

VILNIAUS GEDIMINO TECHNIKOS UNIVERSITETAS

Raimondas JASEVIČIUS

ULTRASMULKIŲ DALELIŲ
NORMALINĖS SĄVEIKOS
SKAITINIS MODELIAVIMAS

DAKTARO DISERTACIJA

TECHNOLOGIJOS MOKSLAI,
MECHANIKOS INŽINERIJA (09T)



LEIDYKLA
Vilnius TECHNIKA 2010

Disertacija rengta 2006–2010 metais Vilniaus Gedimino technikos universitete.

Mokslinis vadovas

prof. habil. dr. Rimantas KAČIANAUSKAS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, technologijos mokslai, mechanikos inžinerija – 09T).

Konsultantas

dr. Darius MARKAUSKAS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, technologijos mokslai, mechanikos inžinerija – 09T).

VGTM leidyklos TECHNIKA 1843-M mokslo literatūros knyga
<http://leidykla.vgtu.lt>

ISBN 978-9955-28-761-2

© Jasevičius, R., 2010

© Vilniaus Gedimino technikos universitetas, 2010

Raimondas.Jasevicius@vgtu.lt

VILNIUS GEDIMINAS TECHNICAL UNIVERSITY

Raimondas JASEVIČIUS

THE NUMERICAL MODELLING OF NORMAL INTERACTION OF ULTRAFINE PARTICLES

DOCTORAL DISSERTATION

TECHNOLOGICAL SCIENCES,
MECHANICAL ENGINEERING (09T)



LEIDYKLA
Vilnius TECHNIKA 2010

Doctoral dissertation was prepared at Vilnius Gediminas Technical University in 2006–2010.

Scientific Supervisor

Prof Dr Habil Rimantas KAČIANAUSKAS (Vilnius Gediminas Technical University, Technological Sciences, Mechanical Engineering – 09T).

Consultant

Dr Darius MARKAUSKAS (Vilnius Gediminas Technical University, Technological Sciences, Mechanical Engineering – 09T).

Reziumė

Disertacijoje, taikant diskrečiųjų elementų metodą, nagrinėjami modernių miltelinių technologijų objektą – ultrasmulkia dalelę (skersmuo $0,1 \mu\text{m} \leq d \leq 10 \mu\text{m}$) – aprašantys teoriniai modeliai bei energijos sklaidos mechanizmai. Remiantis esamais modeliais bei eksperimentais, darbe aprašyti netiesiniai energijos sklaidos mechanizmai, sukurtas ultrasmulkios dalelės sąveikos modelis. Taip pat sudarytos sferinės dalelės judėjimą aprašančios jėgų lygtys, įvertinančios kombinuotą adhezinę tamprią arba tampriai plastinę sąveikas. Sukurtas modelis įvertina dalelės atšokimą ir sulipimą, aprašo bei apibūdina jos sąveikos dinamiką ir nurodo sąveikos proceso dėsningumus.

Pagrindinis tyrimo objektas – adhezinių savybių turinčios ultrasmulkios dalelės normalinės sąveikos teorinis modelis. Pagrindinis disertacijos tikslas – suformuluoti ir skaitiškai ištirti ultrasmulkių adhezinių dalelių sąveiką. Sukurtų sąveikos modelių pagrindu atliktas normalinės sąveikos skaitinis eksperimentas, sutelkiant dėmesį į energijos sklaidos mechanizmus, jų įtaką vienos dalelės bei dalelių sistemos elgsenai. Normalinės sąveikos uždavinys – vienas iš sąveikos mechanizmų, o sąveikos tyrimas šioje technologijoje – vienas iš esminių uždavinių.

Disertaciją sudaro įvadas, penki skyriai, rezultatų apibendrinimas, naudotos literatūros ir autoriaus publikacijų disertacijos tema sąrašai. Įvadiniame skyriuje aptariama tiriamoji problema, darbo aktualumas, aprašomas tyrimų objektas, formuluojamas darbo tikslas bei uždaviniai, aprašoma tyrimų metodika, darbo mokslinis naujumas, praktinė rezultatų reikšmė ir ginamieji teiginiai. Įvado pabaigoje pristatomos disertacijos tema autoriaus paskelbtos publikacijos mokslo leidiniuose ir pranešimai konferencijose bei disertacijos struktūra. Pirmasis skyrius skirtas literatūros apžvalgai. Jame aptarti disertacijos tema atlikti mokslinių darbai. Skyriaus pabaigoje formuluojamos išvados ir disertacijos uždaviniai. Antrajame skyriuje pateikiami sudaryti teoriniai ultrasmulkios dalelės sąveikos modeliai. Taikant šiuos modelius, trečiajame ir ketvirtajame skyriuose aprašomas tamprios bei tampriai plastinės dalelės normalinės sąveikos skaitinis eksperimentas, taikant diskrečiųjų elementų metodą. Disertacijos tema paskelbti 7 straipsniai: trys – žurnaluose, įtrauktuose į Thomson ISI Web of Science sąrašą, keturi – konferencijų medžiagoje. Disertacijos tema perskaityti 7 pranešimai Lietuvos bei užsienio šalių konferencijose.

Abstract

Study of high-tech powder course – ultrafine particles ($0.1 \mu\text{m} \leq d \leq 10 \mu\text{m}$ diameter) of the adhesion and contact mechanics, and theoretical models describing the energy distribution mechanisms using discrete element method. Based on existing models and conducted experiments, improves the energy distribution, assessing the work of adhesion up nonlinear models, creating ultrafine particle interaction model. Awarded on the spherical particle movement equation describing the forces, including the combined adhesive elastic, elastic-plastic interactions. Drawn up on the rebound and adhesion models that describe and characterize the dynamics of interaction, process, and identifying patterns. The main objects of research are adhesive properties of normal matter ultrafine with theoretical models of interaction. The key aim is to formulate and investigate the numerical ultrafine particle adhesion interactions. Create a model of interaction based on an interaction of normal numerical experiment, focusing on the energy distribution mechanisms and their influence on particle size and particle system behaviour. Normality interaction task – one of the mechanisms of interaction and interoperability test this technology – one of the key challenges. There are few key rebounds and particle adhesion problem. Tasks include the movement of particles, interaction and balance laws. Address the problem of contact mechanics in order to provide models of marketing methods, algorithms, application areas. It consists of an introduction, five chapters, summary, references and publications, the author of the dissertation topic lists. Introductory chapter discusses the research problem, the relevance, describes a research approach on the aim and objectives, describes the research methodology, scientific novelty and the results of the practical significance of hypotheses. At the end of the Introduction presents the author's dissertation published in publications and conferences, reports and thesis structure. The first chapter of the review of literature. It carried the theme of the thesis research work. End of this chapter shall be formulated and revised the findings of the thesis problem. The second section provides a theoretical particle ultrasmulkios interaction models. The application of these models, the third and fourth sections describe elastic and elastic-plastic particles of normal interaction between numerical experiment using discrete element method. Dissertation for publication 7 – three articles set, included in the Thomson ISI Web of Science list and four – the conference materials. Dissertation topic was announced in 7 messages from Lithuania and other conferences.

Žymėjimai

Simboliai

a – atstumas tarp sąveikaujančių paviršių, nm

$a_{F=0}$ – minimalus sąveikos nuotolis, nm

a_{max} – maksimalus pagreitis, m/s²

C_H – Hamakerio konstanta, remiantis tarpatomine sąveika, J

$C_{H,sls}$ – Hamakerio konstanta, J

d – dalelės skersmuo, μm

E – tamprumo modulis, GPa

e – atsistatymo koeficientas, bedimensis dydis

F – jėga, nN

F_{diss} – jėga, įvertinanti energijos sklaidą, nN

$F_{diss,adh}$ – jėga, įvertinanti energijos sklaidą siejama su adhezija, nN
 $F_{diss,viscous}$ – jėga, įvertinanti energijos sklaidą siejama su klampiu slopinimu, nN
 F_{H0} – adhezijos jėga esant kietai sąveikai, neįvertinus deformavimo, nN
 F^N – normalinė jėga, nN
 g – laisvojo kritimo pagreitis, m/s²
 h – poslinkis, nm
 $\bar{h}$ – normalizuotas santykinis poslinkis, bedimensis dydis
 k_H – tamprios adhezinės sąveikos sklaidos koeficientas, bedimensis dydis
 m – masė, kg
 p – slėgis kontakto metu, MPa
 p_f – dalelės kontakto plastinis mikrotakumo įtempis (stiprumas), MPa
 p_{VDW} – Van der Valso traukos slėgis, MPa
 R – dalelės spindulys, μm
 r – santykinis pagrindo spindulys, bedimensis dydis
 r_c – kontakto spindulys, nm
 T – laiko periodas, ns
 t – laikas, ns
 z – atstumas tarp atomų, nm
 $W_{adh,work}$ – adhezijos darbas, J
 W_{diss} – energijos sklaida, J
 $W_{diss,adh}$ – energijos sklaida, siejama su adhezija, J
 $W_{diss,abs}$ – energijos absorbcija, J
 W_{tot} – mechaninis darbas, J
 $W_{kinetic}$ – kinetinė energija, J
 $W_{kinetic,0}$ – pradinė kinetinė energija, J
 x – pozicija, m
 α_d – slopinimo koeficientas, bedimensis dydis
 ζ – santykinis pagrindo tamprumo modulis, bedimensis dydis
 κ_A – tampriai plastinės sąveikos ploto koeficientas, bedimensis dydis
 κ_p – plastinis stūmos koeficientas, bedimensis dydis
 ν – Puasono koeficientas, bedimensis dydis
 ρ – tankis, kg/m³
 σ_Y – takumo įtempis, MPa

v, v_0 – dalelės greitis ir pradinis greitis, m/s

v_{cr} – kritinis sulipimo greitis, m/s

v_r – atšokusios dalelės greitis, m/s

Φ_T – sukibimo stiprumą apibūdinantis parametras, remiantis Tabor

Santrumpos

A – sąlyčio pabaigą atitinkantis taškas

AE – adhezinės tamprios dalelių sąveikos sprendinys, taikant sudarytą sąveikos modelį bei atkartojant žinomą fizinį eksperimentą (angl. Adhesive Elastic)

AEP – adhezinės tampriai plastinės dalelių sąveikos sprendinys, taikant sudarytą sąveikos modelį bei atkartojant žinomą fizinį eksperimentą (angl. Adhesive Elastic-Plastic)

cr – kritinis (sulipimo greitis)

D – dalelės, atšokusios į pradinę padėtį arba sąveikos pabaigą atitinkantis taškas

DMT – adhezinės tamprios sąveikos modelis. Autoriai Derjaguin, Muller ir Torporov

diss – sklaida

el – tamprus

EL – atsistatymo koeficiento riba, esant adheazinei tampriai sąveikai (angl. Elastic Limit)

ep, el-pl – tampriai plastinis

EPL – atsistatymo koeficiento riba, esant adheazinei tampriai plastinei sąveikai (angl. Elastic-Plastic Limit)

VEL – atsistatymo koeficiento riba, esant adheazinei klampiai tampriai sąveikai (angl. Viscoelastic Limit)

$F = 0$ – jėgų pusiausvyra

H – adhezija

Y – takumo ribą atitinkantis taškas

JKR – adhezinės tamprios sąveikos modelis. Autoriai Johnson, Kundall, Roberts

i, j – dalelė i, dalelė j

L – sąlyčio pradžia atitinkantis taškas

MD – adhezinės tamprios sąveikos modelis. Autoriai Maugis ir Dugdale

N – normalinis

pl – plastinis

S – pradinę dalelės padėtį arba sąveikos pradžią atitinkantis taškas

tot – suminis

U – maksimalų persiklojimą atitinkantis taškas

VdW – Van der Valsas

viscous – klampus

Turiny

IVADAS	1
Problemos formulavimas	1
Darbo aktualumas	2
Tyrimų objektas	3
Darbo tikslas	3
Darbo uždaviniai	3
Tyrimų metodika	3
Darbo mokslinis naujumas	3
Darbo rezultatų praktinė reikšmė	4
Ginamieji teiginiai	4
Darbo rezultatų aprobavimas	5
Disertacijos struktūra ir apimtis	5
1. SĄVEIKOS MECHANIKA IR SKAITINIS METODAS	7
1.1. Adhezinė mechanika	8
1.1.1. Dalelės sąveikos efektai	9
1.1.2. Adhezija. Van der Valso jėgos	10
1.1.3. Adhezinis tamprus kontaktas	12
1.1.4. Adhezinės tampriai plastinės sąveikos Tomas modelis	16

1.2. Energijos sklaida	17
1.2.1. Klampus slopinimas	17
1.2.2. Atsistatymo koeficientas	19
1.3. Diskrečių elementų metodologija	20
1.3.1. Judėjimo lygtys	21
1.3.2. Kontakto jėgos	22
1.3.3. Skaitinis integravimas	22
1.4. Pirmojo skyriaus išvados	23
2. TEORINIS SĄVEIKOS MODELIS	24
2.1. Pagrindinės sąvokos ir prielaidos	25
2.2. Dalelių adhezinė sąveika esant deformuojamam kontaktui	26
2.2.1. Adhezinė tampri sąveika	29
2.2.2. Adhezinė tampriai plastinė sąveika	31
2.3. Energijos sklaidos mechanizmų sudarymas	35
2.3.1. Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su adhezija	35
2.3.1.1. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adheazine tampria sąveika	40
2.3.1.2. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adheazine tampriai plastine sąveika	45
2.3.2. Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su klampiu slopinimu	46
2.3.2.1. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adheazine tampria sąveika	49
2.3.2.2. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adheazine tampriai plastine sąveika	51
2.4. Sulipimo procesą aprašantis modelis	53
2.4.1. Sulipimas esant adheazinei klampiai tampriai sąveikai	54
2.4.1.1. Klampa slopinimo mechanizmas, taikomas viso kontakto metu	55
2.4.1.2. Klampa slopinimo mechanizmas, taikomas pakartotinio apkrovimo metu	57
2.4.2. Sulipimas esant adheazinei klampiai tampriai plastinei sąveikai	58
2.4.2.1. Klampa slopinimo mechanizmas, taikomas viso kontakto metu	58
2.4.2.2. Klampus slopinimo mechanizmas, taikomas pakartotinio apkrovimo metu	60
2.5. Antrojo skyriaus išvados	61
3. TAMPRIOS DALELĖS SĄVEIKOS SKAITINIS TYRIMAS	63
3.1. Deformuojamo pagrindo modeliavimas sferine dalele	64
3.1.1. Modeliavimas milimetro skalės dydžio dalele	66
3.1.2. Modeliavimas mikrometro skalės dydžio dalele	70
3.2. Energijos sklaidos mechanizmų tyrimas	73
3.2.1. Energijos sklaida, siejama su adhezija	73
3.2.2. Energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu	78
3.2.3. Energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu ir adhezija	80
3.3. Trečiojo skyriaus išvados	82

4. TAMPRIAI PLASTINĖS DALELĖS SĄVEIKOS SKAITINIS TYRIMAS	83
4.1. Energijos sklaidos mechanizmų tyrimas.....	83
4.1.1. Energijos sklaida, siejama su adhezija	84
4.1.2. Energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu	89
4.1.3. Energijos sklaida, siejama su adhezija ir klampiu slopinimu.....	93
4.2. Skaitinio ir fizinio eksperimentų rezultatų palyginimas	96
4.3. Ketvirtąjo skyriaus išvados.....	98
5. DALELIŲ SISTEMOS SULIPIMO PROCESO SKAITINIS TYRIMAS	99
5.1. Dalelių sistemos modelis	99
5.2. Dalelių sistemos sulipimo tyrimas, esant tampriai sąveikai.....	101
5.3. Dalelių sistemos sulipimo tyrimas, esant tampriai plastinei sąveikai	106
5.4. Penktojo skyriaus išvados.....	112
BENDROSIOS IŠVADOS	113
PADĖKA	115
LITERATŪROS SĄRAŠAS.....	117
AUTORIAUS MOKSLINIŲ PUBLIKACIJŲ DISERTACIJOS TEMA SĄRAŠAS....	123

Contents

INTRODUCTIONS	1
The Investigated Problem	1
Importance of the Thesis	2
The Object of Research	3
The Goal of the Thesis	3
The Tasks of the Thesis	3
Research Methodology	3
Importance of Scientific Novelty	3
Practical Significance of Achieved Results	4
The Defended Statements	4
Approval of the Results	5
The Structure of the Research Paper	5
1. MECHANICS OF INTERACTION AND NUMERICAL METHOD	7
1.1. Mechanics of Adhesion	8
1.1.1. Effects of Particle Interaction	9
1.1.2. Adhesion. Van der Waals forces	10
1.1.3. Adhesive Elastic Contact	12
1.1.4. Tomas Model of Adhesive Elastic-Plastic Contact	16
1.2. Dissipation of Energy	17
1.2.1. Viscous Damping	17
1.2.2. Coefficient of Restitution	19

1.3. Methodology of Discrete Element.....	20
1.3.1. Equations of Movement	21
1.3.2. Contact Forces	22
1.3.3. Numerical Integration	22
1.4. Conclusions of First Chapter	23
2. THEORETICAL MODELS OF INTERACTION	24
2.1. General Notations and Assumptions	25
2.2. Particles Adhesive Interaction with Deformable Contact.....	26
2.2.1. Adhesive Elastic Interaction.....	29
2.2.2. Adhesive Elastic-Plastic Interaction.....	31
2.3. Development of Energy Dissipation Mechanisms	35
2.3.1. Energy Dissipation Mechanism, Related to Adhesion	35
2.3.1.1. Conjunction of Dissipation Mechanism with Adhesive Elastic Interaction.....	40
2.3.1.2. Conjunction of Dissipation Mechanism with Adhesive Elastic- Plastic Interaction	45
2.3.2. Energy Dissipation Mechanism, Related to Viscous Damping	46
2.3.2.1. Conjunction of Dissipation Mechanism with Adhesive Elastic Interaction.....	49
2.3.2.2. Conjunction of Dissipation Mechanism with Adhesive Elastic- Plastic Interaction	51
2.4. Model of the Process of Sticking.....	53
2.4.1. Sticking at Adhesive Viscous Elastic Interaction	54
2.4.1.1. Viscous Damping Mechanism Applied at the Full Contact Time ..	55
2.4.1.2. Viscous Damping Mechanism Applied at the Reloading Time.....	57
2.4.2. Sticking at Adhesive Viscous Elastic-Plastic Interaction	58
2.4.2.1. Viscous Damping Mechanism Applied at the Full Contact Time ..	58
2.4.2.2. Viscous Damping Mechanism Applied at the Reloading Time.....	60
2.5. Conclusions of Second Chapter.....	61
3. NUMERICAL INVESTIGATION OF ELASTIC PARTICLE INTERACTION	63
3.1. Modelling of Deformable Boundary by Spherical Particle	64
3.1.1. Modelling of Milimeter Scale Particle	66
3.1.2. Modelling of Micrometer Scale Particle.....	70
3.2. Investigation of Energy Dissipation Mechanisms	73
3.2.1. Investigation of Energy Dissipation Mechanism, Related with Adhesion ..	73
3.2.2. Investigation of Energy Dissipation Mechanism, Related with Viscous Damping	78
3.2.3. Investigation of Energy Dissipation Mechanism, Related with Adhesion and Viscous Damping.....	80
3.3. Conclusions of Third Chapter	82

4. NUMERICAL INVESTIGATION OF ELASTIC-PLASTIC PARTICLE INTERACTION	83
4.1. Investigation of Energy Dissipation Mechanisms.....	83
4.1.1. Use of Energy Dissipation, Related with Adhesion.....	84
4.1.2. Use of Energy Dissipation, Related with Viscous Damping.....	89
4.1.3. Use of Energy Dissipation, Related with Adhesion and Viscous Damping.....	93
4.2. Comparison of Numerical and Physical Experiment Results	96
4.3. Conclusion of Fourth Chapter.....	98
5. INVESTIGATION OF STICKING PROCESS OF PARTICLE SYSTEM.....	99
5.1. Model of Particle System.....	99
5.2. Investigation of Sticking of Particle System at Elastic Interaction	101
5.3. Investigation of Sticking of Particle System at Elastic-Plastic Interaction	106
5.4. Conclusion of Fifth Chapter	112
GERNERAL CONCLUSIONS	113
ACKNOWLEDGEMENT	115
REFERENCES	117
LIST OF THE AUTHOR SCIENTIFIC PUBLICATIONS ON THE TOPIC OF DISSERTATION.....	123

Įvadas

Problemos formulavimas

Disertacijoje tiriama ultrasmulkių sferinių dalelių (skersmuo $0,1 \leq d \leq 10 \mu\text{m}$) normalinė sąveika. Normalinės sąveikos tyrimas – viena iš aktualiausių dabartinėje mechanikos inžinerijoje nagrinėjamų sričių. Siekiant ištirti ir geriau suprasti deformuojamos ultrasmulkios dalelės kontakto mechaniką, darbe nagrinėjamas dinaminis kontakto mechanikos uždavinys, taikant diskrečiųjų elementų metodą (DEM). Remiantis vientiso kūno mechanika, mikromechanika bei molekuline sąveika, darbe kuriami teoriniai modeliai. Esminė tiriamoji problema yra ultrasmulkios dalelės sąveikos tyrimas ir skaitinis jo pritaikymas. Problema apima teorinio modelio sukūrimą bei sukurto modelio pritaikymą DEM, atliekant skaitinį eksperimentą.

