice type of fracture model for concrete", *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 48, 269–284.

Liu, J.X., Deng, S.C., Liang, N.G., 2008, "Comparison of the quasi-static method and the dynamic method for simulating fracture processes in concrete," *Comput. Mech.*, 41, 647–660.

Liu, J.X., Chen, Z.T., Li, K.C., 2010, "A 2-D lattice model for simulating the failure of paper," *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 54, 1–10.

Liu, W., He, A-M., Wang, P., 2018, "Effect of shock breakout pressure on material ejection from tin surface under unsupported shocks," *AIP Advances*, 8(9), 095023.

Luding, S., 2004, "Micro-macro models for anisotropic granular media." In: *Modelling of cohesive-frictional materials*, (Eds. Vermeer, P.A., Ehlers, W., Herrmann, H.J., Ramm, E.), Balkema, pp 195–206 (ISBN 04 1536 023 4).

Luding, S., 2008, "Cohesive, frictional powders: contact models for tension," *Granular Matter*, 10, 235–246.

Luding, S., Manetsberger, K., Muellers, J., 2005, "A discrete model for long time sintering," *J. Mech. Phys. Solids*, 53(2), 455-491.

**M**agnier, S.A., Donzé, F.V., 1998, "Numerical simulations of impacts using a discrete element method," *Mechanics of Cohesive-Frictional Materials*, 3, 257-276.

Marenic, E., Soric, J., Ibrahimbegovic, A., 2012, "Adaptive modelling in atomistic-to-continuum multiscale models," *J. Serbian Soc. Comput. Mech.*, 6(1), 169-198.

Mas Ivars, D., Pierce, M.E., Darcel, C., Reyes-Montes, J., Potyondy, D.O., Young, R.P., Cundall, P.A., 2011, "The synthetic rock mass approach for jointed rock mass modelling," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 48, 219–244.

Mastilovic, S., 2008a, "A Note on Short-Time Response of Two-Dimensional Lattices During Dynamic Loading," *Int. J. Damage Mech.*, 17, 357-361.

Mastilovic, S., 2008b, "Investigation of Dynamic Behavior of Brittle Solids by Discrete Systems." Union University, Belgrade.

Mastilovic, S., 2011a, "Some Observations Regarding Stochasticity of Dynamic Response of 2D Disordered Brittle Lattices," *Int. J. Damage Mech.*, 20, 267-277.

Mastilovic, S., 2011b, "Further Remarks on Stochastic Damage Evolution of Brittle Solids Under Dynamic Tensile Loading," *Int. J. Damage Mech.*, 20, 900-921.

Mastilovic S., 2013, "On strain-rate sensitivity and size effect of brittle solids: transition from cooperative phenomena to microcrack nucleation," *Contin. Mech. Thermodyn.*, 25: 489-501.

Mastilovic, S., 2015, "Impact fragmentation of nanoscale projectiles at ultrahigh striking velocities", *Meccanica* 50: 2353-2367.

- Mastilovic, S., 2016, "Molecular-dynamics simulations of the nanoscale Taylor test under extreme loading conditions," *Math. Mech. Solids*, 21(3), 326-338.
- Mastilovic, S., 2017, "Phenomenology of the Maximum Fragment Mass Dependence Upon Ballistic Impact Parameters", *Latin Amer. J. Solids Struct*, 14 (8), 1529-1546.
- Mastilovic, S., 2018, "Damage-fragmentation transition: Size effect and scaling behavior for impact fragmentation of slender projectiles," *Int. J. Damage Mech.*, 27(2), 201–217.
- Mastilovic, S., Krajcinovic, K., 1999a, "High-velocity expansion of a cavity within a brittle material," *J. Mech. Phys. Solids*, 36, 466-509.
- Mastilovic, S., Krajcinovic D., 1999b, "Penetration of Rigid Projectiles Through Quasi-Brittle material," *J. Appl. Mech.*, 66, 585-592.
- Mastilovic, S., Krajcinovic D., 1999c, "Statistical models of brittle deformation: Part II: computer simulations," *Int. J. Plast.* 15, 427-456.
- Mastilovic, S., Rinaldi, A., Krajcinovic, D., 2008, "Ordering effect of kinetic energy on dynamic deformation of brittle solids," *Mech. Mater.*, 40(4-5), 407-417.
- Mastilovic S., Rinaldi A., 2015. "Two-Dimensional Discrete Damage Models: Discrete Element Methods, Particle Models, and Fractal Theories"; in *Handbook of Damage Mechanics: Nano to Macro Scale for Materials and Structures*, Ed. Voyiadjis G., Springer Science+Business Media, New York (DOI 10.1007/978-1-4614-5589-9\_23, ISBN 978-1-4614-5588-2), 273-304.
- Masuya, H., Kajukawa, Y., Nakata, Y., 1994, "Application of the distinct element method to the analysis of concrete members under impact," *Nuclear Engrng. Design*, 6 (2), 283-294.
- Matsui, T., Waza, T., Kan.i, K, Suzuki, S., 1982, "Laboratory simulation of planetesimal collision," *J. Geophys. Res.*, 87, 10968.
- Maugis, D., 1999, "Contact, adhesion and rupture of elastic solids," *Solid-State Sciences*, Berlin.
- Mazars, J., Bažant, Z.P., 1989, "Cracking and Damage. Strain Localization and Size Effect," Elsevier Applied Science, London and New York.
- Meguro, K., Hakuno, M., 1989, "Fracture analyses of concrete structures by the modified distinct element method", *Structural Eng./Earthquake Eng.*, JSCE 6 (2): 283-294.
- Mesarovic, S.D., Padbidri, J., 2005, "Minimal Kinematic Boundary Conditions for Simulations of Disordered Microstructures," *Philosophical Magazine*, 85, 65-78.
- Meyers, M.A., 1994, "*Dynamic Behavior of Materials*", New York, John Wiley & Sons.
- Mishin, Y., Farkas, D., Mehl, M.J., Papaconstantopoulos, D.A., 1999, "Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and *ab initio* calculations," *Phys. Rev. B*, 59, 3393-3407.