Kontakto mechanika – mechanikos inžinerijos sritis, nagrinėjanti kietų kūnų sąveiką. Lyginant su klasikine mechanika, ultrasmulkių dalelių technologijos (UDT) mokslas yra naujas. Ultrasmulkios dalelės sąveika skiriasi nuo klasikinės mechanikos bei didelių kūnų sąveikos, kadangi yra nagrinėjamas ne tik dalelės atšokimas, bet ir adhezijos įtakojamas dalelių sulipimas. Todėl, atliekant tyrimą, didelis dėmesys skiriamas fizinei adhezijai, kuri vaidina itin svarbų vaidmenį ultrasmulkios dalelės sąveikoje.

Literatūros šaltiniuose nepastebėta ultrasmulkių dalelių sulipimo procesą aprašančių teorinės sąveikos modelių. Neaptikti ir energijos sklaidos mechanizmai, apibūdinantys fizinį eksperimentą. Energijos sklaida bei sulipimas taip pat aprašyti nepakankamai išsamiai. Tyrimo metu pastebėta, jog teorija, aprašanti ultrasmulkias tamptariai plastines daleles, nėra išbaigta bei realizuota skaitiniam modeliui dinamikoje tirti.

Vienas esminių darbe keliamų tikslų – praktiškai palyginti rezultatus ir ištirti kohezinių miltelių mechaninę elgseną, atsižvelgiant į adhezinę sąveiką.

Darbo aktualumas

Ultrasmulkios dalelės yra šiuolaikinės chemijos, farmacijos, maisto ir kitų pramonės šakų produktų sudėtinė dalis. Tiriant pramoninius technologinius procesus, neišvengiamai reikalingos teorinės žinios apie ultrasmulkių dalelių elgseną. Išsamus supratimas įmanomas tik atlikus įvairius tyrimus.

Pastaruoju metu milteliai, klasifikuojami kaip ultrasmulkios ($0,1 < d < 10 \mu\text{m}$) dalelės, imti plačiai naudoti pramoniniuose procesuose, todėl suprasti ultrasmulkių dalelių elgsenos fundamentalumą miltelių technologijoje yra labai svarbu.

Ultrasmulki dalelė yra itin maža, todėl su ja atlikti fizinį eksperimentą, kuris reikalauja specialios įrangos bei žinių, labai sunku. Tokiu atveju dažniausiai naudojamas skaitinis eksperimentas, kurį galima atlikti virtualiai. Skaitinio eksperimento metu yra tiriamos dinaminės ultrasmulkios dalelės savybės bei sprendžiamas dinaminis uždavinys.

Taikant skaitinius modelius bei dalelės judėjimą aprašančias jėgų lygtis, naudojami sąveikos modeliai, apimantys adhezinę, klampią, tamptariai bei tamptariai plastinę sąveiką.

Mikroskopinis adhezinės sąveikos modeliavimas – aktualus mechanikos mokslo uždavinys. Taikant sąveikos modelius, svarbu pritaikyti ir diskrečiųjų elementų metodą, kadangi, norint aprašyti dalelių elgseną, visų pirma reikia suvokti ir aprašyti dalelės modelį. Dalelės elgsenos skaitiniam modeliavimui siūlomi teoriniai modeliai leidžia tirti dalelės sąveiką su dalele ar tamptaria puserdve bei sąveikos dinamiką. Šie modeliai galėtų būti pritaikyti ir nano dydžio dalelėms modeliuoti.

Darbe atlikus skaitinius eksperimentus, daroma išvada, kad ultrasmulkios dalelės tyrimas galėtų būti itin aktualus sparčiai besivystantiems ultrasmulkių dalelių technologijos (UDT), nanotechnologijos (NT) bei kontakto mechanikos mokslams.

Procesuose, tokiuose kaip transportavimas, pakavimas, rūšiavimas ir kt. dalelės sąveikauja tarpusavyje ir gali formuoti aglomeratą. Dalelės sąveikos uždavinys išlieka aktualus visuose minėtuose procesuose.

Tyrimų objektas

Ultrasmulkių dalelių normalinės sąveikos teorinis modelis ir jo taikymas diskrečiųjų elementų metode.

Darbo tikslas

Suformuluoti ir skaitiškai ištirti ultrasmulkių sferinių dalelių normalinės sąveikos modelį.

Darbo uždaviniai

Darbo tikslui pasiekti darbe sprendžiami šie uždaviniai:

1. Suformuluoti ir aprašyti dalelių normalinės adhezinės tamprios bei tampriai plastinės sąveikos fizinius modelius.
2. Įvertinti normalinei adhezinei sąveikai būdingus energijos sklaidos mechanizmus.
3. Taikant sukurtą teorinį modelį, ištirti dalelės atšokimo ir sulipimo procesus bei sąlygas šiems procesams įvykti.
4. Sukurti programinę įrangą, skirtą ultrasmulkių dalelių normalinei sąveikai DEM tirti.

Tyrimų metodika

Darbe taikomi analiziniai ir skaitiniai metodai. Skaitiniai eksperimentai atlikti, taikant diskrečiųjų elementų metodą.

Darbo mokslinis naujumas

Rengiant disertaciją buvo gauti šie mechanikos inžinerijos mokslui nauji rezultatai:

1. Sudarytas ultrasmulkių sferinių dalelių normalinės sąveikos modelis, apimantis adhezinį tamprųjų bei tamptai plastinį kontaktą su šiai sąveikai būdingais energijos sklaidos mechanizmais.

2. Adhezijos mechanizmo, turinčio energijos sklaidos, susietos su poveikio istorija pobūdį, sukūrimas ir realizavimas DEM. Klampaus slopinimo mechanizmo, susieto su poveikio istorija, taikymas dalelės sulipimo procesui aprašyti bei realizavimas DEM.

3. Dalelių sulipimo ir atsokimo sąlygų ir procesų nustatymas, įvertinimas bei aprašymas.

4. Ultrasmulkios silicio dioksido dalelės smūgio į plokščią pagrindą žinomo fizinio eksperimento interpretavimas ir jos savybių apibūdinimas.

Darbo rezultatų praktinė reikšmė

Skaičiuojamojoje mechanikoje plėtojami modeliai ir programinė įranga leidžia skaitiškai tirti ultrasmulkių sferinių dalelių adhezinės sąveikos elgseną. Ultrasmulkios dalelės sąveikos modeliai ir jų tyrimas galėtų būti naudingi sparčiai besivystantiems ultrasmulkių dalelių technologijos bei kontakto mechanikos mokslams.

Ultrasmulkios dalelės yra chemijos, farmacijos, maisto ir kt. pramonės šakų produktų sudėtinė dalis. Teorinės žinios apie ultrasmulkių dalelių elgseną gali būti aktualios, tiriant ultrasmulkių dalelių apdorojimo ir perdirbimo technologinius procesus.

Ginamieji teiginiai

Remiantis atliktu ultrasmulkios dalelės normalinės sąveikos skaitiniu eksperimentu bei žinomu fiziniu eksperimentu, teigiama:

1. Sudarytas ultrasmulkių dalelių normalinės sąveikos modelis su šiai sąveikai būdingais energijos sklaidos mechanizmais. Sąveikos modelis įvertina adhezinę tamptą bei tamptai plastinę elgseną.

2. Paaiškintas atskirų energijos sklaidos mechanizmų vaidmuo ultrasmulkios dalelės sąveikos metu. Sąveika apima dalelės artėjimą, susidūrimą ir atsiskyrimą nuo pagrindo paviršiaus, esant įvairiems pradiniais greičiams.

3. Skaičiavimai parodė, kad fizinio eksperimento su SiO_2 dalelėmis rezultatai gali būti gaunami tik tada, kai dalelės deformuojasi plastiškai.

Darbo rezultatų apibavimas

Disertacijos tema perskaityti septyni pranešimai Lietuvos bei užsienio šalių konferencijose ir paskelbti septyni straipsniai.

Disertacijos struktūra ir apimtis

Darbą sudaro įvadas, 5 skyriai, išvados, literatūros bei autoriaus publikacijų sąrašai. Disertacijos apimtis – 124 puslapiai, 102 numeruotos formulės, 48 iliustracijos ir 2 lentelės. Pirmasis skyrius skirtas literatūros apžvalgai. Jame pateikti disertacijos tema atliktų mokslininkų darbai. Skyriaus pabaigoje formuluojamos išvados ir disertacijos uždaviniai. Antrajame skyriuje pateikiami sudaryti ultrasmulkios dalelės teoriniai sąveikos modeliai, kuriuos taikant trečiajame ir ketvirtajame skyriuose aprašomas tamprios bei tampoiai plastinės dalelės normalinės sąveikos skaitinis eksperimentas. Taikant diskrečiųjų elementų metodą, tiriami energijos sklaidos mechanizmai. Penktajame skyriuje tiriama dalelių sistemos normalinė sąveika.

Sąveikos mechanika ir skaitinis metodas

Skyriuje aptariami ultrasmulkios dalelės normalinės sąveikos modeliai, pagrindinis dėmesys sutelktas į adheziją. Taip pat aptarti esminiai energijos sklaidos mechanizmai, nurodyti pagrindiniai DEM metodologijos bruožai.

Pateikiama tyrimų, susijusių su dalelių normaline sąveika, apžvalga. Išsamiai aptarti sąveikos efektai, atskirai išnagrinėti šiai sąveikai būdingi energijos sklaidos mechanizmai. Pagrindinis dėmesys skirtas adhezijos įtakai. Pateikiami skaitinio diskrečiųjų elementų metodo pagrindai.

Literatūros apžvalga atskleidžia, kad daleles aprašantys modeliai yra skirti pavieniams efektams aprašyti. Nerasta darbų, sistemingai aprašančių ultrasmulkioms dalelėms būdingą standžios dalelės su minkštu kontaktu modelį, kuris apimtų teorines priklausomybes, skaitinį realizavimą ir tyrimus.

1.1. Adhezinė mechanika

Žinoma, jog gamtoje egzistuoja keturios fundamentalios sąveikos: silpnoji, stiprioji, gravitacinė ir elektromagnetinė (Israelashvili 1992). Viena iš jų – elektromagnetinė sąveika – veikia tarp atomų, molekulių ir dalelių. Elektromagnetinės jėgos yra visų tarp molekulinį sąveikų šaltinis. Jos nustato kūnų, skysčių ir dujų savybes, biologinių struktūrų formavimą, dalelių elgseną. Darbe remiamasi tarp molekulinėmis jėgomis, būdingomis ultrasmulkioms dalelėms. Molekulė suprantama kaip mažiausia savarankiškai egzistuojanti medžiagos dalelė, sudaryta iš įvairaus skaičiaus atomų.

Klasikinė mechanika apsiriboja stūmos jėgomis, tuo tarpu traukos jėgos nėra įvertinamos. Smulkioms dalelėms būdingas traukos poveikis laikomas pagrindine adhezijos priežastimi, sąlygota tarp molekulinį jėgų.

Adhezinė mechanika apima traukos ir stūmos jėgas. Adhezijos poveikį apibūdina Van der Valso jėgos, laikomos traukos jėgomis. Šios jėgos ultrasmulkiai dalelei yra dominuojančios ir apie šimtą kartų didesnės, nei gravitacijos jėga (Rumpf 1974; Shubert 1979). Vieni iš adhezijos mechanikos pradininkų, pateikę tamprų adhezinį modelį: Johnson, Kendall ir Roberts JKR modelis (Johnson *et al.* 1971); Derjaguin, Muller ir Toporov DMT modelis (Derjaguin *et al.* 1975); Maugis ir Dugdale MD modelis (Maugis 1992, 1996). Smulkių dalelių kontakto mechaniką, esant traukos poveikiui, analizavo: Krupp (1967), Johnson (1985), Israelashvili (1992), Kendall (2001). Darbe sudarytas modelis remiasi DMT modeliu. Šis modelis tinka ultrasmulkioms bei nano skalės dalelėms tirti (Tomas 2003; Hosokawa *et al.* 2007). Dalelės susidūrimo metu tamprias bangas tyrė ir vienas pirmųjų jas aprašė bei teorinį modelį sudarė Hunter (1957).

Dalelių sąveikoje svarbus vaidmuo tenka energijos sklaidos mechanizms. Šie mechanizmai gali būti siejami su adhezija, tamptariai plastiniu kontaktu, klampiu slopinimu bei bangomis. Išsamus modelis, aprašantis klampią tamptariai adhezinės dalelės elgseną, buvo tyrinėtas Brilliantov *et al.* (2007), Tsuji *et al.* (1992), Kuwabara ir Kono (1987). Sklaidos pobūdį turinčią, adhezinę tamptariai plastinę sąveiką nagrinėjo Thornton ir Ning (1998) bei Tomas (2001).

Tirti dalelių smūgi, veikiant traukos jėgoms, itin aktualu kontakto mechanikoje. Kohezinių, termiškai aktyvuotų nano dydžio klasterių susidūrimo modeliavimą tyrė Kuninaka ir Haykawa (2009). Vienos mikrometro dydžio adhezinės dalelės deformavimą sąveikos metu tyrė Briscoe *et al.* (1997). Mikrometro dydžio dalelės smūgį su miltelinio sluoksniu modeliavo Abd-Elhady (2006).

Adhezijos poveikis priklauso nuo dalelės šiurkštumo. Šiurkštumo įtaką tyrė (Forsyth ir Rhodes 2000; Rabinovich *et al.* 2000). Adhezijos poveikio priklausomybę nuo paviršiaus šiurkštumo, esant adhezinei tamptariai sąveikai, tyrė Fuller *et al.* (1975).

Su smulkiomis dalelėmis yra atlikti ir fiziniai eksperimentai. Tiriant smulkios dalelės elgseną sąveikos metu, taikomas atominės jėgos mikroskopas (AJM). AJM yra naudojamas matuojant jėgas tarp sferos ir plokštumos, kur sąveikos jėgos reikšmė apima nanoniutonų iki keleto mikroniutonų skalę. Taikant AJM, tiriamą smulkios dalelės adhezijos poveikį įvertinanti adhezijos jėga atitrūkimo metu: Jones (2003), Kaushik (2007). Naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą (SEM), adhezinės dalelės atsiskyrimo jėgą tyrė de Jesus *et al.* (2007). Originalus adhezijos eksperimentas, skirtas adhezijai matuoti dalelei atsiskyrus po smūgio, buvo aprašytas Ermis *et al.* (2009). Adhezijos poveikis priklauso nuo dalelės skersmens. Silicio sluoksnio suspaudimas, atliktas su atominės jėgos mikroskopu (AJM) pagal Kappl (Kappl ir Butt 2002) aprašytas Tykhoniuk *et al.* (2007). Jie parodė, jog tampriai plastinis dalelės kontaktas įvyksta pirmame apkrovimo-nukrovimo cikle, tyrė adhezijos jėgos priklausomybę nuo dalelės spindulio. Panašus apibūdinimas su pirmu ciklu buvo patvirtintas Imre *et al.* (2008), kai atsistatymo koeficiento e reikšmės pateiktu akmens pavyzdžiu niekada nepasiekdavo 1. Sąveiką tarp ultrasmulkių silicio dioksido sferų, kurių dydis kinta intervale $0,4 - 0,9 \mu\text{m}$, skenuojančiu elektroniniu mikroskopu (SEM) tyrė Wang *et al.* (2010).

Ultrasmulkios dalelės skersmuo svyruoja nuo $0,1$ iki $10 \mu\text{m}$. Už ją mažesnę dalelę laikoma nano skalės dalele. Tačiau yra autorių, kurie nano skalės dalelę $d < 0,1 \mu\text{m}$ laiko ultrasmulkia (Hosokawa *et al.* 2007; Moghini *et al.* 2005). Modeliuodami adhezijos jėgas, smulkios ($10 \mu\text{m}$ skersmens) silicio dalelės elastinę elgseną tyrė Zhou ir Peukert (2008).

Birios medžiagos modeliavimą atliko Thornton ir Yin (1991) bei Thornton ir Ning (1998). Adhezinės sąveikos modeliavimą, taikant molekulinę dinamiką, atliko Landman *et al.* (1992). Vieni iš autorių, tyrinėjusių normalinės dalelių sąveikos modelį, yra Pöschel ir Schwager (2004).

Darbe naudojamas mikromechaninis priartėjimas, kuris yra aprašytas Tomas (2001a,b, 2004, 2007a,b, 2008, 2009).

1.1.1. Dalelės sąveikos efektai

Tomas (2008) nurodė šiuos dalelės adheziją apibūdinančius sąveikos efektus:

I. Paviršiaus ir lauko jėgos:

1. Van der Valso jėgos (sausieji milteliai).
2. Elektrostatinės jėgos:
 - a) elektros laidininkas,
 - b) dielektrikas (polimeriniai milteliai, plastikai).
3. Magnetinės jėgos (geležies dalelės).

II. Medžiagos tilteliai tarp dalelių paviršių:

1. Adsorbuotų paviršiaus sluoksnių kondensuoto vandens (miltelių) hidrogeninis ryšys.

2. Organinės makromolekulės suspensijoje (sąveikaujant skysčiui su skysčiu).

3. Skysčio tilteliai:

– žemo klampumo skysčiai pagal kapiliarinį slėgį ir paviršiaus įtempimą (drėgnas smėlis),

– aukšto klampumo ryšio agentai (sakai, derva).

4. Kieti tilteliai:

– skysčio tiltelių, turinčių savyje tirpiklį (druska), rekristalizacija,

– išbrinkusių ultrasmulkių zolio dalelių (krakmolos, molis) sukietėjimas,

– susidariusio skysčio tiltelio sušaldymas (užšaldytas dirvožemis),

– cheminė reakcija tarp adsorbuotų paviršiaus sluoksnių (cemento hidratacija vandeniui) arba cementas su į poras patekusi vandeniu (betonas),

– aukšto klampumo ryšio agentų (asfaltas) sukietėjimas,

– kontaktų susijungimas, aglomeracija (nano skalės dalelių agregatai, keramika),

– cheminis ryšys, esant kieto kūno sąveikai su kietu kūnu (stiklo pluoštas, aktyvuoti metalo lydiniai).

5. Makromolekulių grandinės šakos susikabinimas (baltymai).

6. Susikabinimas kontakto metu dėl paviršiaus šiurkštumo (šiurkščios dalelės).

7. Susikabinimas, esant kablo tipo ryšiui (skaidulos).

Šie efektai gali būti susieti mikromechaniniame lygmenyje.

1.1.2. Adhezija. Van der Valso jėgos

Fundamentinę sąveikos ir adhezijos mechanikos aprašymą pateikė Israelashvili (1992). Jėga $F_{H,atom}$ tarp dviejų atomų, išsidėsčiusių tarp atomų centrų atstumu z , yra apibrėžiama tarpatomine Van der Valso potencialo išraiška

$$W_{VdW}(z) = C/z^6, \quad (1.1)$$

kuri kinta pagal 6-tą laipsnį atvirkščiai proporcingu atstumu z . Galiausiai jėga yra išreiškiama kaip

$$F_{H,atom}(z) = dW_{VdW}(z)/dz, \quad (1.2)$$

čia C – atomo-atomo poros potencialo koeficientas (Israelashvili 1992).

Siekiant aprašyti Van der Valso potencialą tarp dviejų sąveikaujančių dalelių (kūnų) i ir j , kurių paviršiai vienas nuo kito yra nutolę atstumu a , remiamasi Hamakerio tarpatominės energijos sumavimu (Hamaker 1937). Suminę energiją aprašo Hamakerio konstanta C_H , kuri priklauso nuo sąveikaujančius kūnus sudarančių atomų skaičiaus tūrio vienetė bei tarpatominio potencialo koeficiento. Sąveikos energija tarp dalelės ir paviršiaus aprašoma

$$W_{VdW,Hmk}(a) = \frac{C_H \cdot R_{eff}}{6 \cdot a}, \quad (1.3)$$

čia C_H yra visuotinai priimta Hamaker konstanta, nustatyta remiantis tarpatomine sąveika. Ši konstanta paremta charakteringu medžiagos parametru – Van der Valso adhezija tarp standžių ar skystų dalelių.

Kaip alternatyva, skaičiuojant Hamaker konstantą, yra rekomenduojama Lifshitz teorija (Lifshitz 1955, 1956), kuri laikoma vientiso kūno teorija. Ši teorija gali būti naudojama, kada sąveikaujantys paviršiai yra didesni, nei pavienių molekulių (Israelashvili 1992; Tomas 2004). Santykinė Van der Valso jėgos išraiška, įvertinta per potencialų traukos išraišką, buvo aprašyta Castellianos (2005).

Sąveikos savybės charakterizuojamos bedimensiu, sukibimo stiprumą apibūdinančiu parametru Φ_T , pirmą kartą paminėtu Tabor (1976). Bedimensis adhezinis tamprus poslinkis (elastinis tempimas, neigiamas poslinkis nukrovimo metu), išreiškiamas kaip susidariusio „kakliuko“ aukštis $h_{N,T}$ aplink kontakto sritį. Jis įvertinamas iki minimalaus molekulinio atsiskyrimo centro $a_{F=0}$:

$$\Phi_T = \frac{h_{N,T}}{a_{F=0}} = \left(\frac{R_{eff} \cdot p_{VdW}^2}{4 \cdot E_{eff}^2 \cdot a_{F=0}} \right)^{1/3}. \quad (1.4)$$

Sąveikaujančių narių i ir j geometrinio vidurkio spindulys (efektyvusis spindulys) R_{eff} nustatomas išraiška:

$$\frac{1}{R_{eff}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j}. \quad (1.5)$$

Sferos – plokštumos sąveikos efektyvusis spindulys lygus sferos spinduliui $R_{eff} = R$. DMT modelis taikomas ypač smulkioms dalelėms tirti, kai parametras $\Phi_T < 0,1$.

Koeficientas atitinka adhezijos jėgų sąveikos sritį ir pradžioje yra taikomas adhezeinei elastinei sąveikai tirti. Adhezijos jėga, tenkanti plokštumos paviršiaus plotui, apibūdinama Van der Valso traukos slėgiu p_{VdW} , naudojamu aprašant Van

der Valso jėgų poveikį sąveikos metu. Šis slėgis yra lygus teoriniam sukibimo įtempimui ir apskaičiuojamas pagal formulę:

$$p_{vdw} = \frac{C_{H,sls}}{6 \cdot \pi \cdot a_{F=0}^3}. \quad (1.6)$$

Hamaker konstanta $C_{H,sls}$ yra charakteringas medžiagos parametras, įvertinantis Van der Valso jėgų įtaką dalelėms. Van der Valso traukos slėgis p_{vdw} ir paviršiaus įtempimas σ_{sls} yra susieti minėta formule (1.6). Paviršiaus energiją ir kohezijos įtaką tyrė Bradley (1932). Įvertindamas Van der Valso jėgų poveikį bei derindamas tamprumo parametrus, kohezinius miltelius tyrė Gilabert *et al.* (2007).

1.1.3. Adhezinis tamprus kontaktas

Dalelės sąveikos metu adhezijos įtakai įvertinti dažniausiai taikomi modeliai yra DMT (Derjaguin, Muller, Toporov), JKR (Johnson, Kendall, Roberts), taip pat literatūroje minimas, tačiau ne toks populiarus M-D (Maugis ir Dugdale) modelis. Šie modeliai pateikti 1.1 paveiksle, kaip normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h .

Visi minėti modeliai įvertina adhezijos poveikį, aprašomą Van der Valso traukos jėgomis (1.1 paveikslas). DMT ir JKR modelius galima sulyginti normalinės jėgos F^N bei poslinkio h priklausomybe nuo kontakto spindulio r_c .

Hertz modelis. Tamprus neadhezinis kontakto modelis gali būti aprašytas Hertz modeliu. Hertz modelio normalinės jėgos F^N ir poslinkio h išraiška:

$$F_{Hertz}^N = \frac{4}{3} \frac{E_{eff}}{R_{eff}} \cdot r_c^3, \quad (1.7)$$

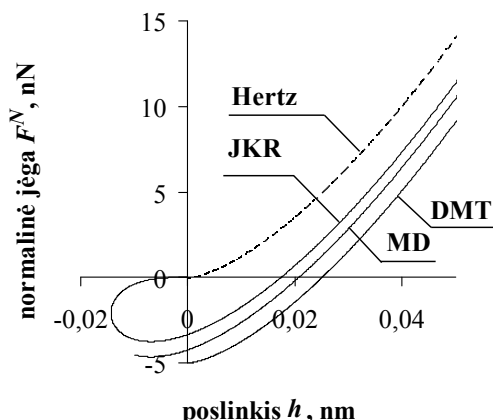
čia E_{eff} yra efektyvusis tamprumo modulis, aprašomas išraiška:

$$\frac{1}{E_{eff}} = \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j}; \quad (1.8)$$

$$h_{Hertz} = \frac{r_c^2}{R_{eff}}. \quad (1.9)$$

Ištačius formulę (1.9) į formulę (1.7), bendra formulė, tinkanti dinaminiam uždaviniui skaičiuoti, yra

$$F_{Hertz}^N = \frac{4}{3} \cdot E_{eff} \cdot R_{eff}^{1/2} \cdot h^{3/2}. \quad (1.10)$$



1.1 pav. Adhezinis tamprus JKR, DMT ir MD, bei neadhezinis Hertz tamprus modelis. Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h

Fig. 1.1. Adhesive elastic JKR, DMT, MD and non-adhesive Hertz model. Normal force F^N dependence on displacement h

Norint įvertinti adhezijos įtaką esant tampriam kontaktui, taikomi šie modeliai:

DMT modelis. Smulkioms ir standžioms dalelėms modeliuoti taikomas Derjaguin, Muller ir Toporov (DMT) modelis. Derjaguin *et al.* (1975), Muller *et al.* (1980) numato, jog pusė sąveikos adhezijos jėgos $F_{H,DMT}/2$ veikia išorėje, žiedo pavidalo srityje, kuri yra išsidėsčiusi apie uždara kontakto perimetrą. Paviršiaus traukos jėgos veikia baigtiniame atstume. Adhezinų dalelių kontakto teorija buvo pateikta Derjaguin (1934).

Adhezijos poveikį įvertinanti jėga F_{DMT} , esant sferinių dalelių kontaktui, gali būti išreikšta: adhezijos darbą įvertinančiu nariu W_A , visuotinai priimta paviršiaus energija γ_A arba paviršiaus įtempimu σ_{sls} (indeksas sls reiškia dalelės paviršiaus – adsorbcijos sluoksnio – dalelės paviršiaus sąveiką). Visi šie nariai turi bendrą išraišką $W_A = 2 \cdot \gamma_A = 2 \cdot \sigma_{sls}$. Šioje išraiškoje įvertinamas daugiklis 2, kadangi sąveikauja du paviršiai (Israelashvili 1992). Kai sąveikos nėra, šie paviršiai laikomi atskiromis terpėmis, tuo tarpu sąveikos metu jie laikomi viena terpe. DMT modelio normalinės jėgos F^N ir poslinkio h išraiška:

$$F_{DMT}^N = \frac{4}{3} \frac{E_{eff}}{R_{eff}} \cdot r_c^3 - 4 \cdot \pi \cdot R_{eff} \cdot \sigma_{sls} = F_{Hertz}^N - 4 \cdot \pi \cdot R_{eff} \cdot \sigma_{sls}; \quad (1.11)$$

$$h_{DMT} = h_{Hertz} = \frac{r_c^2}{R_{eff}}. \quad (1.12)$$

Įstačius formulę (1.12) į (1.11), bendra formulė yra:

$$F_{DMT}^N = \frac{4}{3} \cdot E_{eff} \cdot R_{eff}^{1/2} \cdot h^{3/2} - 4 \cdot \pi \cdot R_{eff} \cdot \sigma_{sls}. \quad (1.13)$$

Paviršiaus įtempimas σ_{sls} aprašomas tokia išraiška:

$$\sigma_{sls} = \frac{C_H}{24 \cdot \pi \cdot a_{F=0}^2}. \quad (1.14)$$

Paviršiaus įtempimas atitinka pusę energijos, reikalingos atskirti du plokščius paviršius ir perkelti juos nuo minimalaus sąveikos atstumo $a_{F=0}$ iki begalinio atstumo (Israelishvili 1992; Derjaguin 1974).

JKR modelis. Normalinės jėgos išraišką sferinėms dalelėms pasiūlė Johnson, Kendall ir Roberts (1971). Jų sudarytame JKR modelyje priimama, jog paviršiaus traukos jėga yra susieta su paviršiaus energija sąveikos srityje. Elastinių sferų adhezijos poveikį įvertinančių modelių galiojimo ribos buvo aprašytos Johnson ir Greenwood (1997). JKR modelis buvo aprašytas Johnson (1998). Kvazistatinių ir dinaminių jėgų panašumo analizę bei JKR metodo palyginimą atliko Ebenstein *et al.* (2006). Adheziją tarp tamprių sferų bei plokščių paviršių tyrė Greenwood ir Williamson (1966), Greenwood ir Johnson (1981), Greenwood (1997).

JKR modelio normalinės jėgos F^N ir poslinkio h išraiška:

$$F_{JKR}^N = F_{Hertz}^N - \left(16 \cdot \pi \cdot \sigma_{sls} \cdot E_{eff} \cdot r_c^3 \right)^{1/2}; \quad (1.15)$$

$$h_{JKR} = \frac{r_c^2}{R_{eff}} - \left(\frac{4 \cdot \pi \cdot \sigma_{sls} \cdot r_c}{E_{eff}} \right)^{1/2}. \quad (1.16)$$

Kadangi formulėje (1.16) poslinkio priklausomybė nuo sąveikos spindulio laikoma ketvirto laipsnio polinomine lygtimi, pritaikyti šį modelį dinaminiam uždaviniui spręsti matematiškai yra sudėtingiau, lyginant jį su DMT modeliu. Dinaminį JKR modelį taikė Fang ir Tan (2006). Taikydami vibracinio atpalaidavimo mikromanipuliaciją, jie tyrė dalelę veikiančią traukos jėgą jos atsiskyrimo metu.

Darbe yra naudojamas ne toks populiarus MD modelis, laikomas ribiniu DMT ir JKR modelių atveju.

MD modelis. JKR modelio atmaina yra MD (Maugis ir Dugdale) modelis, aprašytas Maugis (1992, 1996). MD modelio normalinės jėgos F^N išraiška yra:

$$F_{MD}^N = 4 \cdot \pi \cdot \sigma_{sls} \cdot R_{eff} \times \left(\frac{4 \cdot E_{eff} \cdot r_c^3}{3\pi \cdot \sigma_{sls} \cdot R_{eff}^2} - 1,16 \cdot \Phi_T \cdot \left(\frac{4 \cdot E_{eff} \cdot r_c^3}{3\pi \cdot \sigma_{sls} \cdot R_{eff}^2} \right)^{2/3} \left(\sqrt{x^2 - 1} + x^2 \cdot \arccos\left(\frac{1}{x}\right) \right) \right), \quad (1.17)$$

čia $x = r_p/r_c$ yra išorinio žiedinio spindulio r_p (gauto dalelės atsiskyrimo metu) ir kontakto spindulio r_c santykis. Kontakto spindulio r_c išraiška:

$$r_c^3 = \frac{3 \cdot R_{eff}}{4 \cdot E_{eff}} \cdot \left(F_{MD}^N + F_{JKR}^N + \sqrt{2 \cdot F_{JKR}^N \cdot F_{MD}^N + F_{JKR}^{N^2} - \frac{F^T \cdot E_{eff}}{2 \cdot G_{eff}}} \right), \quad (1.18)$$

čia G_{eff} yra efektyvusis šlyties modulis.

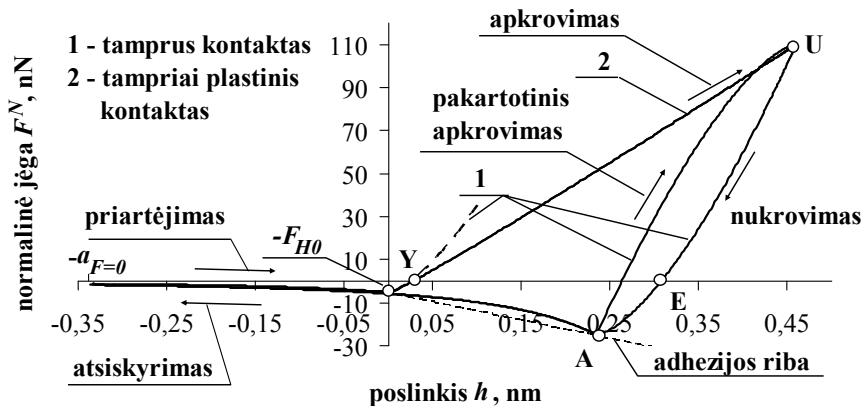
Žinomų adhezinio tampraus kontakto modelių galiojimo ribas taip pat aprašė Maugis ir Dugdale (Johnson 1998). Modelių plane yra nurodytos ribos, kada taikyti DMT bei JKR modelius, naudojant Tabor parametą.

Pastebėta, jog ultrasmulkiai dalelei artėjant prie sąveikaujamo paviršiaus arba kontaktui pasibaigus ir jai tolstant nuo sąveikos paviršiaus, nei vienas modelis neįvertina adhezijos įtakos. Remiantis Israelashvili (1992) ir Hamaker (1937), adhezijos poveikis dalelei artėjant prie sąveikaujamo paviršiaus ar atitrūkstant nuo jo yra žinomas. Darbe įvertinama adhezijos įtaka dalelei nesideformuojant.

Darbe naudojamas mikromechaninis priartėjimas, kuris yra aprašytas Tomas (2001 a,b, 2004, 2007 a,b, 2008, 2009).

1.1.4. Adhezinės tampriai plastinės sąveikos Tomas modelis

Standžios dalelės su minkštu kontaktu sąvoką pasiūlė Tomas (2004). Tomas sudarė adhezinį tampriai plastinės sąveikos modelį, taikomą statiniam uždaviniui spręsti.



1.2 pav. Adhezinis tampriai plastinis Tomas modelis.

Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h

Fig. 1.2. Adhesive elastic-plastic Tomas model.

Normal force F^N dependence on displacement h

1.2 paveiksle pateiktas modelis, įvertinantis adhezijos poveikį, tamprų bei tampriai plastinių kontaktus. Modelis taikomas sprendžiant statinį uždavinį, papildomai įvertinus pakartotinį apkrovimą. Modelio aprašymas pateiktas Tomas (2007). Svarbu pažymėti, jog nukrovimo metu, sprendžiant statinį uždavinį, pakartotinai apkraunant ir nukraunant kinta poslinkio h_A padėtis.

Šis modelis nepritaikytas sprendžiant dinaminį uždavinį diskrečiųjų elementų metodu. Modelis taikytinas sprendžiant statinį uždavinį, kada pakartotinio apkrovimo metu visada pasiekiamas poslinkis h_U . Tačiau, įvertinus dalelės sulipimą, dalelės elgsena pakartotinio nukrovimo metu tampa neaiški, nes pakartotinio apkrovimo metu (1.2 paveikslas) dalelė gali pasiekti nulinę greičio reikšmę esant mažesniai poslinkiui, nei poslinkis h_U . Taip pat neįvertinti energijos sklaidos mechanizmai, siejami su adhezija nukrovimo ir atsiskyrimo metu bei klampiu slopinimu.

1.2. Energijos sklaida

Nepaisant teorinių pasiekimų, susijusių su normalinės ultrasmulkios dalelės sąveikos tyrimais, tikslesnis sklaidos mechanizmų apibūdinimas ir jų panaudojimas bei taikymas išlieka problematiškas. Taip yra ne tik dėl neišbaigto šių modelių aprašymo, bet ir dėl mechaninės medžiagos kitimo bei neapibrėžtumo. Problema susijusi su atsistatymo koeficientu e , kurį sudėtinga teoriškai nustatyti, kadangi esami eksperimentiniai duomenys yra neišbaigti arba netgi prieštaringi. Ultrasmulkių dalelių sąveikos metu energijos sklaida gali įvykti dėl tampriai plastinio kontakto, adhezijos, klampaus slopinimo bei kontakto metu susidariusių tamprių bangų. Vienas iš mokslininkų, tyrusių energijos sklaidą dėl tamprių bangų, metaliniam rutuliukui smūgiuojant į pagrindą, yra Hunter (1957). Birių kūnų, skysčių bei dujų bendrą teoriją apžvelgė Jaeger *et al.* (1996).

Klasikiniam energijos sklaidos mechanizmui priskiriamas klampus slopinimas. Vieni iš autorių, apžvelgusių įvairius netiesinio tampraus kontakto su klampia elgsena modelius, buvo Kruggel *et al.* (2007). Neadhezinės dalelės teorinius modelius idealiai plastiškai elgsenai tyrė Molerus (1975, 1978). Tampriai plastinė dalelės deformavimosi elgsena buvo modeliuota Schubert *et al.* (1976) ir Thornton (1997), tuo tarpu baigtinių elementų metodo rezultatai buvo taikyti Vu *et al.* (2000) ir Brizmer *et al.* (2007) darbuose. Sklaidos modelį, susietą su plastiiniu deformavimu, aprašė Walton ir Braun (1986).

Medžiagos deformavimo greičio efektus, esant mažam dviejų identišκών dalelių pradiniam greičiui, tyrė Minamoto ir Kawamura (2009). Netiesinį vienos dalelės apkrovimą iki suirimo, taikant sklaidos modelį, paremtą vientiso kūno mechanika, tyrė Tavares ir King (2002). Akmens atsistatymo koeficientą tyrė Imre *et al.* (2008).

Pastebėta, kad vienas iš sąveikos modelių, įvertinančių adhezijos poveikį bei su juo susietą kinetinės energijos sklaidą vienos dalelės normalinės sąveikos metu, yra JKR modelis (Johnson 1985; Thornton ir Ning 1998). Minėtą energijos sklaidą taip pat įvertina ir MD modelis. Šie modeliai taikomi didesnėms nei ultrasmulki dalelėms tirti (Tabor 1976). Visi minimi modeliai yra aptarti ankstesniame skyrelyje.

1.2.1. Klampus slopinimas

Normalinio kontakto metu dalelės slopinimui apibūdinti paprastai taikomas klampaus slopinimo modelis. Šis modelis apibūdinamas, aprašant slopinimo jėgą

$$F_{diss,viscous}$$

Normalinio kontakto metu kinetinė energija išsklaidoma į šilumą. Klampų slopinimą apibūdinantis netiesinis jėgos narys gali būti aprašytas išraiška:

$$F_{diss, viscous}^N = C_{non}^N(h) \cdot \dot{h}, \quad (1.19)$$

Čia: $\dot{h}$ – dalelės greitis arba dalelės poslinkio greitis, C_{non}^N – slopinimo konstanta.

Poslinkio greitis aprašomas kaip poslinkio išvestinė pagal laiką.

Cundall ir Strack (1979) pasiūlė tiesinį modelį, kai spyruoklės standumo koeficientas nepriklauso nuo poslinkio ir gali būti aprašomas tiesiniu Hook modeliu. Normaliniam kontaktui aprašyti Cundall ir Strack pasiūlė šiuos tiesinius, tamprius ir klampus slopinimo mechanizmus.

Normalinis kontaktas aprašomas formule:

$$C_{CS}^N = 2 \cdot \sqrt{m_{eff} \cdot K_{Hook}}. \quad (1.20)$$

Tsuji *et al.* (1992), remdamasis Cundall ir Strack (1979), pritaikė Hertz modelį, įvertinant kintamą slopinimo koeficientą α_d :

$$C_{nonTs}^N = \alpha_d \cdot \sqrt{m_{eff} \cdot K_{el}} \cdot h^{1/4}. \quad (1.21)$$

Kuwabara ir Kono (1987) intuityviai pasiūlė visiškai netiesinį mechanizmą, apjungiantį spyruoklės ir sklaidos jėgas. Jis remiasi analogija, kuri taikoma Hertz teorijoje:

$$C_{nonKK}^N = 2 \cdot B_{eff} \cdot \sqrt{R_{eff} \cdot h}; \quad (1.22)$$

$$B_{eff} = (1 - \sigma_1'^2)/E_1' + (1 - \sigma_2'^2)/E_2'; \quad (1.23)$$

$$E' = 9 \cdot \zeta \cdot \eta / (3 \cdot \zeta + \eta); \quad \sigma' = (3 \cdot \zeta - 3 \cdot \eta) / 2(3 \cdot \zeta + \eta), \quad (1.24)$$

čia netiesinė slopinimo charakteristika C_{nonKK}^N yra išreiškiama per efektyviąją slopinimo konstantą B_{eff} ir efektyvųjį spindulį R_{eff} . Efektyvioji slopinimo konstanta C_{non} pateikiama analoginiu efektyviuoju tamprumo modulių E' , pakeičiant dvi tamprumo konstantas su atitinkamais klampos parametrais.