Mishin, Y., Mehl, M.J., Papaconstantopoulos, D.A., Voter, A.F., Kress, J.D., 2001, "Structural stability and lattice defects in copper: *Ab initio*, tight binding, and embedded-atom calculations," *Phys. Rev. B* 63 (22) 224106.

Mishnaevsky Jr., L., 1998, "*Damage and Fracture of Heterogeneous Materials*," A.A. Balkema, Rotterdam, The Netherlands

Monaghan, J.J., 1988, "An introduction to SPH," *Comp. Phys. Comm.*, 48, 89-96.

Monette, L., Anderson, M.P., 1994, "Elastic and fracture properties of the two-dimensional triangular and square lattices," *Modelling Simul. Mater. Sci. Engng.*, 2, 53-66.

Moon, T., Nakagawa, M., Berger, J., 2007, "Measurement of fracture toughness using the distinct element method," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 44(3), 449-456.

Mott, N.F., 1947, "Fragmentation of shell cases," *Proc. Royal Soc.*, A189, 300-308.

Mott, N.F., Linfoot, E.H., 1943, "A theory of fragmentation," Ministry of Supply A.C. 3348, 207-215.

Moukarzel, C.F., Fernández-Sabido, S.F., Ruiz-Suárez, J.C., 2007, "Phase transition in liquid drop fragmentation," *Phys Rev E*, 75, 061127.

Munjiza, A., 2004, "The Combined Finite-Discrete Element Method," Wiley, New York

Myagkov, N.N., 2017, "Scaling Invariance of Spherical Projectile Fragmentation upon High-Velocity Impact on a Thin Continuous Shield," *J. Exp. Theor. Phys.*, 124 (1), 57-69.

Myagkov, N.N., Shumikhin T.A., 2005, "On projectile fragmentation at high-velocity perforation of a thin bumper," *Physica A*, 358, 423-436.

Myagkov, N.N., Stepanov, V.V., 2014, "Critical behavior and energy dependence of mass distributions in impact fragmentation," *Physica A*, 410, 120-130.

**N**emat-Nasser, S., Hori, M., 1993, "Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials," North-Holland, Amsterdam.

Newmark, N.M., 1959, "A method of computation for structural dynamics," *J. Engng. Mech.*, ASCE, 85, 67-94.

Nose, S., 2001, "An improved symplectic integrator for Nose-Poincare thermostat," *J. Phys. Soc. Japan*, 70, 75-77, 2001.

Nose, S., Klein, M.L., 1983, "Constant pressure molecular dynamics for molecular systems," *Molec. Phys.*, 50, 1055-1076.

**O**ddershede, L., Dimon, P., Bohr, J., 1993, "Self-Organized Criticality in Fragmenting" *Phys. Rev. Lett.*, 71, 3107-3110.

Ostojca-Starzewski, M., 2002, "Lattice models in micromechanics," *Appl. Mech. Rev.*, 55(1), 35-60.

Ostoja-Starzewski, M., 2007, "Microstructural randomness and scaling in mechanics of materials." Taylor & Francis Group, LLC, Boca Raton, FL, USA.

Ostoja-Starzewski, M., Wang, G., 2006, "Particle modeling of random crack patterns in epoxy plates," *Probabilistic Engng. Mech.*, 21, 267–275.

**P**aluszny, A., Tang, X.H., Zimmerman, R.W., 2014, "Fracture and impulse based finite-discrete element modeling of fragmentation," *Comput. Mech.* 52(5): 1071-1084.

Paluszny, A., Tang, X.H., Nejati, M., Zimmerman, R.W., 2016, "A direct fragmentation method with Weibull function distribution of sizes based on finite- and discrete element simulations," *Int. J. Solids Struct.*, 80, 38–51.

Pan, Z., Ma, R., Dalei, W., Chen, A., 2018, "A review of lattice type model in fracture mechanics: theory, applications, and perspectives," *Eng. Fract. Mech.*, 90, 382-409.

Parrinello, M., Rahman, A., 1981, "Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method," *J. Appl. Phys.*, 52, 7182-7190.

Plesha, M.E., Aifantis, E.C., 1983, "On the modeling of rocks with microstructure." *Proc. 24th U.S. Symp. Rock Mech.*, Texas A&M Univ., College Station, Texas, 27-39.

Plimpton, S., 1995, "Fast parallel algorithms for short-range molecular-dynamics," *J. Comp. Phys.*, 117(1), 1-19.

Potapov, A.V., Hopkins, M.A., Campbell, C.S., 1995, "A two-dimensional dynamic simulation of solid fracture. Part I: Description of the model," *Int. J. Modern Phys. C*, 6(3), 371–398.

Potapov, A.V., Campbell, C.S., 1996, "A three-dimensional simulation of brittle solid fracture," *Int. J. Modern Phys. C*, 7(5), 717–729.

Potapov, A.V., Campbell, C.S., 1997, "The two mechanisms of particle impact breakage and the velocity effect," *Powder Technology*, 93, 13–21.

Potyondy, D.O., 2007, "Simulating stress corrosion with a bonded-particle model for rock," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 44, 677–691.

Potyondy, D.O., 2014, "The bonded-particle model as a tool for rock mechanics research and application: current trends and future directions," *Geosystem Engng.*, 17 (6), 342–369.

Potyondy, D.O., Cundall, P.A., 2004, "A bonded-particle model for rock," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 41, 1329–1364.

Prado, E.P., van Mier, J.G.M., 2003, "Effect of particle structure on mode I fracture process in concrete," *Eng. Fract. Mech.*, 70, 1793–1807.

**Q**i, C., Wang, M., Qian, Q., 2009, "Strain rate effects on the strength and fragmentation size of rocks," *Int. J. Impact Eng.* 36, 1355-1364.

**R**adjai, F., Schäfer, J., Dippel, S., Wolf, D., 1997, "Collective friction of an array of particles: A crucial test for numerical algorithms," *J. Phys. I France* 7, 1053-1067.