Panašus į pastarąjį yra Brilliantov *et al.* (2007) pasiūlytas modelis. Jame slopinimo jėga aprašoma, pateikiant išplėstinius šlyties koeficientus. Modelis, užrašytas šiek tiek kitokia forma, yra išreikštas netiesinės konstantos nariais, sudarančiais standumo koeficientą K^N :

$$C_{nonBr}^N = \frac{3}{2} \cdot K_{el} \cdot A_{Br} \cdot \sqrt{h}; \quad (1.25)$$

$$A_{Br} = \alpha^2 \cdot \beta = \frac{1}{3} \cdot \frac{(3 \cdot \eta_2 - \eta_1)^2}{(3 \cdot \eta_2 + 2 \cdot \eta_1)} \cdot \left[\frac{(1 - v^2) \cdot (1 - 2 \cdot v)}{Y \cdot v^2} \right], \quad (1.26)$$

čia narys A_{Br} apima ne tik medžiagos klampumo funkciją, bet ir tamprias medžiagos savybes.

Klampiai tamprų modelį taip pat pateikė Walton ir Braun (1986). Klampiai tamprų kūnų kontaktą ir irimo mechaniką tyrė Maugis ir Barquins (1978). Tampruosius vibrosmūgius tyrė ir įvertinančius klampų slopinimą modelius pasiūlė Barauskas ir Ostraševičius (1998).

1.2.2. Atsistatymo koeficientas

Sprendžiant dinaminį uždavinį bei taikant energijos sklaidos mechanizmus, vienas iš svarbių dinaminių rodiklių yra atsistatymo koeficientas e , kuriuo sąveikos metu gali būti įvertinta kinetinės energijos sklaida. Atsistatymo koeficientas svyruoja nuo 0 iki 1. Sąveikai, turinčiai sklaidos pobūdį, šis koeficientas visada mažesnis nei 1. Skaitinis ir teorinis atsistatymo koeficiento skaičiavimas, esant pakartotinam smūgiui, tirtas Seifried *et al.* (2005). Atsistatymo koeficiento e reikšmių kritimas, esant normalinei smulkių dalelių sąveikai prie nedidelių greičių bei didėjant adhezijos energijai, parodytas Sorace *et al.* (2009). Esant adheziinei tampaiai plastinei sąveikai, šį koeficientą taikydami JKR modelį tyrė Thornton ir Ning (1998).

Atsistatymo koeficientas e atitinka atšokimo v_r ir pradinio v_0 greičių santykį:

$$e = -\frac{v_r}{v_0}. \quad (1.27)$$

Neįvertinus energijos sklaidos, atsistatymo koeficientas $e = 1$. Kai dalelės energijos sklaida W_{diss} yra lygi pradinei kinetinei energijai $W_{kinetic,0}$, atsistatymo koeficientas $e = 0$.

Taikant energijos sklaidos mechanizmus, atsistatymo koeficientas apskaičiuojamas pradinės ir išsklaidytos kinetinės energijos išraiška (Tomas 2007):

$$e^2 = \frac{W_{kinetic, 0} - W_{diss}}{W_{kinetic, 0}}. \quad (1.28)$$

Adhezinės tamprios sąveikos atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio greičio išraišką pasiūlė Thornton ir Ning (1998):

$$e_{Th,JKR} = \sqrt{1 - \frac{v_{cr,JKR}^2}{v_0^2}}. \quad (1.29)$$

Ši formulė išvesta, remiantis JKR modeliu (Johnson 1984).

Apžvelgus atsistatymo koeficiento e išraiškas galima pastebėti, jog atsistatymo koeficientas, įvertinus su adhezija siejamą energijos sklaidą, mažės ir gali būti išreikštas per kritinį sulipimo greitį $v_{cr,JKR}$. Formulės (1.29) analitinis sprendinys gali būti naudingas, lyginant skaitinio eksperimento rezultatus bei tikrinant taikomos integravimo laike schemos tikslumą. Pasirinkta integravimo laike schema apžvelgta sekančiame skyrelyje. Išsamią sklaidos bei atsistatymo koeficiento sąveikaujančių kūnų apžvalgą pateikė Brilliantov *et al.* (1996, 2007), Gilardi ir Sharf (2002), Ismail ir Stronge (2008) bei Antonyuk *et al.* (2006, 2010).

1.3. Diskrečiųjų elementų metodologija

Iš visų skaičiuojamųjų dalykų skaičiuojamoji mechanika turi ilgiausią vystymosi istoriją, o savo metodus sėkmingai pritaiko praktikoje. Didžiausias dėmesys joje yra skiriamas įvairių vientisų kūnų makroskopiniams modeliavimams bei inžinerinėms struktūroms tirti. Pastaruoju metu skaičiuojamosios technologijos pradėtos taikyti modeliuojant vidinę medžiagos struktūrą.

Nuo to laiko, kai pirmą kartą diskrečiųjų elementų metodą (DEM) pasiūlė Cundall ir Strack (1979), šis metodas tapo plačiai naudojamas tiriant granuliuotų medžiagų elgseną.

Granuliuotos medžiagos modeliavimo metodus yra apžvelgę Džiugys ir Peters (2001). Jie nurodė, jog DEM gali būti suskirstytas į tris modelius: statistinis matematinis, klasikinis Niutono (dinaminis) ir hibridinis modeliai. Modeliuojant granuliuotos medžiagos judėjimą mikroskopiniame dalelių lygyje, DEM remiasi Lagranžo požiūriu. DEM gali būti naudojamas skaičiuojant reikšmes, kurias būtų sunku gauti eksperimentiškai. Minėti mokslininkai nurodė, kad klasikinis Niuto-

no dinamikos modelis naudoja dalelės dinamikos lygtis, išvestas iš klasikinės Niutono mechanikos. Šios lygtys yra taikomos kiekvienai dalelei.

Išskirti modeliai gali būti suskirstyti į dvi pagrindines grupes: įvykių ir laiko valdymo metodus. Įvykio valdymo metodas aprašo dalelių būvį susidūrimo momentu. Tuo tarpu, kai dalelių kontakto laikas yra didesnis nei jų laisvojo kelio laikas, yra naudojamas laiko valdymo metodas, įvertinamas laiko žingsnis Δt .

Diskrečiųjų elementų metodas (DEM) dažnai naudojamas modeliuojant medžiagas mikroskopiniame lygyje. Modeliuojama dalelė laikoma miltelius sudarančiu komponentu. Ji suvokiama kaip tam tikros formos, dydžio bei savybių nedalomas kūnas – diskretusis elementas. Modeliuojant DEM, galima tirti tiek pavienės dalelės, tiek dalelių sistemos netiesinį kontaktą. Nagrinėjant tokių dalelių sistemą, DEM metodas apima kontaktuojančių deformuojamų dalelių sistemą. Tokia sistema laikoma daloma. Svarbu tai, kad bet kokios geometrinės formos ir dydžio kūnas gali būti traktuojamas kaip dalelių sistemos konglomeratas, kurio sąveiką taip pat galima tirti DEM.

DEM metodu yra modeliuojamos birios medžiagos. Medžiagų savybės gali atitikti kietą kūną, skysčius, dujas arba jų kombinaciją. DEM metodu skysčio tipo granulių kontaktą su pagrindu nagrinėjo Allen ir Tildesly (1987). Birias medžiagas skaitiškai modeliavo Kohring (1994, 1996). Skaitiškai dalelių sistemą tyrė Zhu *et al.* (2008). Kombinuotą baigtinių-diskrečiųjų elementų metodą pateikė Munjiza (2004). Taikant skaitinius algoritmus, dalelės judėjimą tyrė Herrmann ir Luding (1998, 2005) ir Herrmann (2002).

Atliekant skaitinius tyrimus, įvertinamas tiesinis ir netiesinis kontaktai. Universalių modelių fizikinė bazė apima tampriai plastinį bei klampiai plastinį kontaktus, turinčius histerezės ir energijos sklaidos pobūdį. Tamprus kontaktas aprašomas, remiantis Hertz kontakto teorija. Tampriai plastinio kontakto modelį pateikė Tomas (2004). Elastinę bei tampriai plastinę dalelių kontakto elgseną tyrė Wu *et al.* (2003, 2005). Sąveiką tarp dalelių tyrė Tykhoniuk *et al.* (2007) bei Luding *et al.* (2003).

Modeliavimas apima dalelių tarpusavio kontaktą bei kontaktą su pagrindu. Modeliuojant DEM pagrindas gali būti kietas arba deformuojamas. Pagrindo savybes tyrė Kremmer ir Favier (2001).

Disertacijoje modeliuojama diskrečiųjų elementų metodu, taikoma FORTRAN programavimo kalba. Programavimo kalbos aprašymą galima rasti Adams *et al.* (1992).

1.3.1. Judėjimo lygtys

Disertacijoje diskrečiųjų elementų metodas yra taikomas modeliuojant adhezinės dalelės judėjimą. Pasirinktos dalelės i judėjimas yra charakterizuojamas

šiais parametrais: masės centro pozicija x_i , dalelės greitis $\dot{x}_i = dx_i/dt$ ir pagreitis $\ddot{x}_i = d^2x_i/dt^2$. Slenkamasis judėjimas aprašomas taikant antrąjį Niutono dėsnį dalelei i :

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_j F_i, \quad (1.30)$$

čia m_i yra masė, tuo tarpu F_i atitinka dalelę veikiančią suminę jėgą. Ši jėga sudaryta iš sąveikos jėgų. Normalinės sąveikos metu jėga yra redukuota viena normaline jėga F^N . Sąveikos jėgų skaičiavimo metodologija priklauso nuo dalelės dydžio, formos ir mechaninių savybių, kaip ir sudedamajame sąveikos modelyje.

1.3.2. Kontakto jėgos

Tiriant normalinę sąveiką, kontakto jėgas aprašo normalinė jėga F^N . Normalinė F^N jėga susideda iš skirtingos prigimties komponentų. Dalelės judėjimas sąveikos metu erdvėje ir laike apibūdinamas jų integravimu. Normalinė jėga lygi:

$$F^N = F^N(h, v_n). \quad (1.31)$$

Vienas iš plačiausiai taikomų modelių, aprašančių normalinį, tamprų dalelės kontaktą, yra Hertz (1882) modelis: formulė (1.10). Adhezinę tamprią sąveiką aprašo populiarūs JKR, MD ir DMT modeliai, pateikti formulėse (1.11–1.18).

1.3.3. Skaitinis integravimas

Sprendžiant judėjimo lygtis (1.31), taikomi išreikštiniai skaitinio integravimo metodai. Algoritmų apžvalga pateikta Allen ir Tildesley (1987), Rougier, Rougier *et al.* (2004), Džiugys ir Peters (2001), Kruggel *et al.* (2007), Balevičius *et al.* (2004).

Disertacijoje yra taikoma 5-to tikslumo Gear prediktoriaus-korektoriaus schema. Skaitinis laiko sprendinys $t + \Delta t$ gaunamas esant laiko žingsnio Δt prieauginui. Ieškant kompromiso tarp tikslumo ir skaitinio efektyvumo, reikia remtis prediktoriaus-korektoriaus integravimo schemomis. Aukštesnio laipsnio schemas yra tikslesnės. Prediktoriaus-korektoriaus schema atitinka dviejų žingsnių procedūras. Nuo laiko priklausantys kintamieji, tokie kaip pozicijos $x(t)$, greičiai $v(t) = dx/dt$, pagrečiai $a(t) = d^2x/dt^2$, aukštesnio laipsnio išvestinės

$b_3(t) = d^3x/dt^3$, $b_4(t) = d^4x/dt^4$ ir $b_5(t) = d^5x/dt^5$, yra aprašomi $y = \{x, v, a, b_3, b_4, b_5\}^T$. Nauji kintamieji laiko momentu $t + \Delta t$ iki reikiamo tikslumo laipsnio yra numatomi pagal paprastą išplėstinę eilutę:

$$y^p(t + \Delta t) = y(t) + \Delta y^p(\Delta t). \quad (1.32)$$

Prieaugis $\Delta y^p(\Delta t)$ nurodo reikiamą išplėtimo eilutės narį. Tada, priklausomai nuo naujų pozicijų ir greičių, dalelės greičiai ir pagreičiai yra patikslinami, pagreičio prieaugis Δa – atnaujinamas. Patikslinami dalelės kintamieji:

$$y^c(t + \Delta t) = y^p(t + \Delta t) + \Delta y^c(c_j, \Delta t, \Delta a). \quad (1.33)$$

Pataisymas Δy^p yra apskaičiuojamas, naudojant duotą integravimo konstantą c_j . Lygiagretų polidispersinės birios medžiagos modeliavimą diskrečiaisiais elementais nagrinėjo Kačianauskas *et al.* (2009).

1.4. Pirmojo skyriaus išvados

Išanalizavus literatūros šaltinius, pastebėta:

1. Žinomi didelių matmenų deformuojamų kūnų kontakto modeliai netiria visų ultrasmulkioms dalelėms būdingų efektų, pvz.: adhezijos, klampaus slopinimo, tampriai plastinio kontakto.
2. Sausose ultrasmulkiuose dalelėse vyrauja Van der Valso jėgos.
3. Adhezijos įtaka tampriam bei tampriai plastiniam deformavimui bei energijos sklaidos mechanizmams dar nėra ištirta.
4. Žinomi literatūroje modeliai įvertina dalelės sulipimo sąlygas, tačiau nerasta modelių, aprašančių bei tiriančių tokių dalelių sulipimo procesą.
5. Teoriniai modeliai, aprašantys nagrinėjamų dalelių sąveiką, galėtų būti taikomi ir nano dydžio dalelių sąveikai tirti. Teorinio modelio sukūrimas galėtų būti aktualus ultrasmulkių dalelių technologijos (UDT) ir nanotechnologijos (NT) moksluose.

Teorinis sąveikos modelis

Pastaruoju metu mechanikos inžinerijoje sprendžiama daug naujų ir sudėtingų problemų bei uždavinių. Vienas iš tokių uždavinių – biriųjų medžiagų skaitinis modeliavimas. Nepaisant pasiekimų, kohezinių ir birias medžiagas įeinančių ultrasmulkių dalelių modeliai dar nėra pakankamai ištirti. Virtualus birių medžiagų tyrimas gali būti atliktas diskrečiųjų elementų metodu (DEM). DEM yra skaitinis modeliavimo įrankis, galintis suteikti informacijos apie individualių dalelių elgseną.

Darbe yra modeliuojamos ultrasmulkios dalelės, tiriama normalinė jų sąveika. Darbas apima teorinio modelio sukūrimą, jo pritaikymą DEM bei skaitinį eksperimentą. Modelio veikimas įrodytas įvairiais skaitiniais eksperimentais ir palygintas su žinomais rezultatais. Ištirtas charakteringų energijos sklaidos mechanizmų poveikis, taip pat dalelių sulipimo ir atšokimo sąlygos.

Šiame skyriuje pateiktas universalus ultrasmulkių sferinių dalelių normalinės sąveikos modelis, apimantis adhezinių tamprų bei tamptai plastinių kontaktus su šiai sąveikai būdingais energijos sklaidos mechanizmais. Šis modelis yra universalus, nes aprašo nuo dalelių savybių priklausančius esminius sąveikos procesus: atšokimą bei sulipimą. Sudaryti energijos sklaidos mechanizmai siejami su plastiniu deformavimu, adhezija bei klampiu slopinimu.

Skyriaus tematikos medžiaga atspindi tokius autoriaus su bendraautoriais paskelbtus straipsnius: Jasevičius *et al.* (2008, 2009, 2010).

2.1. Pagrindinės sąvokos ir prielaidos

Ultrasmulki dalelė ($0,1 < d < 10 \mu\text{m}$) yra laikoma miltelinių medžiagų sudaromoju komponentu. Darbe pateikiamas sudarytas modelis, skirtas sferos pavirdalo ultrasmulkios dalelės normalinei sąveikai tirti. Dalelės sąveika šiuo atveju suprantama kaip abipusis poveikis, apimantis trauką bei stūmą. Sąlytis tarp sąveikaujančių paviršių laikomas kontaktu. Priimama, kad darbe sąveika apima adhezijos poveikį, tamprų bei tampriai plastinį kontaktus. Nagrinėjama dalelių normalinė sąveika erdvėje vyksta viena, paviršių susilietimo normalės kryptimi.

Dalelių sąveikos modelis yra aprašomas algebrinėmis jėgos ir poslinkio priklausomybėmis. Stūmos jėga yra apibrėžiama kaip teigiama, tuo tarpu traukos jėga laikoma neigiama. Teigiamas dalelės poslinkis h atitinka dalelės poslinkį kontakto metu, tuo tarpu neigiamas poslinkis h atitinka dalelės poslinkį ne kontakto metu. Poslinkis kontakto metu, h lyginant su standžios dalelės skersmeniu d , yra mažas.

Dalelė tariamai juda vakuume atstumu nuo minus begalybės iki sąveikaujamo paviršiaus pradiniu greičiu v_0 . Sąveika prasideda, kai dalelė iki sąveikaujamo paviršiaus priartėja $a_{F=0}$ atstumu. Nutolusios dalelės sąveika aprašoma Van der Valso jėgomis, kurios yra suvokiamos kaip adhezijos poveikis. Van der Valso jėgos tokiai smulkiai dalelei yra dominuojančios, apie 250 tūkst. kartų didesnės, nei žemės traukos jėga (3 skyrius). Dėl šios priežasties žemės traukos poveikis ultrasmulkiai dalelei darbe nėra įvertinamas. Daroma prielaida, jog nagrinėjama dalelė turi adhezių, tampriai plastinių bei klampių savybių.

Sudarytas modelis apima sąveikai būdingus energijos sklaidos mechanizmus. Sklaidos mechanizmas suvokiamas kaip savybė, kuria sąveikos metu apibūdinama energijos sklaida. Šie mechanizmai apima sklaidos reiškinio būsenas ir procesus bei leidžia teoriškai transformuoti fizinės mechaninės sistemos kinetinę energiją į kitų rūšių energiją. Darbe priimama, kad adhezinės dalelės sąveikos metu išsklaidytos energijos kiekis apibūdinamas trimis energijos sklaidos mechanizmais. Šie mechanizmai skirti ultrasmulkioms dalelėms tirti ir yra siejami su adhezija, tampriai plastiniu kontaktu bei klampiu slopinimu. Sklaida įvertinama, taikant atsistatymo koeficientą e , kuris nurodo bendrą santykinę mechaninės sistemos prarastąją energiją.

Adhezinės dalelės smūgis aprašomas, atsižvelgiant į netiesinę, tampriai plastinę slopinamojo pobūdžio elgseną. Dėmesys skiriamas lygių, izotropinių ir standžių dalelių, sudarančių minkštą kontaktą, modeliavimui.

Dalelės sąveika apima sulipimo ir atšokimo procesus. Dalelės sulipimas – tai sąveikos procesas, kai traukos ir stūmos veikiami dalelė pereina į rimties būseną. Sulipimo proceso metu rimties būseną pasiekusi dalelė laikoma sulipusia. Priimama, kad sulipimo procesas apima dalelės prilipimą prie pagrindo bei dalelių

sulipimą tarpusavyje. Dalelė laikoma atšokusia, kai kontaktui pasibaigus ji grįžta į pradinę padėtį.

2.2. Dalelių adhezinė sąveika esant deformuojamam kontaktui

Normalinė sąveika apibūdinama jėga F^N ir poslinkiu h . Normalinės sąveikos metu kiekvienos dalelės i ($i = 1, n$) judėjimas laike aprašomas antrojo Niutono dėsnio skaliarinės diferencialinės lygties (1.30) išraiška

$$m_i \cdot \ddot{x}_i = F_i^N. \quad (2.1)$$

Jėgos, veikiančios tarp dviejų sąveikaujančių dalelių i ir j , aprašomos atstojamąja jėga F_{ij}^N . Ši jėga susideda iš trijų skirtingos prigimtės komponentų:

$$F_i^N = \sum_{j=1, j \neq i}^n F_{ij}^N = F_{deform} + F_{adh} + F_{diss}, \quad (2.2)$$

čia F_{deform} – deformuojamo kontakto jėga (apimanti tamprią bei tampriai plastinę jėgas), F_{adh} – adhezijos jėga, F_{diss} – su energijos sklaida siejama jėga. Disertacijoje sudaromas ultrasmulkios dalelės sąveikos modelis įvertina energijos sklaidos mechanizmus. Energijos sklaida įvertinama jėgos nariu $F_{diss}(t)$. Šis jėgos narys apima sklaidos mechanizmus, siejamus su adhezija bei klampiu slopinimu ir yra aprašomas jėgos nariais $F_{diss,adh}(t)$ ir $F_{diss,viscous}(t)$. Atsižvelgiant į iškeltas prielaidas, jėgoms skaičiuoti gali būti taikomi įvairūs tiesiniai ir netiesiniai modeliai.