Ramesh, K.T., Hogan, J.D., Kimberley, J., Stickle, A., 2015, "A review of mechanisms and models for dynamic failure, strength, and fragmentation," *Planetary Space Sci.* 107: 10-23.

Rapaport, D.C., 2004, "The Art of Molecular Dynamics Simulations," Cambridge University Press.

Redner, S., 1990, "Fragmentation"; in *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media* (Ed. H.J. Herrmann, S. Roux) North-Holland, The Netherlands (ISBN 0 444 88550 1), 321-348.

Reeves, W.R., Greenspan, D., 1982, "An analysis of stress wave propagation in slender bars using a discrete particle approach," *Appl. Math. Modelling*, 6, 185-201.

Reif, F., 1965, "Statistical Physics," McGraw-Hill, New York.

Riera, J.D., Miguel, L.F.F., Iturrioz, I., 2014, "Assessment of Brazilian tensile test by means of the truss-like Discrete Element Method (DEM) with imperfect mesh," *Eng. Struct.*, 81:10–21.

Rinaldi, A., 2009, "A Rational Model for 2D Disordered Lattices Under Uniaxial Loading," *Int. J. Damage Mech.*, 18, 233-257.

Rinaldi, A., Mastilovic, S., Krajcinovic, D., 2006, "Statistical Damage Mechanics – 2. Constitutive Relations," *J. Theor. Appl. Mech.*, 44 (3), 585-602.

Rinaldi, A., Lai, Y.-C., 2007, "Statistical damage theory of 2d lattices: energetics and physical foundations of damage parameter," *Int. J. Plast.*, 23, 1796–1825.

Rinaldi, A., Krajcinovic, D., Mastilovic, S., 2007, "Statistical damage mechanics and extreme value theory," *Int. J. Damage Mech.*, 16(1), 57–76.

Rinaldi, A., Mastilovic, S., 2014, "The Krajcinovic approach to model size dependent fracture in quasi-brittle solids," *Mech. Mater.*, 71, 21-33.

Rinaldi A., Mastilovic S., 2015, "Two-Dimensional Discrete Damage Models: Lattices and Rational Models"; in *Handbook of Damage Mechanics: Nano to Macro Scale for Materials and Structures*, Ed. Voyiadjis G., Springer Science+Business Media, New York (DOI 10.1007/978-1-4614-5589-9\_22, ISBN 978-1-4614-5588-2) 305-338.

Rodrigues, R.S., Birck, G., Iturrioz, I., 2016, "Damage index proposals applied to quasi-brittle materials simulated using the lattice discrete element method," *Int. J. Damage Mech.*, 25 (7), 1017–1039

Rothenburg, L., Bathurst, R.J., 1992, "Micromechanical features of granular assemblies with planar elliptical particles," *Geotechnique*, 42(1), 79–95.

Salot, C., Gotteland, P., Villard, P., 2009, "Influence of relative density on granular materials behavior: DEM simulations of triaxial tests," *Granular Matter*, 11(4), 221–236.

Sator, N., Hietala, H., 2010, "Damage in impact fragmentation," *Int. J. Fract.* 163:101–108.

Sator, N., Mechkov, S., Sausset, F., 2008, "Generic behaviours in impact fragmentation," *Eur. Phys. Lett.*, 81, 44002.

- Schlangen, E., van Mier, J.G.M., 1992a, "Simple lattice model for numerical simulation of fracture of concrete materials and structures," *Mater. Struct.*, 25, 534–542.
- Schlangen, E., van Mier, J.G.M., 1992b, "Experimental and numerical analysis of micro-mechanisms of fracture of cement-based composites," *Cem. Concr. Compos.*, 14, 105–118.
- Schlangen, E., Garboczi, E.J., 1996, "New method for simulating fracture using an elastically uniform random geometry lattice," *Int. J. Eng. Science*, 34, 1131–1144.
- Schlangen, E., Garboczi, E.J., 1997, "Fracture simulations of concrete using lattice models: computational aspects," *Engng. Fract. Mech.*, 57, 319–332.
- Schorn, H., Rode, U., 1987, "3-D modeling of process zone in concrete by numerical simulation." In: "Fracture of concrete and rock", Shah, S.P., Swartz, S.E. (eds.), Springer, New York.
- Schubert, W., Khanal, M., Tomas, J., 2005, "Impact crushing of particle–particle compounds—experiment and simulation", *Int. J. Miner. Process.* 75: 41– 52.
- Serrano, A.A., Rodriguez-Ortiz, J.M., 1973, "A contribution to the mechanics of heterogeneous granular media," *Proceedings of the Symposium on the Role of Plasticity in Soil Mechanics*, (ed. A.C. Palmer), Cambridge, U.K., 215-228.
- Shen, W-G, Tao Zhao, T., Crosta, G.B., Feng Dai, F., 2017, "Analysis of impact-induced rock fragmentation using a discrete element approach," *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 98, 33–38.
- Shiu, W, Donzé, F.V., Daudeville, L., 2008, "Compaction process in concrete during missile impact: a DEM analysis," *Computers and Concrete*, 5(4), 329-342.
- Spagnoli, A., 2009, „A micromechanical lattice model to describe the fracture behavior of engineered cementitious composites,” *Comput. Mater. Sci.*, 46, 7–14.
- Stauffer, D, Aharoni, A., 1992. "Introduction to Percolation Theory." Taylor & Francis, London.
- Stone, A.J., 1996, "The Theory of Intermolecular Forces," Clarendon Press, Oxford.
- Suiker, A.S.J., Fleck, N.A., 2004, "Frictional collapse of granular assemblies," *J. Appl. Mech.* 71, 350–358.
- T**avarez, F.A., Plesha, M.E., 2007, "Discrete element method for modelling solid and particulate materials", *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 70, 379–404.
- Taylor, G.E., 1948, "The use of flat-ended projectiles for determining dynamic yield stress I. Theoretical considerations", *Proceedings of the Royal Society of London A* 194 (1038): 289-299
- Taylor, H.F.W., 1997, "Cement Chemistry," 2nd edition, Thomas Telford Publishing, London.
- Tersoff, J., 1988, "New empirical approach for the structure and energy of covalent systems," *Phys. Rev. B*, 37, 6991-7000.
- Tetelman, A.S., McEvily Jr., A.J., 1967, "Fracture of Structural Materials," John Wiley & Sons, New York.