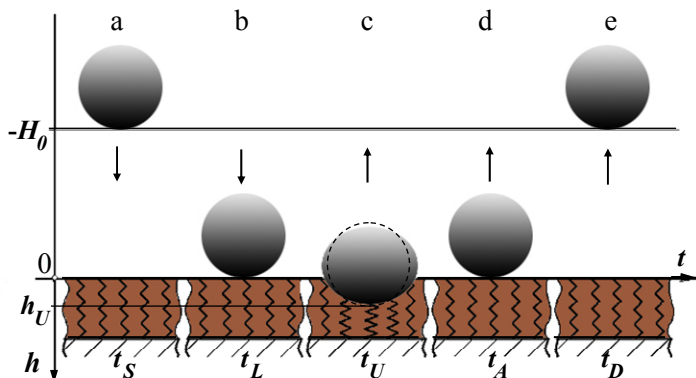
Šiame skyrelyje yra nagrinėjama adhezinė sąveika, apimanti tamprųjų bei tampriai plastinių kontaktus. Galima pastebėti, kad tamprus kontaktas yra atskiras ribinis deformuojamos dalelės atvejis.

Energijos sklaidos mechanizmai bus nagrinėjami tolimesniuose skyreliuose.

Neadhezinės neslopintos dalelės judėjimas. Neįvertinus adhezijos poveikio, dalelės judėjimas pavaizduotas 2.1 paveiksle, kuriame pateikiama dalelės judėjimo istorija. Čia a – pradinė padėtis, kai $t = t_0 = t_s$, b – pradinė susidūrimo padėtis, kai $t = t_L$, c – maksimalus persiklojimo gylis, atitinkantis poslinkio h_U padėtį, kai $t = t_U$, d – atšokimas, kai $t = t_A$, e – didžiausia aukštį atitinkanti dalelės padėtis, jai atšokus nuo pagrindo laiko momentu $t = t_D$.

Pradiniu laiko momentu $t_s = 0$ (2.1 paveikslas, a pozicija), dalelė laisvai krenta pastoviu laisvojo kritimo pagreičiu $g = -9,81 \text{ m/s}^2$. Laiko momentu $t = t_L$ dalelė pasiekia greitį $v(t_L) = v_L$ ir atsitrenkia į pagrindą (2.1 paveikslas, b pozicija). Dėl sukauptos energijos atsitrenkusi dalelė ir pagrindas deformuojasi. Yra priimta, jog faktinis dalelių susidūrimo deformavimasis apibūdinamas jų poslin-

kiu h . Kontakto metu dalelė pasiekia didžiausią greičio reikšmę, tuo tarpu pagreičio vektorius keičia kryptį. Tam tikru laiko momentu t_U judanti dalelė pasiekia pusiausvyros būseną $v(t_U) = 0$, maksimalų persiklojimą $h(t_U) = h_U$ ir didžiausią pagreitį $a(t_U) = a_U$ (2.1 paveikslas, c pozicija). Pasiekusi maksimalų poslinkį h_U , dalelė keičia judėjimo kryptį ir juda priešinga kryptimi į viršų.



2.1 pav. Neadhezinės dalelės judėjimas. Dalelės padėtis, įvertinant normalinį kontaktą: a – pradinė padėtis, b – kontaktas, c – maksimalus poslinkis h_U , d – atsiskyrimas, e – atšokimas

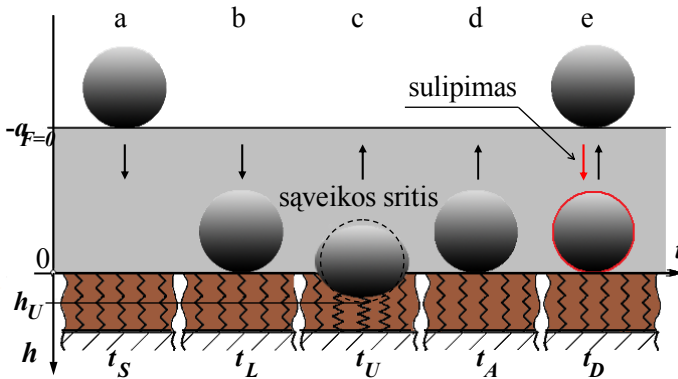
Fig. 2.1. Movement of non-adhesive particle. Characteristic positions of the particle with normal contact: a – initial position, b – contact, c – maximal displacement h_U , d – detachment, e – rebound

Tam tikru laiko momentu $t = t_A$ (2.1 paveikslas, d pozicija) poslinkis sumažėja iki nulio. Kai adhezijos jėgos neveikia, dalelė pradeda atsiskirti atšokimo greičiu $v(t_A) = v_A$. Galiausiai, laiko momentu $t = t_D$, atšokusi dalelė pasiekia pradinę padėtį greičiu $v(t_D) = 0$. Tuomet laisvas kelias prieš kontaktą yra charakterizuojamas laikotarpiu $T_f = t_L - t_S$, o elastinis kontaktas tarp dalelės ir pagrindo trunka $T_c = t_A - t_L$. Įvertinus kritimo ir kilimo periodų lygybę $T_r = T_f$, suminis judėjimo periodas yra $T = 2 \cdot T_f + T_c$.

Adhezinės dalelės judėjimas. Įvertinus adhezijos poveikį, dalelės judėjimą apibūdina 2.2 paveikslas, kuriame pateikiama dalelės judėjimo istorija. Čia a – pradinė padėtis $t = t_0 = t_S$, b – pradinė susidūrimo padėtis, kai $t = t_L$, c – maksimalus persiklojimo gylis, atitinkantis poslinkio h_U padėtį, kai $t = t_U$, d – atšokimas, kai $t = t_A$, e – didžiausia aukščio padėtis dalelei atšokus $t = t_D$, arba sulipimas. Remiantis prielaidomis ir sąlygomis, adhezijos poveikis yra reikšminis, o sunkio jėga tuo tarpu neįvertinama (skyrelis 2.1). Kadangi žemės trauka neįvertinama, laikoma, kad dalelė nekrenta, bet artėja prie sąveikos paviršiaus. Sąveikos

paviršius išsidėstęs statmenai dalelės judėjimo krypties. Pradiniu laiko momentu įvertinamas dalelės nuotolis nuo sąveikaujamo paviršiaus.

Pradiniu laiko momentu, kai $t_s = 0$ (2.2 paveikslas, a pozicija), dalelė yra nuotolusi nuo pagrindo $-a_{F=0}$ atstumu ir pradiniu greičiu v_0 juda link pagrindo. Priartėjusi arčiau nei $-a_{F=0}$ atstumu, dalelė sąveikauja su pagrindu. Veikiama Van der Valso jėgų, dalelė gali būti pritraukta prie pagrindo.



2.2 pav. Adhezinės dalelės judėjimas. Dalelės padėtis esant normalinei sąveikai:

a – sąveika, b – kontaktas, c – maksimalus poslinkis h_U , d – atšokimas,
e – sulipimas arba atšokimas

Fig. 2.2. Movement of adhesive particle. Characteristic positions of the particle during normal interaction: a – interaction, b – contact, c – maximal displacement h_U ,
d – rebound, e – stick or detachment

Laiko momentu $t = t_L$ dalelė pasiekia greitį $v(t_L) = v_L$ ir atsitrenkia į pagrindą (2.2 paveikslas, b pozicija). Dėl sukaupotos kinetinės energijos atsitrenkusi dalelė deformuojasi. Deformavimosi metu persiklojimas atitinka poslinkį h . Kontakto metu dalelių greitis pasiekia didžiausią reikšmę, o pagreičio vektorius keičia kryptį. Tam tikru laiko momentu t_U judanti dalelė pasiekia pusiausvyros būseną $v(t_U) = 0$, maksimalų poslinkį $h(t_U) = h_U$ ir didžiausią pagreitį $a(t_U) = a_U$ (2.2 paveikslas, c pozicija). Pasiekusi maksimalų poslinkį, dalelė keičia kryptį ir juda į viršų. Tam tikru laiko momentu $t = t_A$ (2.2 paveikslas, d pozicija) dalelė atsiskiria nuo pagrindo. Veikiant adhezijos jėgoms, dalelė pradeda atsiskirti atšokimo greičiu $v(t_A) = v_A$. Galiausiai, laiko momentu $t = t_D$, atšokusi dalelė pasiekia pradinę padėtį greičiu $v(t_D)$ (2.2 paveikslas, e pozicija). Jei pradinės kinetinės energijos dalelei pasiekti pradinę padėtį neužtenka, adhezinės traukos veikiama ji grįžta prie pagrindo ir prasideda sulipimo procesas (2.2 paveikslas, e pozicija). Laisvas kelias prieš kontaktą yra charakterizuojamas laikotarpiu $T_f = t_L - t_s$, o kontaktas baigiasi laiko periodu T_r . Kontakto trukmė yra $T_c = t_A - t_L$, atšokimo laiko trukmė

$T_r = t_D - t_A$. Įvertinus artėjimo ir atsiskyrimo periodų nelygybę $T_r \neq T_f$, suminis judėjimo periodas yra $T = T_r + T_f + T_c$.

2.2.1. Adhezinė tampri sąveika

Naujai sudarytame modelyje adhezinė tampri sąveika aprašoma, remiantis Hertz kontakto modeliu, tuo pačiu yra įvertinamas adhezijos poveikis. Sąveiką aprašančios normalinės jėgos lygtys originalios tuo, kad į jas įvedami naujai sudaryti energijos sklaidos mechanizmai.

Adhezijos jėgos koncepcija buvo taikyta, formuluojant sudedamąjį adhezinį tamprų sąveikos modelį, išreiškiamą nariais, susietais su jėga $F^N \equiv F_i^N$ ir poslinkiu h . 2.3 paveiksle pavaizduota dalelės normalinės jėgos priklausomybė nuo poslinkio, kurios reikšmės pateiktos nanoskalėje. Dalelės judėjimo istorija atitinka taškus (S-L-U-A-D).

Sudarant sferos pavidalo dalelės normalinio smūgio modelį, priimama, jog esant pradiniam greičiui v_0 , dalelė tariai juda vakuume nuo minus begalybės link sąveikaujamo paviršiaus. Sąveika prasideda, kai dalelė yra veikiamą Van der Valso jėgų, kurios veikia esant įvairiam trumpo nuotolio atstumui, nuo $-h_s$ iki nulio.

Žinoma, jog adhezijos jėgos poveikis gali žymiai sustiprėti esant nanoskalės šiurkštumui. Įvertinus vidutinį dalelės šiurkštumą, adhezijos jėga gali būti gauta, taikant Rumpf formulę (Rumpf 1958, 1974):

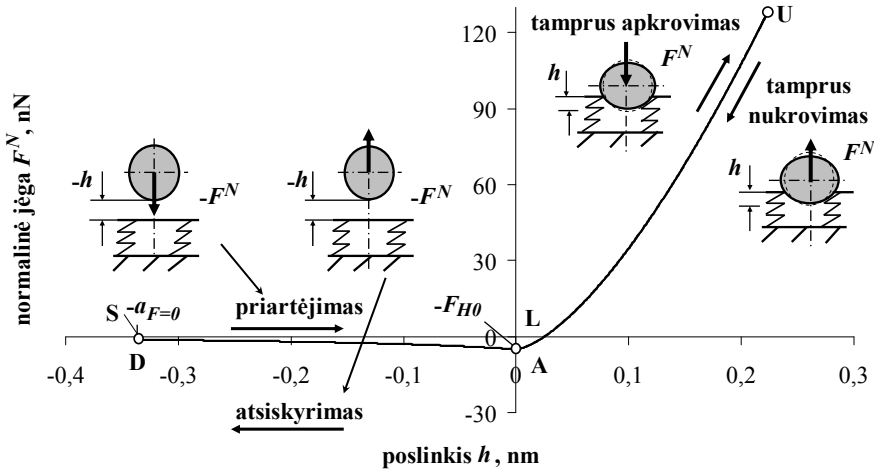
$$F_H(a=0) = -F_{H0} = -\frac{C_H \cdot R}{6 \cdot a_{F=0}^2} \cdot \left[\frac{R_a}{R_a + R} + \frac{1}{(1 + R_a / a_{F=0})^2} \right]. \quad (2.3)$$

Spindulio R dalelės šiurkštumas yra idealizuojamas kaip kita, daug kartų mažesnė dalelė, kurios spindulys R_a . Formulėje (2.3) pirmas narys rodo sferos-plokštumos sąveiką, tuo tarpu antras – šiurkštumo įtaką.

2.3 paveiksle pateikiamas adhezinis tamprus netiesinis modelis. Dalelės priartėjimas žymimas kreive S-L. Sferos-plokštumos sąveika yra formuojama, kai nėra sąlyčio. Trumpo nuotolio adhezijos jėga F_{H0} (deformavimosi pradžios jėga) diagramoje apibrėžiama ties poslinkio reikšme, lygia nuliui.

Esant adhezijos poveikiui, analitinė dalelės priartėjimo prie sąveikaujamo paviršiaus išraiška yra susijusi su dviem parametrais – minimaliu atstumu $-a_{F=0}$ ir adhezijos jėga F_{H0} , kuri gali būti nustatoma AFM testu (Tykhoniuk *et al.* 2007). Adhezijos jėgą tarp dviejų sausų, lygių paviršių sąlygoja Van der Valso jėgos. Teoriniai adhezijos jėgos F_{H0} skaičiavimai yra glaudžiai susiję su adhezijos skaičiavimu tarp idealiai standžių ir lygių paviršių. Yra žinoma, jog Van der Valso jėgos – tai trumpo atstumo tarpatominės traukos jėgos (Hamaker 1937).

Normalinės sąveikos metu sferinė dalelė, kai pradinis greitis v_0 , artėja S-L kryptimi prie sąveikaujamo paviršiaus.



2.3 pav. Adhezinė tampri sąveika.

Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h

Fig. 2.3. Adhesive elastic interaction. Normal force F^N versus displacement h

Aprašant Van der Valso jėgas, taikoma formulė (Tomas 2007):

$$F^N(t) = -\frac{F_{H0} \cdot a_{F=0}^2}{(a_{F=0} - h(t))^2}, \quad (2.4)$$

čia F_{H0} yra kietos sąveikos be deformavimo adhezijos jėga. Kai dalelė yra atstumu $-a_{F=0}$ normalinė jėga lygi $F^N(t) = -F_{H0}/4$. Taikant formulę (2.4), įvertinamas adhezijos poveikis dalelei priartėjant bei atsiskiriant. Adhezinės traukos jėgos pakanka, kad dalelė būtų pritraukta prie sąveikaujamo paviršiaus. Kai dalelė yra prie sąveikaujamo paviršiaus atstumu $h = 0$, adhezinė sąveikos jėga yra $F^N(t) = -F_{H0}$.

Dalelei pasiekus sąveikaujamo kūno paviršių taške L (2.3 paveikslas), normalinė jėga yra neigiama ir lygi F_{H0} . Prasidėjus kontaktui vyksta apkrovimas, kurio metu dalelė juda iš taško L į U ir tampriai deformuojasi. Šiuo atveju normalinės jėgos išraiška:

$$F^N(t) = F_{Hertz}^N(t) - F_{H0}, \quad (2.5)$$

kuria remiantis pirmasis narys, priklausomai nuo poslinkio dydžio, nurodo tamprią stūmos jėgą, o antrasis narys – adhezijos traukos jėgą F_{H0} , kuri kontakto metu nekinta. Dalelei pasiekus poslinkį h_U taške U, prasideda nukrovimas. Tamprus nukrovimas tarp h_U ir h_A yra aprašomas formule (2.5). Nukrovimas tęsiamas tol, kol dalelė pasiekia adhezijos ribą h_A taške A.

Tampriam kontaktui pasibaigus, kai poslinkis $h = h_A$, dalelė atsiskiria, tačiau sąveika dėl adhezijos poveikio tęsiasi toliau. Reikėtų paminėti, kad tamprus kontakto atveju poslinkis $h_A = 0$. Šiuo atveju adhezijos poveikio atstumas toks pat, kaip priartėjimo metu tamprioje stadijoje, ir yra lygus $a_{F=0}$. Dalelės judėjimas atsiskyrimo metu aprašomas, taikant lygtį:

$$F^N(t) = -\frac{F_{H0} \cdot a_{F=0}^2}{(a_{F=0} + h_A - h(t))^2}. \quad (2.6)$$

Dalelė, viršijusi $a_{F=0}$ atstumą, daugiau su pagrindu nesąveikauja.

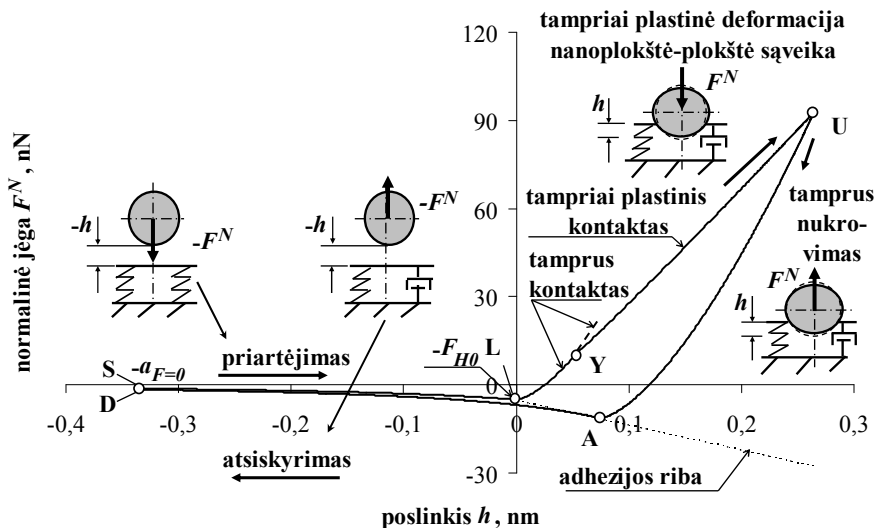
2.2.2. Adhezinė tampriai plastinė sąveika

Skyrelyje pateikiamas sudėtinis normalinės sąveikos modelis, apimantis adhezinę tampriai plastinę sąveiką. Sąveikos istorija yra nurodyta pagal atitinkamus S-L-Y-U-A-D taškus (2.4 paveikslas). Dalelė, nutolusi atstumu $a_{F=0}$, pradeda artėti prie paviršiaus pradiniu greičiu v_0 papildomai veikiant adhezijos traukai. Dalelės judėjimas link paviršiaus bei normalinės apkrovimo jėgos išraiškos aprašytos Tomas (2004). Dalelė pradeda judėti nuo atitinkamo atstumo h_S , priartėdama prie paviršiaus pradiniu greičiu v_0 . Dalelių sąveika prasideda, kai judėdama vakuume pradiniu greičiu v_0 dalelė priartėja prie sąveikaujamo paviršiaus atstumu h_S . Adhezijos jėga, veikianti dalelę atstumu h_S , apskaičiuojama formule (2.4).

Kai dalelė pasiekia sąveikaujamą paviršių, prasideda kontaktas. Esant adhezinėi tampriai sąveikai, normalinė jėga apkrovimo metu apskaičiuojama pagal formulę (2.5). Didėjant normalinei apkrovai, adhezinė tampri sąveika esant mikrotakumo įtempiui p_f pasiekia takumo ribą. Dalelei pasiekus poslinkio reikšmę atitinkančią takumo ribą, prasideda adhezinė tampriai plastinė sąveika. Takumo ribą nurodo taškas Y. Tampriai plastinis deformavimasis apkrovimo metu atitinka netiesinę funkciją Y-U.

Dalelės-pagrindo sąveikos jėga apima trauką bei stūmą. Sąveikaujantys paviršiai laikomi glotniais, t. y. nepaisant paviršiaus šiurkštumo, sferinis paviršius sąveikos metu tampa plokščias. Kontakto geometrija laikoma apytiksle, sutinkant su Hertz teorija. Apskritas kontakto plotas $A = \pi \cdot r_c^2$ yra charakterizuojamas kontakto spinduliu r_c , siejama su poslinkiu h . Tamprus Hertz kontakto slėgio $p_{el}(r)$ paskirstymas turi elipsės charakterį ir yra apibrėžiamas pagal maksimalią

reikšmę p_{max} kontakto centre, kuris tampa takumo pradžios centru. Charakterizuojant takumą, kontakto paviršius laikomas atskirtu.



2.4 pav. Adhezinė tampriai plastinė sąveika.

Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h

Fig. 2.4. Adhesive elastic-plastic interaction. Normal force F^N versus displacement h

Apskritos platinės sritys spindulio $r_{cy} \leq r_c$ plotas yra A_{pl} , taip pat kaip žiedo pavidalo tamprios sritys plotas lygus A_{el} . Idealaus plastiškumo atveju kontakto takumo įtempis platinėje srityje yra pastovus bei apribotas mikrotakumo įtempio p_f . Paprastai mikrotakumo įtempis p_f yra išreiškiamas žinomu medžiagos takumo įtempio σ_y , taikant išraišką:

$$p_f = C_y \cdot \sigma_y, \quad (2.7)$$

čia σ_y , remiantis vienašiu gniuždymu arba tempimu, yra medžiagos takumo arba įtempio parametras. Teoriškai formulė (2.7) galėtų būti paaiškinta, remiantis vientiso kūno teorija (iš kraštinių sąlygų susiejant kontakto slėgio ribas su takumo arba įtempio kriterijais). Koeficientas C_y kinta ribose tarp 1,1 ir 3,0 (Johnson 1985). Koeficiento $C_y(\nu)$ priklausomybę nuo Puasono koeficiento ν yra paaiškinęs Brizmer *et al.* 2007.

Mikrotakumo įtempio p_f bei ultrasmulkių neorganinių ar organinių miltelių, gaunamų apdorojimo įranga, reikšmė paprastai nežinoma, todėl netiesioginiai, eksperimentais pagrįsti skaičiavimai gali būti detalizuoti (Antonyuk *et al.* 2006).

Tampriai plastinės stūmos jėga yra gaunama, integruojant nupjauto pavidalo formos kontakto slėgio profilį. Integravimo rezultatai galėtų būti apskaičiuoti, įvedant bedimensį tampriai plastinį kontakto ploto koeficientą κ_A , kuris parodo dalelės plastinio kontakto ploto A_{pl} ir suminio deformavimo kontakto ploto A santykį. Koeficientas κ_A išreiškiamas ir poslinkio nariais (Tomas 2007):

$$\kappa_A(t) = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cdot \frac{A_{pl}}{A} = 1 - \frac{1}{3} \sqrt[3]{\frac{h_y}{h(t)}}. \quad (2.8)$$

Suminį kontakto plotą galima apskaičiuoti:

$$A = A_{pl} + A_{el}. \quad (2.9)$$

Mažiausia koeficiento reikšmė $\kappa_A = 2/3$ atitinka visiškai tamprios sąveikos deformavimąsi $A_{pl} = 0$. Viršutinė riba $\kappa_A = 1$ atitinka visiškai plastinę sąveiką ($A_{pl} = A$). Dalelės kontakto metu įvertinama adhezijos jėga F_{H0} , prieš tai įvertinama trumpo nuotolio dalelių sąveika. Remiantis Tomas (2001a) yra taikoma apvalios kontakto srities tarp suplotų lygių dalelių paviršių efektyvioji trauka, kuri apibūdinama Van der Valso slėgiu (Tomas 2004):

$$p_{vdW} = C_H / 6 \cdot \pi \cdot a_{F=0}^3. \quad (2.10)$$

Kontakto metu įvertinamas bedimensis koeficientas κ_p , kuris laikomas plastiniu stūmos koeficientu. Jis aprašo Van der Valso traukos slėgio p_{vdW} bei dalelės mikrotakumo įtempio stūmos konstantos santykį (Tomas 2004):

$$\kappa_p = p_{vdW} \cdot p_f^{-1}. \quad (2.11)$$

Standžiam kontaktui šis plastinis stūmos koeficientas yra be galo mažas, $\kappa_p \approx 0$, tuo tarpu minkštai sąveikai $\kappa_p \rightarrow 1$.

Netiesinė adhezinės tampriai plastinės sąveikos jėga, taikoma apkrovimo metu viršijus takumo ribą atitinkantį tašką Y, yra apibūdinama:

$$F^N(t) = \pi \cdot R_{eff} \cdot p_f \cdot (\kappa_A - \kappa_p) \cdot h(t) - F_{H0}. \quad (2.12)$$

Formulėje (2.11) minėtą κ_p narį galima aprašyti taikant Hamakerio konstantą (Tomas 2004):

$$\kappa_p = \frac{C_{H,sls}}{6 \cdot \pi \cdot p_f \cdot a_{F=0}^3}, \quad (2.13)$$

čia κ_A – tampriai plastinės sąveikos ploto koeficientas, bedimensis dydis, κ_p – plastinis stūmos koeficientas.

Poslinkį, atitinkantį takumo ribą h_Y , galima apskaičiuoti pagal formulę (Tomas 2004):

$$h_Y = R_{eff} \cdot \left[\frac{3 \cdot \pi \cdot p_f \cdot (\kappa_A - \kappa_p)}{4 \cdot E_{eff}} \right]^2. \quad (2.14)$$

Kontakto metu, dalelei pasiekus poslinkį h_U , prasideda nukrovimo procesas. Remiantis eksperimentais, kurie buvo atlikti statikoje su ultrasmulkia dalele (Tomas 2007), priimama, jog nukrovimas dinamikoje taip pat yra tamprus:

$$F^N(t) = \frac{4}{3} \cdot E_{eff} \cdot \sqrt{R_{eff}} \cdot (h(t) - h_A(h_U))^{3/2} + \Delta F(h_U) - F_{H0}, \quad (2.15)$$

čia ΔF – jėgų skirtumas, h_U – maksimalus poslinkis, h_A – atitrūkimo poslinkis.

Dalelė, pasiekusi adhezijos ribą h_A taške A, atsiskiria didėjant atstumui tarp paviršių. Adhezinės tamprios sąveikos metu dalelės kontaktas baigiasi esant poslinkiui $h_A = 0$. Tuo tarpu adhezinės tampriai plastinės sąveikos metu kontaktas baigiasi, kai poslinkis $h_A > 0$. Šiuo atveju dalelė nuo sąveikaujamo paviršiaus atsiskiria deformuota, su liekamuoju poslinkiu, atitinkančiu poslinkį h_A (tą sąlygoja plastinės dalelės savybės). Dalelės nukrovimo normalinės jėgos formulėje (2.15) apibrėžtas poslinkis h_A taške A suvokiamas kaip priklausomybė nuo maksimalaus poslinkio $h_A(h_U)$. Adhezijos riba aprašoma formule:

$$F^N(h_A) = -\pi \cdot R_{eff} \cdot \kappa_p \cdot p_f \cdot h_A - F_{H0}. \quad (2.16)$$

Adhezijos riba vadinama tokia riba, prie kurios pasiekama didžiausia teoriškai galima adhezinė trauka, atitinkanti jėgą F_A , esant poslinkiui h_A . Ši riba jėgos ir poslinkio diagramoje (2.4 paveikslas) žymima tašku A. Ji nurodo dalelės atsiskyrimo pradžią bei kontakto pabaigą.

Svarbu tai, jog sąveika nenutrūksta, dalelė toliau yra veikiamą adhezijos jėgų. Dalelės atsiskyrimą galima aprašyti šia išraiška:

$$F^N(t) = -\frac{F_{H0} \cdot a_{F=0}^2}{(a_{F=0} + h_A - h(t))^2} - \frac{\pi \cdot R_{eff} \cdot \kappa_p \cdot p_f \cdot h_A}{(a_{F=0} + h_A - h(t))^3} \cdot a_{F=0}^3. \quad (2.17)$$

Skirtingai nei adhezinėje tamprioje sąveikoje, sąveikos atstumas atsiskiriant yra ilgesnis dydžiu h_A .

2.3. Energijos sklaidos mechanizmų sudarymas

Darbe siekiama sudaryti adhezijos bei fiziškai korektiško klampaus slopinimo energijos sklaidos mechanizmus. Sudaryti sklaidos mechanizmai susieti su adheazine tampria bei tampriai plastine sąveikomis.

2.3.1. Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su adhezija

Pirmame skyriuje buvo aptarta, jog taikant adhezinį tamprų DMT modelį, dalelės normalinės sąveikos metu pradinis jos greitis v_0 bei greitis, jai atšokus į pradinę padėtį v_D , yra lygūs. Priežastis – sąveikos metu neįvyksta kinetinės energijos sklaida. Tačiau žinoma, jog adhezinės dalelės sąveika apima ne tik atšokimą, bet ir sulipimą. Be to, sulipimo procesas įvyksta sąveikos metu esant energijos sklaidai – dalelei neatšokus į pradinę padėtį. Todėl, siekiant įvertinti dalelės sulipimą bei aprašyti sulipimo procesą, darbe sudaromas teorinis energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su adhezija. Taip pat sudarytas teorinis sąveikos modelis, apimantis sukurtą mechanizmą.

Sudarant energijos sklaidos mechanizmą, absorbuota energija yra charakterizuojama dalelės sąveikos metu atliktu mechaniniu darbu $W_{tot} = \int F^N(h)dh$. Mechaninis darbas yra apskaičiuojamas normalinės jėgos ir poslinkio priklausomybės formulėmis (2.4, 2.5):

$$W_{tot} = \int_{-a_{F=0}}^0 F^N(h)dh + \int_0^{h_U} F^N(h)dh + \int_{h_U}^0 F^N(h)dh + \int_0^{-a_{F=0}} F^N(h)dh \quad (2.18)$$

ir yra lygi plotui tarp priartėjimo, apkrovimo, nukrovimo ir atsiskyrimo kreivių. Neįvertinus energijos sklaidos, adhezinės tamprios sąveikos mechaninis darbas paprastai yra lygus nuliui $W_{tot} = 0$. Kai sąveikos metu įvyksta energijos sklaida, mechaninis darbas yra lygus

$$W_{tot} = W_{diss,abs}, \quad (2.19)$$

čia $W_{diss,abs}$ yra energijos absorbcijos kiekis, J.

Dėl adhezijos poveikio išsklaidytas energijos kiekis yra apskaičiuojamas pagal Tomas (2007). Šis energijos sklaidos kiekis įvertinamas kaip adhezijos darbas, reikalingas atskirti du sąveikaujančius paviršius, neįvertinus jų deformavimosi ($h_A = h_U$). Adhezinės tamprios sąveikos metu $h_A = 0$, todėl išsklaidytos energijos kiekis apskaičiuojamas išraiška:

$$W_{diss,adh} = \int_0^{-\infty} F^N(h)dh = - \int_0^{-\infty} \frac{F_{H0} \cdot a_{F=0}^2}{(a_{F=0} - h)^2} dh. \quad (2.20)$$

Išintegravus pastarąją lygtį, su adhezija siejamas energijos sklaidos kiekis yra:

$$W_{diss,adh} = F_{H0} \cdot a_{F=0}. \quad (2.21)$$

Dalelės sąveikos metu energijos sklaida turi būti tolygi. Be to, ši sklaida apkrovimo-nukrovimo metu turi histerezės charakterį.

Sudarant energijos sklaidos mechanizmą yra žinomas išsklaidytos energijos kiekis $W_{diss,adh}$, tačiau energijos praradimas sąveikos metu bei matematinis šio proceso aprašymas yra nežinomi.

Dalelės sąveikos metu išsklaidytą energiją siekiama paskirstyti. Priimama, jog energijos sklaida $W_{diss,adh}$ sąveikos metu bus išsklaidyta dalelei atšokant, t. y. nukrovimo kelio tarp h_U ir h_A bei atsiskyrimo kelio tarp h_A ir $-h_D$ metu. Energijos sklaidos kiekį atitinkanti jėga paskirstoma:

$$F_{diss,adh,W} = \frac{2 \cdot W_{diss,adh}}{(a_{F=0} + h_U - h_A)} = \frac{2 \cdot F_{H0} \cdot a_{F=0}}{(a_{F=0} + h_U - h_A)}, \quad (2.22)$$

čia faktorius 2 yra integravimo jėgos-poslinkio koreliacijos $F^N \propto a^{-2}$ rezultatas. Svarbu pažymėti, kad adhezinėje tamprioje sąveikoje $h_A = 0$. Tuo tarpu sudaryta formulė (2.22) įvertina ir adhezinę tampriai plastinę sąveiką, kur $h_A > 0$, todėl formulėje paliekamas h_A narys. Sąveikoje be deformavimo $h_U = 0$ (2.5 paveikslas), įvertinta Van der Valso jėga veikia trumpo nuotolio atstumu nuo h_A iki $-h_D$, kur charakteringa sąveikos riba yra $h_D \equiv a_{F=0}$. Svarbu pažymėti, kad jėga $F_{diss,adh,W}$ priklauso nuo maksimalaus poslinkio h_U , be to nukrovimo bei atsiskyrimo metu nekinta. Sudėjus adhezijos jėgas $F_{diss,adh,W}$ ir F_{H0} , gaunama dalelės atitrūkimo taške A adhezijos jėga F_A . Sudarytas netiesinis sklaidos mechanizmas charakterizuojamas normalizuotu poslinkiu:

$$\bar{h}(t) = \begin{cases} \frac{h_U - h(t)}{h_U - h_A}, & h_U \geq h(t) \geq h_A \\ 1, & h_A \geq h(t) \geq -h_D \end{cases}. \quad (2.23)$$

Prasidėjus dalelės nukrovimui, normalizuotas poslinkis $\bar{h}(t = t_U) = 0$, tuo tarpu jos kontaktui pasibaigus $\bar{h}(t = t_A) = 1$, o sąveikai pasibaigus $\bar{h}(t = t_D) = 1$. Ši funkcija sąveikos metu leidžia gauti galutinę išsklaidytą energiją, siejamą su adhezija. Normalizuotas poslinkis įvertinamas skaičiuojant dalelės normalinę jėgą F^N bei atliekant normalinės jėgos integravimą tarp h_U ir $-h_D$. Energijos sklaida atitinkamai paskirstyta nukrovimo ir atsiskyrimo sąveikos metu. Kaip ir formulėje 2.22, esant adhezinei tamptariai plastinei sąveikai, įvertinamas dalelės poslinkio narys h_A . Iš esmės ši energija yra proporcinga poslinkiams nuo h_U iki h_A ir nuo h_A iki $-h_D$. Svarbu pažymėti, jog šiame skyriuje sudarytose formulėse, sprendžiant dinaminį uždavinį, maksimalus poslinkis h_U nėra konstanta ir priklauso nuo dalelės pradinio greičio v_0 . Rezultate, kintančios laike sklaidos jėgos išraiška:

$$F_{diss}(t) = F_{diss,adh}(t) = F_{diss,adh,W} \cdot \bar{h}(t). \quad (2.24)$$

Nukrovimo ir atsiskyrimo metu normalinė jėga mažėja dėl energijos sklaidos, kurią įvertina $F_{diss,adh}(t)$ jėgos narys.

Tiriant su adhezija siejamo energijos sklaidos mechanizmo veikimą, pasirenkamas adhezinės tamptrios sąveikos metu išsklaidytos energijos tyrimas. Taip yra todėl, kad tokios sąveikos metu bendras išsklaidytos energijos kiekis yra siejamas tik su adhezija (2.5 paveikslas). Pritaikius sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, normalinė jėga nukrovimo metu gali būti išreikšta:

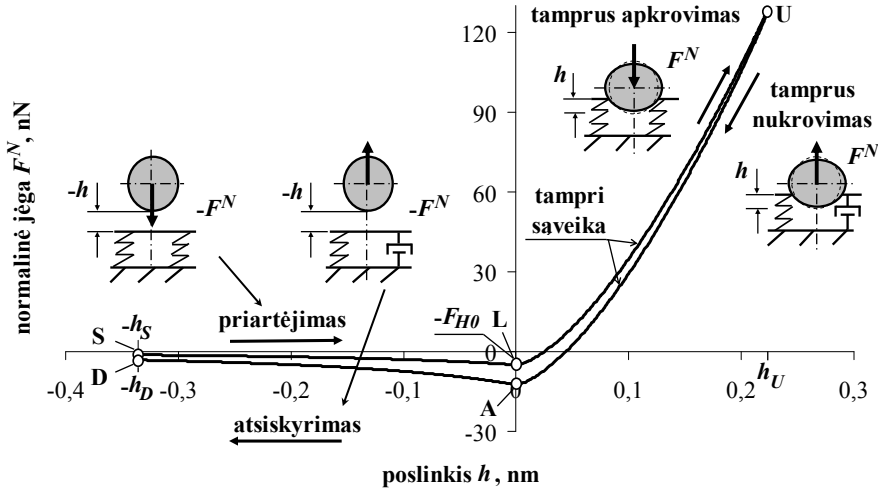
$$F^N(t) = F_{Hertz}^N(t) - F_{H0} - F_{diss,adh,W} \cdot \bar{h}(t). \quad (2.25)$$

Atsiskyrimo jėga tarp poslinkių h_A ir $-h_D$ yra nustatoma panašiu būdu, įvertinant adhezijos jėgą F_{H0} ir sklaidos dėl adhezijos komponentę $F_{diss,adh,W}$:

$$F^N(t) = F_H(h) = -\frac{(F_{H0} + F_{diss,adh,W}) \cdot a_{F=0}^2}{(a_{F=0} - h(t))^2}. \quad (2.26)$$

Formulės (2.4, 2.5) bei (2.25, 2.26) aprašo esminį adhezinės tamptrios sąveikos modelį, įvertinant energijos sklaidos mechanizmą. Priimama, jog apkrovimo metu jėgos narys $F_{diss,adh}(t)$ virsta nuliu. Taip įvyksta, nes apkrovimo metu, tai-

kanč formulę (2.24), kiekviename apkrovimo laiko žingsnyje poslinkis h yra tariamai lygus $h = h_U$.



2.5 pav. Adhezinė tampri sąveika. Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h . Su adhezija siejama energijos sklaida

Fig. 2.5. Adhesive elastic interaction. Normal force F^N versus displacement h . Energy dissipation related to adhesion

Adhezinės tamprios sąveikos metu, veikiant vieninteliam su adhezija siejamam sklaidos mechanizmui, absorbcijos energija lygi adhezijos darbui ir apskaičiuojama išraiška:

$$W_{diss,abs} = W_{adh,work} = \int_{-a_{F=0}}^{h_U} F^N dh. \quad (2.27)$$

Ištačius į formulę (2.27) normalinės jėgos F^N formulę, dalelės priartėjimo (2.4), apkrovimo (2.5), nukrovimo (2.25) ir atsiskyrimo (2.26) metu bei atlikus aritmetinius veiksmus lieka nariai, įvertinantys su adhezija siejamą energijos sklaidos mechanizmą:

$$W_{adh,work} = - \int_{h_U}^0 \frac{2 \cdot W_{diss,adh}}{(a_{F=0} + h_U)} \cdot \frac{h_U - h}{h_U} dh - \int_0^{-a_{F=0}} \frac{a_{F=0} + h_U}{(a_{F=0} - h)^2} \cdot a_{F=0}^2 dh. \quad (2.28)$$

Suintegravus narius formulėje (2.28), adhezijos darbas yra lygus:

$$W_{adh, work} = W_{diss, adh} \cdot \frac{h_U}{a_{F=0} + h_U} + W_{diss, adh} \frac{a_{F=0}}{a_{F=0} + h_U}. \quad (2.29)$$

Adhezinės tamprios sąveikos metu, veikiant vieninteliu sudarytam su adhezija siejamos energijos sklaidos mechanizmui, absorbuota energija lygi adhezijos darbui:

$$W_{diss, abs} = W_{adh, work} = W_{diss, adh} \cdot \left(\frac{h_U}{a_{F=0} + h_U} + \frac{a_{F=0}}{a_{F=0} + h_U} \right). \quad (2.30)$$

Galutinė formulės (2.30) išraiška:

$$W_{diss, abs} = W_{diss, adh} = const. \quad (2.31)$$

Su adhezija siejamos energijos sklaidos formulė (2.30) rodo, kaip sąveikos metu pasiskirsto energijos sklaida. Norint parodyti, kaip taikant sudarytą energijos sklaidos mechanizmą išsklaidoma energija, formulėje (2.30) skliaustuose palikti du nukrovimą ir atsiskyrimą atitinkantys santykiai, kurių suma akivaizdžiai yra 1. Nesvarbu, kokio dydžio bus maksimalus poslinkis h_U , skliaustuose bendra suma išlieka lygi 1, t. y. sąveikos pabaigoje išsklaidytos energijos kiekis bus lygus $W_{diss, adh}$. Apibendrinant galima teigti, kad adhezinėi tampriai sąveikai pasibaigus, kai dalelė sąveikos metu atsoka į pradinę padėtį, su adhezija siejamas išsklaidytas energijos kiekis išlieka toks pat, nepriklausomai nuo pradinio dalelės greičio ir yra *const*. Tai parodo galutinė formulės (2.30) išraiška (2.31).