Thornton, C., Yin, K.K., Adams, M.J., 1996, "Numerical simulation of the impact fracture and fragmentation of agglomerates", *Journal of Physics D: Applied Physics* 29 (2): 424–435.

Tillemans, H.J., Herrman, H.J., 1995, "Simulating deformations of granular solids under shear," *Physica A* 217, 261–288.

Timár, G., Blömer, J., Kun, F. and Herrman, H.J., 2010, "Scaling laws for impact fragmentation of spherical solids," *Physical Review Letters*, 104, 095502.

Timár, G., Kun, F., Carmona, H.A. and Herrmann, H.J., 2012, "Scaling laws for impact fragmentation of spherical solids," *Physical Review E*, 86 (1), 016113.

Ting, J.M., 1992, "A robust algorithm for ellipse-based discrete element modelling of granular materials," *Computers and Geotechnics*, 13(3), 175–186.

Topin, V., Delenne, J.-Y., Radjaï, F., Brendel, L., Mabilbe, F., 2007, "Strength and failure of cemented granular matter," *Eur. Phys. J. E* 23, 413–429.

Tsubota, K., Wada, S., Yamaguchi, T., 2006, "Simulation Study on Effects of Hematocrit on Blood Flow Properties Using Particle Method," *J. Biomech. Sci. Engng*, 1(1), 159–170.

Tsubota, K., Wada, S., 2010, "Elastic force of red blood cell membrane during tank-treading motion: Consideration of the membrane's natural state," *International Journal of Mechanical Sciences*, 52, 356–364.

Tykhoniuk, R., Tomas, J., Luding, S., 2006, "Amicrostructure-based simulation environment on the basis of an interface enhanced particle Model," *Granular Matter* 8(3/4), 159–174.

Ugric, M., 2013, "Numerical Simulation of the Fragmentation Process of High Explosive Projectiles," *Scientific Tech. Rev.* 63(2), 47–57.

Van Baars, S., 1996, "Discrete element modelling of granular materials," *Heron*.

Van Mier, J.G.M., 1997, "Fracture Processes of Concrete," *CRC Press*, New York

Van Mier, J.G.M., 2004, "Lattice modelling of size effect in concrete strength by Ince R, Arslan A, Karihaloo BL [Engineering Fracture Mechanics 2003;70:2307–20]," *Eng. Fract. Mech.*, 71, 1625–1628.

Van Mier, J.G.M., 2007, "Multi-scale interaction potentials ( $F - r$ ) for describing fracture of brittle disordered materials like cement and concrete," *Int. J. Fract.*, 143, 41–78.

Van Mier, J.G.M., Nooru-Mohamed, M.B., 1990, "Geometrical and structural aspects of concrete fracture," *Eng. Fract. Mech.*, 35(4/5), 617–628.

Van Mier, J.G.M., van Vliet, M.R.A., Wang, T.K., 2002, "Fracture mechanisms in particle composites: statistical aspects in lattice type analysis," *Mech. Mater.*, 34, 705–724.

Verlet, L., 1967, "Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties on Lennard-Jones Molecules," *Phys. Rev.*, 159(1), 98–103.

Vermeer, P.A., Diebels, S., Ehlers, W., Herrmann, H.J., Luding, S., Ramm, E. (eds), 2001, "Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive Frictional Materials." Lecture Notes in Physics, vol. 568, Springer, Berlin.

Vidya Sagar, R., 2004, "Size effect in tensile fracture of concrete – a study based on lattice model applied to CT-specimen," Proc. 21th Int. Cong. Theor. Appl. Mech. ICTAM04, Warsaw, 1–3.

Vitek, V., 1996, "Pair potentials in atomistic computer simulations." In: Interatomic potentials for atomistic simulations, MRS Bulletin 21: 20-23.

Vitek, V., 2011, "Atomic level computer modelling of crystal defects with emphasis on dislocations: Past, present and future," Progress Mater. Sci., 56, 577–585.

Vogel, H.-J., Hoffmann, H., Leopold, A., Roth, K., 2005, "Studies of crack dynamics in clay soil II. A physically based model for crack formation," Geoderma 125, 213–223.

Voter, A.F., 1994, "Intermetallic Compounds," Wiley, New York.

**W**ang, G., Ostoja-Starzewski, M., 2005, "Particle modeling of dynamic fragmentation-I: theoretical considerations," Comput. Mater. Sci., 33, 429–442.

Wang, Y.C., Mora, P., 2008., "Macroscopic elastic properties of regular lattices," J. Mech. Phys. Solids, 56, 3459–3474.

Wang, Y.C., Abe, S., Latham, S., Mora, P., 2006., "Implementation of particle-scale rotation in the 3-D Lattice Solid Model," Pure Appl. Geophys. 163, 1769–1785.

Wang, G., Ostoja-Starzewski, M., Radziszewski, P., Ourriban, M., 2006, "Particle modeling of dynamic fragmentation—II: Fracture in single- and multi-phase materials," Comput. Mater. Sci., 35, 116–133.

Wang, G., Al-Ostaz, A., Cheng, A.H.-D., Mantena, P.R., 2009a, "Hybrid lattice particle modeling: Theoretical considerations for a 2D elastic spring network for dynamic fracture simulations," Comput. Mater. Sci., 44, 1126–1134.

Wang, T., Pan, T.-W., Xing, Z.W., Glowinski, R., 2009b, "Numerical simulation of rheology of red blood cell rouleaux in microchannels," Phys. Rev. E, 79, 041916.

Wang, G., Cheng, A.H.-D., Ostoja-Starzewski, M., Al-Ostaz, A., Radziszewski, P., 2010, "Hybrid Lattice Particle Modelling Approach for Polymeric Materials Subject to High Strain Rate Loads," Polymers, 2, 3-30.

Wannier, G.H., 1987, "Statistical Physics," Dover, New York.

Watson, E., Steinhauser, .M.O., 2017, "Discrete Particle Method for Simulating Hypervelocity Impact Phenomena," Materials, 10, 379; doi:10.3390/ma10040379.

Wellman, C., Lillie, C., Wriggers, P., 2008, "Homogenization of granular material modeled by a three-dimensional discrete element method," Computers and Geotechnics, 35, 394–405.

Wittel, F.K., Carmona, H.A., Kun, F., Herrmann, H.J., 2008, "Mechanisms in impact fragmentation", *Int. J. Fract.*, 154:105–117.

Wu, Y., Magallanes M., Crawford, J.E., 2014a, "Fragmentation and debris evolution modeled by a point-wise coupled reproducing kernel/finite element formulation," *Int. J. Damage Mech.* 23(7), 1005–1034.

Wu, Y., Wang, D., Wu, C-T., 2014b, "Three dimensional fragmentation simulation of concrete structures with a nodally regularized meshfree method," *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 72, 89–99.

Xiang, J., Munjiza, A., Latham, J.-P., Guises, R., 2009, "On the validation of DEM and FEM/DEM models in 2D and 3D," *Engng. Comput.*, 26(6), 673-687.

Yang, S.C., Hsiau, S.S., 2011, "The simulation of powders with liquid bridges in a 2D vibrated bed," *Chem. Engng. Sci.*, 56, 6837–6849.

Yang, D., Ye, J., Tan, Y., Sheng, Y., 2011a, "Modeling progressive delamination of laminated composites by discrete element method," *Comput. Mater. Sci.*, 50, 858–864

Yang, D., Sheng, Y., Ye, J., Tan, Y., 2011b, "Dynamic simulation of crack initiation and propagation in cross-ply laminates by DEM," *Composites Sci. Tech.*, 71, 1410–1418.

Yip, S. (Ed.), 2005, "Handbook of Materials Modelling," Springer, Berlin.

Yip, M., Li, Z., Liao, B-S., Bolander, J.E., 2006, "Irregular lattice models of fracture of multiphase particulate materials," *Int. J. Fract.*, 140, 113-124.

Zallen, R., 1983, "The Physics of Amorphous Solids," Wiley, New York.

Zhang, R., Li, J., 2006, "Simulation on mechanical behavior of cohesive soil by Distinct Element Method," *J. Terramech.*, 43, 303–316.

Zhang, H., Ravi-Chandar, K., 2009, "Dynamic fragmentation of ductile materials," *J. Physics D: Appl. Phys.*, 42(21), 214010.

Zhou, F., Molinari, J-F., Ramesh, K.T., 2006, "Characteristic fragment size distributions in dynamic fragmentation," *Appl. Phys. Lett.* 88, 261918.

Zubelewicz, A., Bažant, Z.P., 1987, "Interface element modeling of fracture in aggregate composites," *J. Eng. Mech.*, 113(11), 1619–1630.

Zubelewicz, A., Mroz, Z., 1983, "Numerical simulation of rockburst processes treated as problems of dynamic instability." *Rock Mech. Engrg.*, 16, 253-274.

# Регистар

Напомена: У регистру нису наведена имена аутора чија су дела смо цитирана без поименичног помињања у самој дискусији. Такође, на српском језику су наведена само презимена аутора (онако како се појављују у самом тексту ове монографије) док су на енглеском језику наведени и иницијали имена (онако како су дати у изворним референцама). Приликом приказа радова посебно истакнутих у овом прегледу, имена њихових аутора се наводе само на почетку где се, у дотичном приказу рада, појављују први пут.