Reikėtų pažymėti, kad 2.5 paveiksle uždaras plotas tarp priartėjimo, apkrovimo, nukrovimo ir atsiskyrimo kreivių lygus adhezijos darbui, kuris atitinka išsklaidytą energiją adhezinės tamprios sąveikos metu. Minėtas adhezijos darbas apskaičiuojamas pagal 2.21 formulę. Svarbu tai, kad esant tampriam kontaktui išsklaidyta energija gaunama kaip pastovus dydis, tuo tarpu tampriai plastiniame kontakte poslinkis h_A yra didesnis už nulį, todėl išsklaidytos energijos kiekis priklauso nuo maksimalaus poslinkio h_U bei pradinio greičio v_0 .

Kadangi dalelę veikianti adhezija gali būti aprašoma ne vien tik Van der Valso jėgomis, daroma prielaida, jog adhezijos poveikis galėtų būti apibūrinamas siejamos su adhezija energijos sklaidos bedimensiu koeficientu k_H :

$$W_{diss, adh} = k_H \cdot F_{H0} \cdot a_{F=0}. \quad (2.32)$$

Daroma prielaida, jog koeficientas k_H gali įvertinti energijos sklaidą, siejamą su įvairiais adhezijos efektais, aptartais 1.1.1. skyrelyje: paviršiaus ir lauko jėgomis bei medžiagos tilteliais tarp paviršių.

$$k_H = \frac{\sum_{n=1}^i W'_{diss,adh}}{F_{H0} \cdot a_{F=0}} = \frac{(F_{H0} \cdot a_{F=0} + W_{electrostatic,adh} + W_{magnetic,adh} + W_{liquid,bridge,adh} + \dots W_{adh,i})}{F_{H0} \cdot a_{F=0}}. \quad (2.33)$$

Formulėje (2.33) įvertinami su adhezija susiję sklaidos mechanizmai. Įvertinama didesnė išsklaidyta energija, taikant sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su adhezija (2.24).

2.3.1.1. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adhezine tampria sąveika

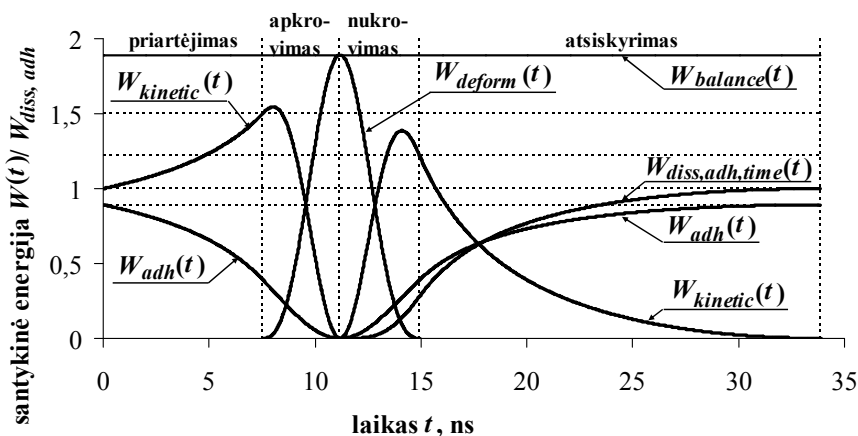
Adhezinės tamprios sąveikos modelis yra aprašomas, įvertinus sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, kuris siejamas su adhezija. Skirtingai nei DMT modelis, sudarytas modelis įvertina adhezijos poveikį dalelei artėjant prie sąveikaujamo paviršiaus bei dalelės atsiskyrimo metu. Įvertinus energijos sklaidą, susidaro histerezė S-L-U-A-D (2.5 paveikslas). Esant adhezinei tampriai sąveikai, histerezės plotas nepriklauso nuo pradinio greičio, o išlieka pastovus ir atitinka išsklaidytą energiją. Be to, dalelė taške A atitrūksta su didesne traukos jėga, nei deformavimosi pradžioje taške L, t. y. $|F_A| > |F_L|$.

Atlikdamas fizinį eksperimentą atominiu jėgos metodu, mokslininkas Jonson (2003) pastebėjo, jog nukrovimo metu adhezijos įtaka stiprėja, o atitrūkimo jėgos (pull-off force) absoliutinė reikšmė atsiskyrimo metu yra didesnė, nei pradinė adhezijos jėgos F_{H0} absoliutinė reikšmė. Tai pastebėjo ir Feng *et al.* (2009), atlikę skaitinį eksperimentą BEM metodu. Minėta tendencija išlieka ir atsiskyrimo proceso metu A-D.

Sudarytas energijos sklaidos mechanizmas pavaizduotas 2.6 paveiksle, pateikiant energijos balansą. Paveikslas nubraižytas pagal 3.1 ir 3.2 lentelių duomenis, taikant formules (2.4, 25) ir (2.25, 2.26) bei sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su adhezija. Energijos sklaidos bedimensinis koeficientas $k_H = 1$. Dalelės sąveikos metu yra aprašomos energijos, paveiksle parodoma bendra jų išraiška $W(t)$. Kinetinė energija pažymėta $W_{kinetic}(t)$, tampraus deformavimosi energija pažymėta $W_{deform}(t)$, adhezijos energija W_{adh} , tuo tarpu adhezijos energija, siejama su sudarytu energijos sklaidos mechanizmu $W_{diss,adh,time}(t)$. Balanso energija $W_{balance}$ atitinka visų minėtų energijų sumą $W_{balance}(t) = W_{kinetic}(t) + W_{deform}(t) + W_{adh}(t) + W_{diss,adh,time}(t)$ kiekvienu laiko mo-

mentu t . Visos šios sumuojamos energijos, kurių bendra išraiška $W(t)$, pateikiamos kaip santykis su energijos sklaidos $W_{diss,adh} = const$ reikšme. Ši absorbcijos energija apskaičiuojama pagal formulę (2.21) ir atitinka dalelės adhezinės tamprios sąveikos metu atliktą adhezijos darbą. Sąveikos metu nukrovimo pradžioje energijos sklaida $W_{diss,adh,time}(t = t_U) = 0$, tuo tarpu sąveikos pabaigoje $W_{diss,adh,time}(t = t_D) = W_{diss,adh} = F_{H0} \cdot a_{F=0}$ (grafike santykinė reikšmė $W(t)/W_{diss,adh}$ atitinka 1, šiuo atveju $W(t)$ suprantama kaip $W_{diss,adh,time}(t)$).

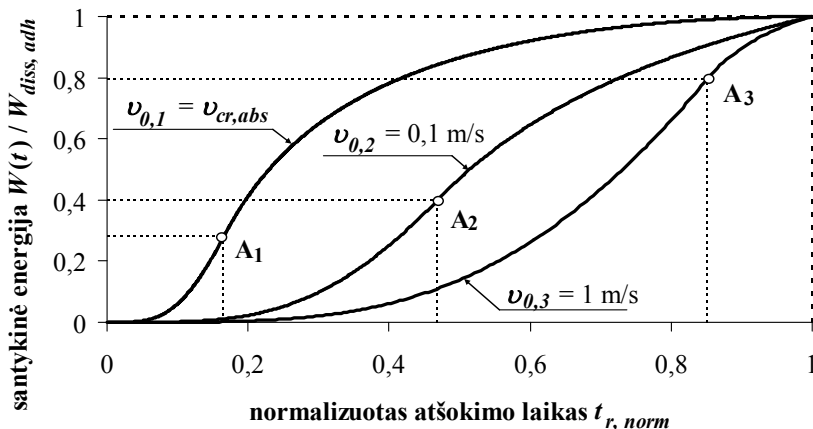
Tiriant dinaminę sąveiką, svarbu palyginti kinetinę $W_{kinetic}(t)$ ir išsklaidytą energijas $W_{diss,adh,time}(t)$. Paveikslas nubraižytas, kai dalelė pradiniu laiko momentu juda pradiniu greičiu, atitinkančiu kritinį sulipimo greitį $v_{cr,abs}$. Sąveikai pasibaigus, atsistatymo koeficientas bus lygus nuliui $e = 0$. Šiuo atveju pradinis kinetinės energijos kiekis bus lygus išsklaidytai energijai: sąveikos metu visa kinetinė energija išsklaidoma. Pastebima, jog dalelė atšoks į pradinę padėtį tik tada, kai pradinis kinetinės energijos kiekis bus didesnis, nei išsklaidytos.



2.6 pav. Energijos balansas
Fig. 2.6. The balance of energy

Sąveikos metu esant įvairiems pradiniam greičiams energijos sklaidos pasiskirstymas pavaizduotas 2.7 paveiksle. Energijos sklaidos, siejamos su adhezija, kitimas sąveikos metu parodytas dalelės nukrovimo ir atsiskyrimo metu. Normalizuotas atšokimo laikas $t_{r,norm}$ apskaičiuotas pagal sudarytą formulę:

$$t_{r,norm} = \frac{t - t_U}{t_D - t_U}. \quad (2.34)$$



2.7. pav. Santykinės energijos $W(t)/W_{diss,adh}$ priklausomybė nuo normalizuoto atšokimo laiko $t_{r,norm}$

Fig. 2.7. Relative energy $W(t)/W_{diss,adh}$ versus normalised rebound time $t_{r,norm}$

Dalelės nukrovimui prasidėjus, normalizuotas laikas $t_{r,norm}(t = t_U) = 0$, tuo tarpu sąveikai pasibaigus $t_{r,norm}(t = t_D) = 1$.

2.7 paveiksle matoma, kaip sklaidos energija pasiskirsto atšokimo metu, esant skirtingiems pradiniais greičiams $v_0 = v_{cr,abs}; 0,1; 1$ m/s. Taškai A_1 , A_2 ir A_3 atitinka dalelės atsiskyrimo pradžią. Energijos sklaidos pasiskirstymas sąveikos metu priklauso nuo pradinio greičio. Didinant pradinį greitį, didesnioji atšokimo laiko dalis teks nukrovimui, todėl nukrovimo metu, lyginant su dalelės atsiskyrimo procesu, energijos sklaida bus didesnė. Visos kreivės turi vienodą tendenciją – sąveikos pabaigoje išsklaidytas energijos kiekis yra vienodas ir lygus $W_{diss,adh}$. Taigi, kaip matyti iš 2.7 paveikslo, išsklaidytos energijos pasiskirstymo laike pobūdis priklauso nuo pradinio greičio, tuo tarpu išsklaidytas energijos kiekis – nepriklauso.

Kritinis sulipimo greitis. Adhezinės dalelės dinaminė sąveika apima ne tik atšokimą, bet ir sulipimą. Įvertinus kritinį sulipimo greitį, aprašomos dalelės sulipimo-atšokimo sąlygos:

$$v_{stick} < v_{cr} \leq v_D. \quad (2.35)$$

Dalelė atšoka į pradinę padėtį, kai jos pradinė kinetinė energija yra lygi arba didesnė už sąveikos metu išsklaidytą energijos kiekį. Darbe pradinis dalelės greitis atitinka jos greitį taške S (2.5 paveikslas), t. y. $v_0 = v_S$. Žinant sąveikos metu prarastą energijos kiekį bei pritaikius energijos tvermės dėsnį, galima apskaičiuo-

ti kritinį dalelės sulipimo greitį. Kinetinės energijos skirtumas sąveikos pradžioje ir pabaigoje prilyginamas prarastam energijos kiekiui:

$$\frac{m_{eff}}{2} \cdot (v_0^2 - v_D^2) = W_{diss, abs} . \quad (2.36)$$

Supaprastinus pastarąją formulę, dalelės pradinio v_0 bei atšokimo v_D greičių kvadratų skirtumas yra:

$$v_0^2 - v_D^2 = \frac{2 \cdot W_{diss, abs}}{m_{eff}} . \quad (2.37)$$

Efektyvioji masė:

$$m_{eff} = \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right)^{-1} . \quad (2.38)$$

Dalelei sąveikaujant su puserdve, dalelės masė lygi efektyviajai masei:

$$m_{eff} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \rho \cdot R_{eff}^3 . \quad (2.39)$$

Įvertinus dalelės sulipimą, pažymima, jog atšokimo greitis $v_D = 0$. Šiuo atveju pradinis greitis v_0 vertinamas kaip kritinis sulipimo greitis:

$$v_{cr} = v_0 . \quad (2.40)$$

Kritinio sulipimo greičio v_{cr} išraiška (Tomas 2004; Brilliantov ir Pöschel 2005) yra tokia:

$$v_{cr} = \sqrt{2 \cdot \frac{W_{diss, abs}}{m_{eff}}} . \quad (2.41)$$

Kai pradinis greitis mažesnis už kritinį sulipimo greitį, dalelė neatšoka į pradinę padėtį. Tada atsistatymo koeficientas lygus nuliui, $e = 0$.

Sklandos energija gali būti skaičiuojama kaip suminis dydis, kuriuo įvertinama įvairios prigimties kinetinės energijos sklaida:

$$W_{diss,adh} = \sum_{n=1}^i W_{diss,adh,i} = k_H \cdot F_{H0} \cdot a_{F=0} \cdot \quad (2.42)$$

Pagrindiniai veiksniai, lemiantys kinetinės energijos sklaidą esant ultrasmulkios dalelės sąveikai, yra: adhezija, tampriai plastinis kontaktas ir klampus slopinimas. Jei nagrinėjama adhezinė tampri sąveika ir energijos sklaida įvyko tik dėl adhezijos ($W_{diss,abs} = W_{diss,adh}$), tada taikant energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmą, išsklaidyta energija gali būti apibūdinta koeficientu k_H . Tokiu atveju formulės (2.41) išraiška būtų:

$$v_{cr,el} = \sqrt{2 \cdot \frac{k_H \cdot F_{H0} \cdot a_{F=0}}{m_{eff}}} \quad (2.43)$$

Didinant koeficientą k_H yra įvertinama didesnė energijos sklaida, tuo pačiu gaunamos didesnės kritinio sulipimo greičio v_{cr} reikšmės.

Ties kritinio sulipimo greičio reikšme atsistatymo koeficientas yra lygus nuliui. Kritinis sulipimo greitis apskaičiuojamas, kai atšokusi dalelė pasiekia pradinę padėtį, o jos atšokimo greitis $v_D = 0$.

Atsistatymo koeficientas. Vienas iš svarbių dinaminių rodiklių, apibūdinančių sąveikos metu išsklaidytą energiją, yra atsistatymo koeficientas, žymimas e . Atsistatymo koeficientą galima apskaičiuoti formule (1.27).

Įvertinus sulipimą, atsistatymo koeficiento e išraiška (1.27) įvedama į formulę (2.37). Sudaroma atsistatymo koeficiento priklausomybė nuo energijos sklaidos:

$$e = \sqrt{1 - \frac{1}{v_0^2} \cdot \frac{2 \cdot W_{diss,abs}}{m_{eff}}} \quad (2.44)$$

Įvertinus energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmą ir kritinį sulipimo greitį v_{cr} , atsistatymo koeficientą galima apskaičiuoti formule:

$$e = \sqrt{1 - \frac{v_{cr}^2}{v_0^2}} \quad (2.45)$$

Pastarąją formulę taip pat paminėjo Thornton ir Ning (1998), remdamiesi JKR modeliu. Darbe, remiantis DMT modeliu, sudaryta formulė (2.45) sutapo su formule (1.29), kuri išvesta remiantis JKR. Sąveikos metu kinetinės energijos sklaida įvyko tik dėl adhezijos (abu modeliai įvertina adhezinę tamprią sąveiką).

Adhezinės tamprios sąveikos metu, esant skirtingiems pradiniais greičiams, išsklaidytos energijos kiekis nekinta. Tai vienija abu modelius.

Sudarytame modelyje, kuriame įvertintas energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmas, sklaidos kiekis yra didesnis. Tai būdinga modeliuojamai ultrasmulkiai dalelei (remiantis DMT modeliu). Su adhezija siejama energijos sklaida gali būti padidinta koeficientu k_H , įvertinant kitus adhezijos mechanizmus (skysčio tiltelį ir pan.).

2.3.1.2. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adhezine tampriai plastine sąveika

Su adhezija siejamas sudarytas energijos sklaidos mechanizmas pritaikomas esant adhezinėi, tampriai plastinei sąveikai. Sąveikos modelis aprašomas normalinės jėgos (2.4, 2.5, 2.12) formulėmis. Nukrovimas aprašomas normalinės jėgos išraiška, įvedus energijos sklaidą įvertinančią jėgą (2.24):

$$F^N(t) = \frac{4}{3} \cdot E_{eff} \cdot \sqrt{R_{eff}} \cdot (h(t) - h_A(h_U))^{1.5} + \Delta F(h_U) - F_{H0} - F_{diss,adh}(t). \quad (2.46)$$

Skirtingai nei 2.4 paveiksle, 2.8 paveiksle pavaizduota normalinės jėgos ir poslinkio priklausomybė, prieš tai įvertinus sudarytą su adhezija siejamos energijos sklaidos mechanizmą.

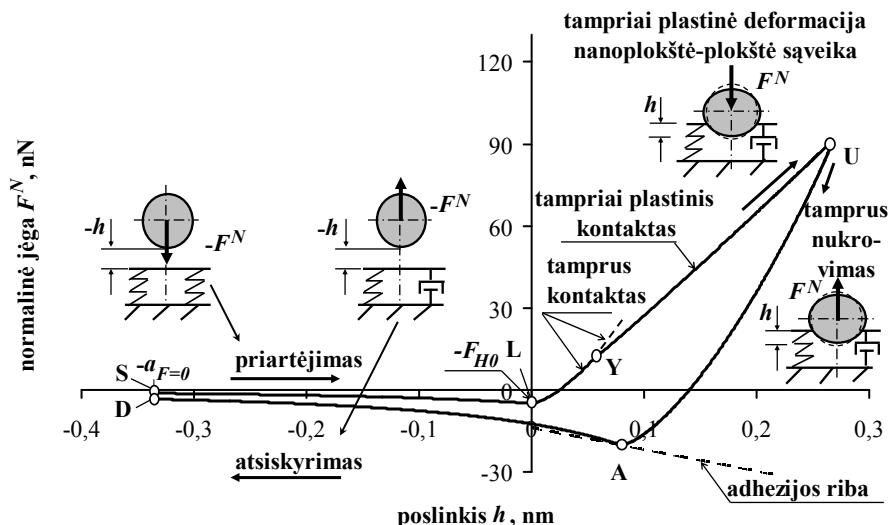
Iš 2.8 paveikslo matyti, jog nukrovimo metu padidėjus adhezijos ribai, dalelė atsiskiria esant žemesnei normalinės jėgos F_A reikšmei. Ši reikšmė pateikta neigiamoje normalinės jėgos skalėje. Įvertinus sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, dalelės normalinės jėgos priklausomybės nuo poslinkio histerezės plotas tapo didesnis. Be to, kad dalelė atšoktų, reikalingas didesnis pradinės kinetinės energijos kiekis.

Adhezijos riba priklauso nuo su adhezija siejamos energijos sklaidos, atitinkančios jėgą $F_{diss,adh,W}$ (formulė 2.22). Adhezijos ribą galima apskaičiuoti tokia išraiška:

$$F^N(h_A) = -\pi \cdot R_{eff} \cdot \kappa_p \cdot p_f \cdot h_A - F_{H0} - F_{diss,adh,W}. \quad (2.47)$$

Dalelė atsiskiria nuo pagrindo, kai pasiekia adhezijos ribą. Dalelės atsiskyrimą galima aprašyti formule, įvedant energijos sklaidą įvertinančią jėgą (2.24):

$$F^N(t) = -\frac{(F_{H0} + F_{diss,adh,W}) \cdot a_{F=0}^2}{(a_{F=0} + h_A - h(t))^2} - \frac{\pi \cdot R_{eff} \cdot \kappa_p \cdot p_f \cdot h_A}{(a_{F=0} + h_A - h(t))^3} \cdot a_{F=0}^3. \quad (2.48)$$



2.8. pav. Adhezinė tampriai plastinė sąveika. Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h . Energijos sklaida, susieta su adhezija ir tampriai plastiniu kontaktu

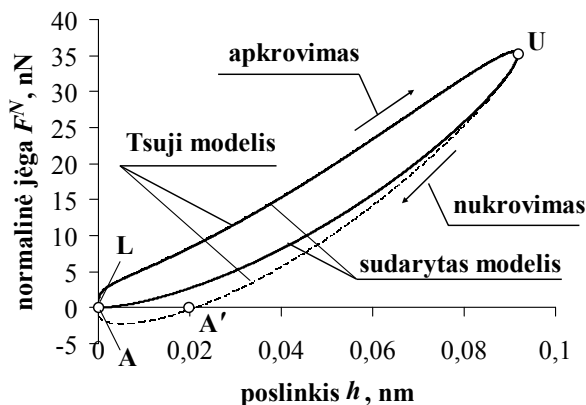
Fig. 2.8. Adhesive elastic-plastic interaction. Normal force F^N versus displacement h . Energy dissipation, related to adhesion and elastic-plastic contact

Taikant sudarytą su adhezija siejamą energijos sklaidos mechanizmą, esant adheziniai tampriai plastinei sąveikai, daroma prielaida, jog dalelei atsiskyrus su liekamuuoju poslinkiu h_A bei padidėjus atsiskyrimo atstumui, energijos sklaida dėl adhezijos poveikio taip pat padidėja. Taigi, lyginant su adheziniai tampriai sąveika, išsklaidyta energija yra didesnė: $W_{diss,abs,el-pl} > W_{diss,abs,el}$. Esant adheziniai tampriai plastinei sąveikai, kritinio sulipimo greičio reikšmė surandama, atlikus skaitinį eksperimentą.