*ab initio* молекуларна динамика, 12, 17

агрегат, 89, 101, 103, 128

ланац, 101

алгоритам жабљег скока ("leap frog"), 15

алгоритам предвиђања-исправке ("predictor-corrector"), 16

Алдер (Alder, B.J.), 11

Ален (Allen, M.P.), 7

Алонсо-Марокин (Alonso-Marroquin, F.), 152

ансамбл (статистички), 11

канонски, 29, 38

микроканонски, 13

Арарипе (Araripe, L.E.), 243

## Б

Бажант (Bažant, Z.P.), 88, 89, 93, 123

балистичка једначина стања, 220

Батлер (Buttler, W.G.), 181

Бехара (Behara, B.), 73

Биманов алгоритам, 217

биоматеријали, 143, 161

Бићанић (Bicanic, N.), 6

Боландер (Bolander Jr., J.E.), 124, 132

Борн-Мејеров потенцијал, 19

бочна стешњеност, 168, 177, 224

Бразилски тест, 168

брзина

вибрациона, 29, 34, 77

еластичних таласа, подужних, 228

звука, 42, 55

зрнаца, релативна, 151, 159, 185

зрнаца, угаона, 167

контактна, 167

корелативног кретања, 29

просечна, 34

расподела, 29, 34, 77

раста прслине, 227

случајна, честице, 246

терминалне фрагментације, 68

термичке побуде, 44

угаона, 150

удара, 32, 55, 60, 139, 187, 201, 208, 241

удара, критична, 72

ударног таласа, 219

фазног прелаза оштећење-фрагментација, 61

центрифугална, 52

ширења, 228

брзина деформисања, 79, 139, 140, 232, 234, 236, 237, 239, 246, 250

брзина настанка прслина, 251

брзина оштећивања, 173, 213

брзина промене енергије оштећивања, 236

брзина протока, конвекциона, 160

брзина сушења, 99

брзина ширења, 44, 45, 227

## В

ван Мир (van Mier, J.G.M.), 88, 127, 129, 130, 136, 182

Ванг (Wang, Y.C.), 113, 162

везивна матрица, 101, 128, 130

везиво. *See* везивна матрица

Веинрајт (Wainwright, T.E.), 11

Вејбулова расподела, 63, 120, 128, 156, 200, 202, 210, 239

Верлејев алгоритам, 14, 59, 77, 154

коригованих брзина, 16

вибрирајуће грануларно постоље ("granular bed"), 158

виртуелни експеримент, 2, 40, 76, 164

вискозно пригушење, 152



**виткост**

- греда, гредног елемента, 117
- пројектила, 75
- узорка стене, 224

Војтова нотација, 9

Воронојев мозаик. *See* Воронојева тесалација

Воронојева тесалација, 124, 175, *See* Деланејева решетка, Деланејева мрежа

Вотсон (Watson, E.), 253

Вујошевић (Vujošević, M.), 223, 225

**Г**

Гарбоши (Garboczi, E. J.), 122

геоматеријали, 4, 143, 146, 223

Граx (Grah, M.), 110

Грејди (Grady, D.E.), viii, 43, 50, 51, 63, 65, 69, 78

Гринспен (Greenspan, D.), 7, 216, 221, 229, 230

густина Минковског, 100

**Д**

Дамјанац (Damjanac, B.), 56, 57, 58, 171, 174

двоосни тест, 110

Деборин број, 26

Деланејева мрежа, 124

Деланејева решетка. *See* Деланејева мрежа, Воронојева тесалација

Делаплас (Delaplace, A.), 134

Дил (Diehl, A.), 52, 243

дилатантност, 156, 164, 168

дислокација, 184, 236

Донзе (Donzé, F.V.), 6

други Њутнов закон, 10, 30, 38, 147

**Ђ**

Ђинг (Jing, L.), 143

**Е**

еволуција микромлаза, 77

енергија

- везивна, 192

- вибрациона, 50

- деформациона, 26, 82, 105, 116, 143, 163, 230, 246

- дисипација, 6, 64, 82, 123, 152

- експлозије, 49

- заробљена у фрагменту, 138

- кинетичка, 29, 37, 50, 69, 210, 240

- кохезивна, 17, 21, 22

- лома, 90, 93, 125, 161, 179, 234, 246

- оштећивања, 236

- површинска, 25, 46, 192

- потенцијална, 13, 17, 26, 59

- раскидања веза, 193, 196

- удара, 50, 65, 70, 141, 193, 202, 243, 244

- усађивања, 22

- Фермијева, 245

- формирања ваканција, 21

- фрагментације, 245

Ешби (Ashby, M.F.), 20

**З**

затечена неуређеност, 189

зрнца, 142, 144

**И**

Ибрахимбеговић (Ibrahimbegovic, A.), 134

Инграфеа (Ingraffea, A.R.), 7

**Ј**

Јанг (Yang, S.C.), 158

Јенсен (Jensen, R.P.), 155

Јирасек (Jirasek, M.), 92, 123

**К**

Каваи (Kawai, T.), 124

Кален (Callen, H.V.), 29

Кампи (Campi, X.), 56, 195, 197

Кандал (Cundall, P.A.), 142, 147, 154,

158, 161, 164, 168, 170, 172, 173, 183

Карихалу (Karihaloo, B.L.), 114, 129

Кармона (Carmona, H.A.), 204

Кармона (Carmona, H.A.), 198, 200

квази-дуктилни (квази-жилави)

- материјал. квази-крти материјал, *See* квази-крти материјал

квази-крти

- лом, 93

- материјал, 92, 93, 95, 136, 179

- понашање стена, 163

- структура, 93

квази-кртост, 92

квази-честица. *See* честица континуума

Кембел (Campbell, C.S.), 183, 187

Ким (Kim, H.), 181

кинетичка теорија гасова, 30

Кип (Kipp, M.E.), viii

клизање, 148, 150, 167, 186

- гредних елемената, 131

- зрна, 7

- модул, 200

- рад, 155

- трака, 223  
 коефицијент крутости, 95  
 комплементарна кумулативна густина вероватноће, 247, 248  
 контакти  
   голи, 101  
   глатки, 142  
   меки, 143  
   храпави, 142, 149  
 контактни алгоритми, 146  
 Крајчиновић (Крајчиновић, D.), 93, 102, 168, 223, 225, 226  
 Крафт (Kraft, O.), 73  
 критеријум чврстоће везе на кидање, 105  
 критичне вредности кидања везе, 105  
 критични фактор интензитета напона, 170  
 Кројт (Kruyt, N.P.), 154  
 крутост, 90, 101, 127  
   аксијална опруга, 108, 110  
   деградација, 101  
   ефективна, 101  
   знаца, 154  
   коефицијент, у правцу нормале, 146, 162  
   коефицијент, у правцу тангенте, 146, 153  
   коефицијент, угаони, 220  
   контактна, 148  
   контактна, коефицијенти, 145  
   на савијање, 119, 163  
   на смицање, 119  
   на увијање, 163  
   нормална, 82  
   параметар, 245  
   статистичка расподела, 221  
   тангенцијална, 82  
   угаона опруга, 106, 108, 144  
   честице, 149  
 Кузатис (Cusatis, G.), 82, 180  
 Кулонов закон трења, 148, 166, 189  
   гранична вредност, 153  
 Кун (Kun, F.), 50, 72, 188, 189, 191, 197, 205, 213
- Л**  
 Ленард-Джоунсов потенцијал, 18, 25, 44, 50, 52, 55, 58  
 Ли (Li, J.), 160
- Лилиу (Lilliu, G.), 130  
 Линфут (Linfoot, E.H.), viii  
 листа суседа, 16, 222  
 локализација, v, 1, 92, 97, 224  
 ломна жилавост, 169
- Љ**  
 Љу (Liu, J.X.), 114, 132, 134, 136
- М**  
 Максвел-Болцманова расподела, 29, 34, 77  
 Мас Иварс (Mas Ivars, D.), 173  
 Мاستиловић (Mastilovic, S.), 58, 102, 226, 237  
 Масуја (Masuya, H.), 154  
 материјали  
   аморфни, 11, 46, 186  
   анизотропни, 8  
   вишефазни, 124, 233  
   грануларни (зрнасти), 50  
   грануларни (зрнасти), 5, 92, 101, 138, 146, 175  
   грануларни (зрнасти), влажни, 157, 159  
   грануларни (зрнасти), растресити, 154  
   грануларни (зрнасти), суви, 149, 159  
   дуктилни (жилави), 22, 59, 60, 69, 190, 223  
   изотропни, 27, 107, 153, 176  
   керамички, 19  
   композитни, 104, 127, 131  
   кохезивни, 145, 151, 161, 175  
   крти, 49, 134, 164, 176, 197, 226  
   некохезивни (растресити, непријањајући), 6, 145, 147  
   пластични, 204  
   поликристални, 111  
   полимерни, 198, 234  
   полупроводнички, 21, 23  
   хетерогени, 6, 89, 155, 166, 171, 204, 209, 230  
 међуповрш ("interface"), 102, 104, 120, 124, 129, 131, 180  
 микрограф, 110, 181  
 микроциркулација, 112  
 Мишњаевски (Mishnaevsky Jr., L.), 237  
 Мјагков (Myagkov, N.N.), 55, 58, 64  
 модел стешњено-смичуће гредне решетке, 128

Молинари (Molinari, J.-F.), 249  
 Мора (Mora, P.), 162  
 море електрона, 21  
 Мори-Танака модел, 101  
 Мор-Кулонов критеријум, 82, 147, 159, 184  
 Морсов потенцијал, 19, 23  
 Мот (Mott, N.F.), viii, 202  
 Муњица (Munjica, A.), 152

**Н**  
 најближи суседи, 12, 22, 59, 84, 226, 245  
 други, 59, 222  
 први, 16, 59, 219, 222, 233  
 неуређеност, 189, 201, 203, 204, 217, 220, 235, 239  
 геометријска, 2, 94, 95, 122, 220, 235  
 затечена, 189, 221, 224, 241  
 индукована, 221, 236  
 структурна, 2, 220, 235  
 тополошка, 2, 220

Нозе-Хуверов термостат, 38  
 Нуру-Мухамедов тест, 136, 137

**Њ**  
 Њумаркова бета техника, 136

**О**  
 Одершеде (Oddershede, L.), 50, 52, 242  
 омекшавање, 91, 168  
 везивне матрице, 130  
 елемената решетке, инкрементално, 125  
 међуповрши, 130  
 параметри, 89  
 праг, 131  
 режим ("softening"), 89, 93, 98, 102, 131, 133, 135, 137, 168, 176, 225, 236  
 тангенцијални модул, 90

опруга  
 константа (крутости), 83, 84, 99, 106, 107, 125  
 мрежа, 4, 81, 114, 216

осредњавање, 2, 11, 95  
 временско, 28  
 запремина, 27, 31  
 површина, 30, 31, 32, 68, 69  
 подручје, 30, 32  
 простор, 29, 30  
 прстенаста област, 228  
 резултата, 201, 240, 241, 248

Остоја-Старжевски (Ostoja-Starzewski, M.), 5, 82, 106, 114, 223, 229  
 Острем (Åström, J.A.), 49, 138  
 очвршћавање, 168, 179  
 доминантни механизам, 236  
 режим ("hardening"), 93, 96, 236  
 оштећење, 26, 88  
 агрегата, 103  
 акумулација, 93, 101, 127, 139  
 брзина, 212, 227  
 еволуција, 93, 95, 103, 104, 164, 195, 211, 236  
 изазване појаве, 164, 168  
 клин, 172  
 коначно (завршно), 244  
 локализација, 92, 93, 223, 225  
 образац, 100, 102, 121, 225, 227, 228, 232, 239  
 перколација, 111, 128  
 скаларни параметар, 74, 95, 97, 103, 168, 244, 245  
 текстура, 176  
 трака, 226

**П**

Паринело (Parrinello, M.), 12, 37  
 пар-потенцијал, 13, 18, 21  
 Паулијев принцип искључења, 21  
 периодични гранични услови, 35, 36  
 Плеша (Plesha, M.E.), 153, 176  
 Поасонов процес, 49, 78, 203, 247  
 порозност, 101, 148, 157, 183, 221  
 нумеричка, 148  
 очврслог цемента, 180  
 хидрата, 180

Потапов (Potapov, A.V.), 183, 187  
 потенцијал усађеног атома ("embedded atom potential"), 21, 23, 77  
 потенцијална јама  
 дубина, 18, 20, 22, 222  
 ширина, 19, 20

Потјонди (Potyondy, D.O.), 154, 158, 164, 168, 170, 172, 173

Прадо (Prado, E.P.), 136  
 преклапања  
 зрнаца, додирна, 184  
 преклапања честица, 127  
 преклапање  
 зрнаца, додирно, 148, 199  
 зрнаца, делимично, 143  
 преклоп, 166

- електронских облака атома, 23  
у меким контактима, 155
- прслина**  
азимутална, 203  
брзина раста, 227  
гранање, 121, 251, 252  
густина микропрслина, 97  
доминантна, 95, 101, 102, 131, 133, 139, 238  
дуж међуповрши, 104, 183  
еволуција, 253  
завојитост, 121  
зацељивање, 226  
зачеће, *v*, 43, 100, 125, 201, 205, 251  
макро-, 93  
мезо-, 136, 168, 203, 238  
меридијална, 201, 202  
микро-, 3, 89, 93, 95  
мрежа, 100  
некорелисане микропрслине, 225  
облак микропрслина, 236  
образац простирања, 100, 111, 122, 123, 128, 135, 163  
примарна, 187, 201  
просторна расподела микропрслина, 98  
радијална, 227  
раст, *v*, 91, 92, 99, 125, 186, 234, 251  
секундарна, 102, 187, 203, 223  
срастање, *v*, 1, 43  
трака, 125, 225  
у агрегату, 103
- Пурматен (Pourmatin, M.H.), 136
- Р**  
Рамеш (Ramesh, K.T.), 249  
раскинуте везе, 103, 239  
расподела (типови)  
билинеарна, 63  
биномна, 78, 79  
Вејбулова, 63, 120, 128, 156, 200, 202, 210, 239  
експоненцијална, 45, 48, 50, 78, 79  
лог-нормална, 148, 210  
Максвел-Болцманова, 29, 34, 77  
нормална, 99, 120, 128  
униформна, 224  
расподела фрагмената, viii  
*k*-ти моменти, 72  
билинеарно-експоненцијална, 61
- величине, 138  
детерминистичка, 74  
еволуција, 77  
комплементарна кумулативна, 248  
кумулативна, 65, 141  
равнотежна. *See* стационарна  
стационарна, 50, 59, 77, 251, 258  
степен функција, 78, 192  
трансформација, 65, 79
- Реднер (Redner, S.), 65, 197
- резулција**  
виртуалног мерења, 2  
временска, 43  
модела, 169, 239  
просторна, 11, 169  
просторно-временска, 40, 257  
решетке, 123  
снимка, микрографа, 181
- репрезентативна величина елемента, 145
- Риналди (Rinaldi, A.), 93, 168  
Ротенбург (Rothenburg, L.), 154
- С**  
Саито (Saito, S.), 124, 132  
Сатор (Sator, N.), 57, 74, 210  
скаларни параметар оштећења, 211  
Степанов (Stepanov, V.V.), 57  
Стефансон (Stephansson, O.), 143  
Стормеров алгоритам, 15, 39, 52, 55, 154
- Сукумар (Sukumar, N.), 124
- Т**  
Таварез (Tavarez, F.A.), 153, 176
- талас, 27**  
експанзиони, 51  
еластични, 146, 226, 248  
затезања, 76, 189, 190  
интеракција са зарезом, 79  
компресиони, 32  
лома, 186  
одбијање, 76  
оштећења, 73  
притиска, 139, 189, 190  
расипање, 165  
слабљење, 189  
ударни, viii, 43, 63, 76, 191, 246
- Тејлоров балистички тест, 31, 33, 58, 63, 68, 71
- Тејлоров ред, 14, 16, 26, 27

терминална фрагментација, 74, 197  
 терминални фазни прелаз, 65  
 Терсофов потенцијал, 23  
 Тилдесли (Tildesley, D.J.), 7  
 Тимар (Timár, G.), 72, 73, 204, 206, 210  
 Топен (Topin, V.), 101  
 тренутна кинетичка температура, 29

**У**

уређујући ефекат, 235, 240

**Ф**

фазни прелаз оштећење–фрагментација,  
 74  
 Фамили-Вишчеково скалирање, 93, 95,  
 97  
 Фогел (Vogel, H.-J.), 99  
 функција густине вероватноће, 34, 149,  
 247

**Х**

Харт (Hart, R.), 165  
 Хе (He, A.-M.), 76, 79  
 Херман (Hergmann, H.J.), 50, 72, 152,  
 188, 189, 191, 197, 205, 213  
 Херцов контактни модел, 146  
 хибридне методе, vii, 216  
 хибридни потенцијал, 219, 220, 226, 234  
 хибридни решеткасто-честични модел,  
 223, 233  
 Хиетала (Hietala, H.), 74, 210  
 хистограм, 61, 193  
 маса фрагмената, 190  
 Хоеи (Khoei, A.R.), 136  
 Холиан (Holian, B.L.), ix, 22, 24, 43, 50,  
 51, 63, 65  
 хомогенизација, 145  
 Хоу (Hou, P.), 105  
 Хреников (Hrennikoff, A.), 5, 81  
 Хсиау (Hsiau, S.S.), 158  
 Хувер (Hoover, W.G.), 38

**Ц**

Цанг (Zhang, R.), 160  
 циркулација крви, 112  
 Цубота (Tsubota, K.), 112

**Ч**

чврстоћа

везе на кидање, 105  
 деградација, 103, 172  
 динамичка, 237  
 затезна, 20, 91, 101, 128, 131, 168,  
 169, 170, 176, 224, 230

затезна међуповрши, 121  
 инфериорна, 90, 111  
 једноосна, 169  
 квази-кртих структура, 93  
 компонената тензора, 8  
 кохезивна, 6  
 међуповрши агрегат-везивна  
 матрица, 102, 128  
 пријањања (адхезије) честице и  
 везива, 104  
 притисна, 89, 172, 201  
 радијална, 227  
 резерва, 250  
 смицајна, 155, 159, 167  
 статистичка расподела, 128, 156, 221  
 тангенцијална, 227  
 теоријска затезна, 103, 235

Ченг (Cheng, Y.P.), 156

честица континуума, 6, 217

Чинг (Ching, E.S.C.), 46, 52, 53, 57, 210

**Џ**

Џоу (Zhou, F.), 249

Џоунс (Jones, D.R.H.), 20

**Ш**

Шен (Shen, W.-G.), 214

ширење

„облака крхотина”, 259

адијабатско, ix, 43, 44, 63, 65, 139

балистичко, 50

бочно, 168

брзина, 44, 227

деформација, 44

енергија, 46

кружни диск, 190

сферичне капљице, 46

цилиндричног отвора, 226

Шланген (Schlangen, E.), 88, 122, 123

Шредингер (Schrödinger, E.), 3, 10, 17,  
 40

Штајнхаузер (Steinhauser, M.O.), 253

Штрак (Strack, O.D.L.), 147, 183

Шумикин (Shumikhin T.A.), 55, 58, 64



**CIP - Каталогизација у публикацији  
Народна библиотека Србије, Београд**

539.42:519.87

МАСТИЛОВИЋ, Сретен, 1965-

Рачунска механика прекидних средина : основе и примена у фрагментацији / Сретен Мاستиловић. - Београд : Универзитет, Институт за мултидисциплинарна истраживања, 2019 (Београд : Мрак штампа). - XVI, 284 стр. : илустр. ; 25 cm

Тираж 200. - Напомене и библиографске референце уз текст. - Библиографија: стр. 261-278. - Регистар.

ISBN 978-86-80109-21-3

а) Механика лома -- Математички модели

COBISS.SR-ID 275934988

ISBN 978-86-80109-21-3