2.3.2. Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su klampiu slopinimu

Įvertinus klampų slopinimą, kontakto metu dalelės normalinės jėgos priklausomybė nuo poslinkio atitiks histerezę, o kinetinės energijos sklaida priklausys nuo dalelės greičio. Pastebėta, jog taikant žinomus tampriai klampius modelius: Kuwabara ir Kono (1987), Brilliantov *et al.* (1996), Tsuji *et al.* (1992), kurie buvo taikyti tirti tampriam kontaktui be adhezijos, susidariusi histerezė apima neigiamą normalinę jėgą (Jasevičius *et al.* 2008). Tuo tarpu, neįvertinus neigiamų jėgų, dalelė taške A' atsiskirs su liekamuuoju poslinkiu.

Teigiama, jog liekamasis poslinkis susidaro tik esant tampriai plastiniam kontaktui, o klampiai tamprus kontaktas liekamajam poslinkiui įtakos neturi. Dėl prielaidų, jog kontakto metu esant klampiam slopinimui energijos sklaida apkraunant yra didesnė, nei nukraunant. Sukuriamas korektiškas modelis, kurį taikant nesusidaro liekamasis poslinkis, o esant tampriam neadheziniam kontaktui nesusidaro neigiama normalinė jėga (2.9 paveikslas).



2.9 pav. Klampiai tamprus kontaktas.

Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h

Fig. 2.9. Viscous elastic contact.

Normal force F^N versus displacement h

Normalinė jėga atsiskyrimo taške A kontakto metu priklauso nuo normalinės jėgos kitimo istorijos:

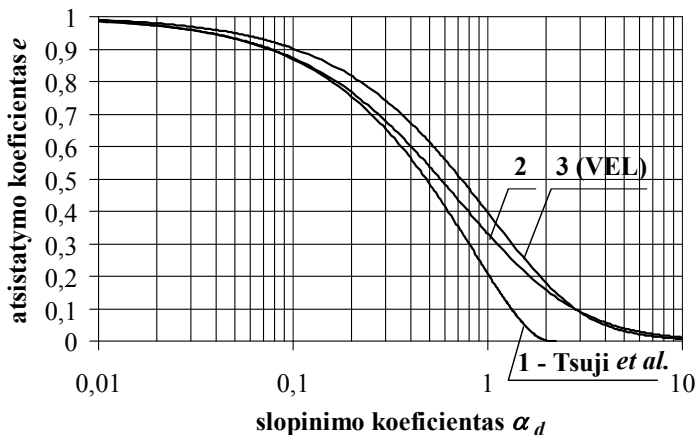
$$F_A = F^N(h_A). \quad (2.49)$$

Taikant sudarytą modelį (2.9 paveikslas), dalelė taške A atsiskiria be liekamojo poslinkio, o normalinė jėga atitinka stūmą.

2.10 paveiksle pateikiamos rekomendacijos, esant tampriam kontaktui be adhezijos, taikant klampaus slopinimo mechanizmą. Šiame paveiksle pavaizduotos Tsuji modelio atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo slopinimo koeficiento α_d rekomendacijos, prieš tai įvertinus neigiamas jėgas.

Papildomai nubraižytos dvi kreivės: 2 kreivė atitinka siūlomą Tsuji modelio modifikaciją, kai neįvertinama neigiama normalinė jėga ir dalelė atsiskiria su liekamuuoju poslinkiu; 3 kreivė atitinka siūlomą klampiai tamprų modelį, taikant sudarytą klampaus slopinimo mechanizmą, kai nesusidaro neigiama jėga ir liekamasis poslinkis (2.9 ir 2.10 paveikslai). Atlikus skaičiavimus, disertacijoje su-

daryta kreivė 3 bus laikoma VEL (angl. Viscoelastic Limit), ir atitiks atsistatymo koeficiento ribą, esant adhezinei klampiai tampriai sąveikai.



2.10 pav. Atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo slopinimo koeficiento α_d

Rekomendacijos: 1 – Tsuji *et al.* rekomendacija; 2 – darbe pasiūlytos rekomendacijos dalelei atsiskyrus su liekamuoju poslinkiu; 3 – darbe pasiūlytos rekomendacijos dalelei atsiskyrus be liekamojo poslinkio; 2 ir 3 – neigiamos normalinės jėgos neįvertinamos

Fig. 2.10. Recommendations of variations of coefficient of restitution e versus damping coefficient α_d : 1 – Tsuji *et al.* recommendations; 2 and 3 shown recommendations for particle detachment with (2) and without (3) residual displacement; 2 and 3 does not include the negative forces

2.10 paveiksle matyti, jog Tsuji modelis apima sulipimą (kai $\alpha_d > 2,2$) bei mažesnes atsistatymo koeficiento reikšmes. Sudaryto modelio kreivės 2 ir 3 įrodo, jog neįvertinus adhezijos poveikio, atsistatymo koeficientas bus $e > 0$, o dalelė atsöks į pradinę padėtį. 3 kreivės atsistatymo koeficiento e reikšmės, lyginant su 1 kreive, yra didesnės. Reikšmės didesnės ir už 2 kreivės reikšmes, kai $\alpha_d < 3$. Tuo tarpu, kai susikirtus 2 ir 3 kreivėms $\alpha_d > 3$, 3 kreivės atsistatymo koeficiento e reikšmės nežymiai sumažėja. Taigi, 3 kreivės rezultatai pateikti, kai nukrovimo metu energijos sklaida yra mažesnė, negu apkrovimo metu. Kaip minėta anksčiau, dėl klampaus slopinimo poveikio liekamasis poslinkis nesusidarys. Siūlomo klampaus slopinimo mechanizmo išraiška galėtų būti aprašyta formule:

$$F_{diss,viscous} = \alpha_d \cdot \sqrt{m_{eff} \cdot K} \cdot h'(h_U) \cdot \dot{h}, \quad (2.50)$$

čia K – dalelės standumo koeficientas, $h'(h_U)$ – santykinis poslinkis, bedimensis koeficientas, priklausantis nuo maksimalaus poslinkio h_U .

Klampus slopinimas taikomas tampriam bei tampriai plastiniam kontaktui tirti, todėl klampų slopinimą aprašantis mechanizmas yra universalus. Priklausomai nuo kontakto, standumo koeficientas atitinka tamprų K_{el} arba tampriai plastinį K_{el-pl} kontaktą. Darbe siūlomos dvi klampų slopinimą įvertinančios jėgos: tampriam kontaktui:

$$F_{diss,viscous,el}(t) = \alpha_d \cdot \sqrt{m_{eff} \cdot K_{el} \cdot h^{0,5}} \cdot h'(h_U) \cdot \dot{h}; \quad (2.51)$$

tampriai plastiniam kontaktui:

$$F_{diss,viscous,el-pl}(t) = \alpha_d \cdot \sqrt{m_{eff} \cdot K_{el-pl}} \cdot h'(h_U) \cdot \dot{h}. \quad (2.52)$$

Taikant šias jėgas, įvertinamas su klampiu slopinimu siejamas energijos sklaidos mechanizmas. Įvertinus energijos sklaidos mechanizmą, atsistatymo koeficientas yra priklausomas nuo slopinimo koeficiento. Didinant slopinimo koeficientą α_d energijos sklaida didėja, o atsistatymo koeficientas – mažėja.

2.3.2.1. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adhezinė tampra sąveika

Pritaikius sudarytą klampauso slopinimo mechanizmą adhezinėje sąveikoje, sudaromas adhezinis klampiai tamprus sąveikos modelis. 2.11 a paveiksle dalelės priartėjimas ir atsiskyrimas aprašomi formule (2.4). Dalelės apkrovimas ir nukrovimas aprašomi formule:

$$F^N(t) = F_{Hertz}^N - F_{H0} - F_{diss,viscous,el}(t). \quad (2.53)$$

Taikomas sudarytas klampauso slopinimo mechanizmas, įvedant klampauso slopinimo jėgos išraišką, pateiktą formulėje (2.51).

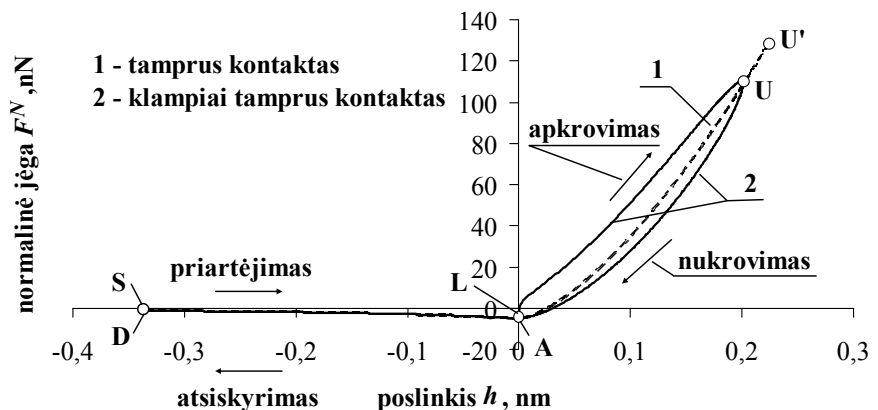
2.11 b paveiksle dalelės priartėjimas aprašomas formule (2.4), tuo tarpu dalelės apkrovimas ir nukrovimas aprašomi formule:

$$F^N(t) = F_{Hertz}^N - F_{H0} - F_{diss,adh}(t) - F_{diss,viscous,el}(t). \quad (2.54)$$

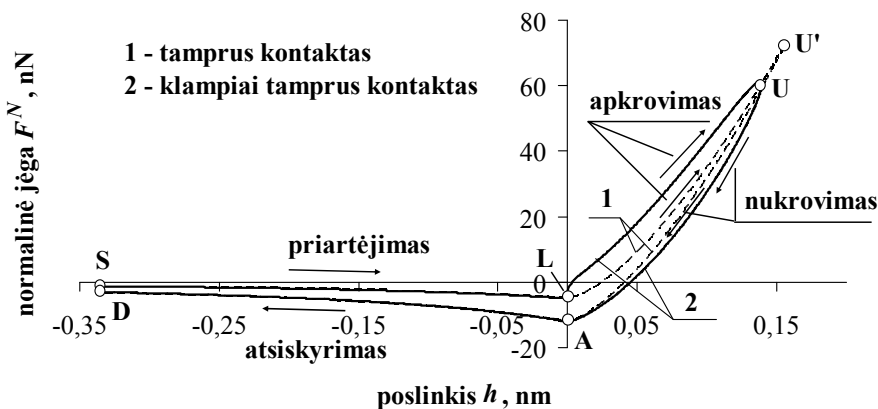
Apkrovimo metu $F_{diss,adh}(t) = 0$. Dalelės atsiskyrimas aprašomas formule (2.26).

Taikant sudarytą adhezinį klampiai tamprų modelį (2.11 a ir b paveikslai), adhezijos ribos įvertinti nebūtina, kadangi dalelė atitrūksta be liekamojo poslinkio, kai poslinkio reikšmė $h_A = 0$. Pastebima, jog įvedus sudarytą klampauso slopinimo mechanizmą, sumažėja maksimalus poslinkis h_U ir pasiekta normalinė jėga

F_U , o dalelės atsiskyrimą atitinkantis taškas A išlieka toks pat. Sudarius klampaus slopinimo mechanizmus, įvertinama energijos sklaida viso dalelės kontakto metu. Kadangi energijos sklaida priklauso nuo pradinio greičio, atsistatymo koeficientas e visada bus mažesnis už nulį.



a)



b)

2.11 pav. Adhezinė klampiai tampri sąveika. Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h . Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su klampiu slopinimu:

- a – neįvertinus energijos sklaidos mechanizmo, siejamo su adhezija,
- b – įvertinus energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmą

Fig. 2.11. Adhesive viscous elastic interaction. Normal force F^N versus displacement h . Energy dissipation mechanism, related with viscous damping: a – not included energy dissipation mechanism, related with adhesion, b – included energy dissipation mechanism, related with adhesion

2.11 b paveiksle pateikiamas adhezinės tamprios sąveikos modelis, įvertinantis energijos sklaidą, siejamą su adhezija bei klampiu slopinimu (vientisa linija). Sąveikos modelis be klampaus slopinimo vaizduojamas punktyrine linija. Šiuo atveju veikia du energijos sklaidos mechanizmai, iš kurių vienas (susietas su adhezija) nepriklauso nuo pradinio greičio, tuo tarpu kitas (susietas su klampiu slopinimu) – priklauso. Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su adhezija, apibūrina sulipimo ir atšokimo sritis. Svarbu pažymėti, jog kai pradiniai greičiai yra maži, klampaus slopinimo įtaka taip pat yra maža. Tuo tarpu su adhezija siejamas energijos sklaidos kiekis išlieka pastovus. Svarbu tai, jog esant dideliems pradiniais greičiams, dėl klampaus slopinimo įtakos dalelė atšoks į pradinę padėtį mažesniu greičiu, t. y. sumažės atsistatymo koeficientas e . 2.11 paveiksle parodyta, jog su adhezija siejamas sklaidos mechanizmas tinka tiek adheziniai tampriai, tiek adheziniai klampiai sąveikoms tirti.

2.3.2.2. Sklaidos mechanizmo sąsaja su adheazine tampriai plastine sąveika

Pateikiamas sudarytas adhezinis klampus tampriai plastinis modelis, sudaromas dalelės judėjimą aprašančios normalinės jėgos lygtys. 2.12 a paveiksle dalelės priartėjimas aprašomas formule (2.4), tamprus apkrovimas – formule (2.54), tampriai plastinis apkrovimas – formule:

$$F^N(t) = -\pi \cdot R_{eff} \cdot \kappa_p \cdot p_f \cdot h_A - F_{H0} - F_{diss,viscous,el-pl}(t). \quad (2.55)$$

Nukrovimas aprašomas formule:

$$F^N(t) = \frac{4}{3} \cdot E_{eff} \cdot \sqrt{R_{eff}} \cdot (h(t) - h_A(h_U))^{1.5} + \Delta F(h_U) - F_{H0} - F_{diss,viscous,el-pl}(t). \quad (2.56)$$

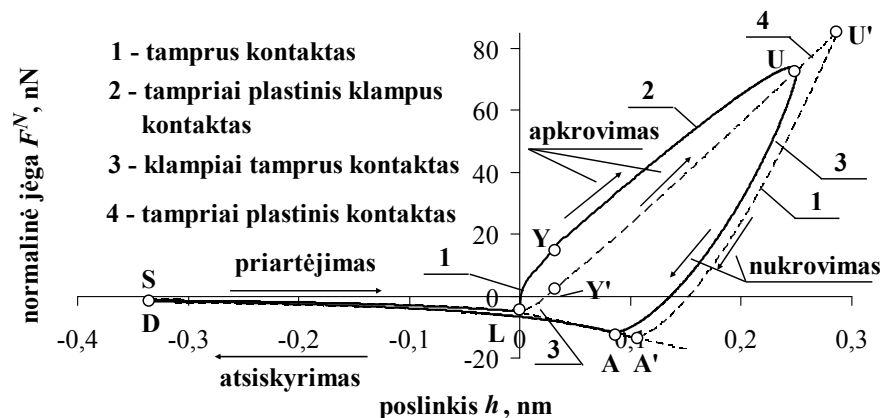
Dalelės atsiskyrimas aprašomas formule (2.17).

2.12 b paveiksle įvertinama su adhezija siejama energijos sklaida. Dalelės priartėjimas aprašomas formule (2.4), tamprus apkrovimas (2.54), tuo tarpu tampriai plastinis apkrovimas (2.55). Dalelės nukrovimas aprašomas formule:

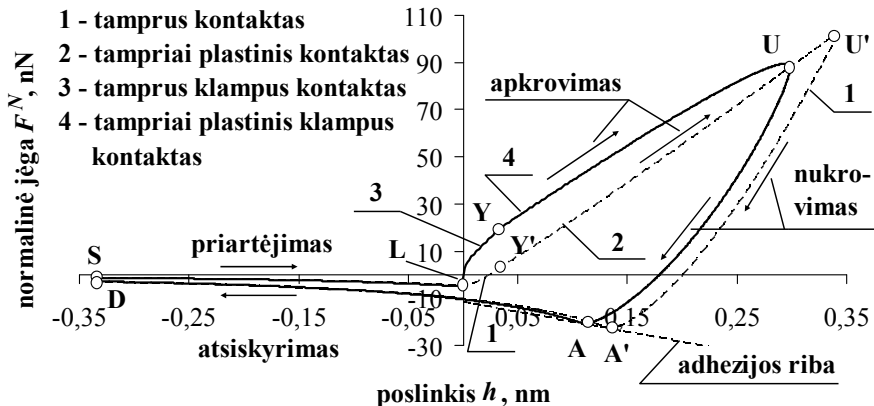
$$F^N(t) = \frac{4}{3} \cdot E_{eff} \cdot \sqrt{R_{eff}} \cdot (h(t) - h_A(h_U))^{1.5} + \Delta F(h_U) - F_{H0} - F_{diss,adh}(t) - F_{diss,viscous,el-pl}(t). \quad (2.57)$$

Dalelės atsiskyrimas aprašomas formule (2.48).

Tampriai plastinių savybių turinčios dalelės sąveika su sąveikaujamu paviršiumi turi energijos sklaidos pobūdį. 2.12 paveiksle pavaizduota adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika. Taikant sudarytą modelį, dalelė atsiskiria su liekamuoju poslinkiu, atitinkančiu poslinkį h_A . Tai lemia plastinės dalelės savybės, tuo tarpu klampios savybės tam įtakos neturi.



a)



b)

2.12 pav. Adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika. Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h :

a – energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu bei tampriai plastiniu kontaktu,
b – papildomai įvertinamas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su adhezija

Fig. 2.12. Adhesive elastic-plastic interaction. Normal force F^N versus displacement h :

a – energy dissipation related with viscous damping and elastic plastic contact,
b – additionally added energy dissipation mechanism, related with adhesion

2.12 a, b paveiksle adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika, įvertinus klampų slopinimą, pavaizduota stora linija, o neįvertinus klampaus slopinimo mechanizmo – plona linija. Taikant klampų slopinimą, sumažėja kontakto metu pasiektas maksimalus persiklojimo gylis, atitinkantis poslinkį h_U . Taip pat sumažėja ir liekamasis poslinkis, atitinkantis poslinkį h_A . Takumo ribą atitinkantis poslinkis h_Y abiem atvejais yra vienodas.

2.12 b paveiksle pavaizduoti trys sklaidos mechanizmai: energijos sklaidos, susietos su adhezija, susietos su tampriai plastiniu kontaktu bei susietos su klampiu slopinimu. Visi sklaidos mechanizmai skirtingai įtakoja dalelės sąveiką. Pirmas mechanizmas apibrėžia dalelės atšokimo sritį. Antras mechanizmas padidina sąveikos metu išsklaidytos energijos kiekį, didinant pradinį sąveikos greitį. Pastutinis mechanizmas sustiprina pastarųjų mechanizmų poveikį – dalelė atšoka į pradinę padėtį dar mažesniu greičiu. Nesunku pastebėti (2.12 paveikslas), jog su adhezija siejamas sudarytas sklaidos mechanizmas tinka tiek adhezeinei tampriai plastinei, tiek adhezeinei klampiai tampriai plastinei sąveikoms tirti.

2.4. Sulipimo procesą aprašantis modelis

Nagrinėjant nutolusios $a_{F=0}$ atstumu dalelės sąveiką su pagrindu pastebima, jog esant mažesniai pradiniam kinetinės energijos kiekiui už sąveikos metu išsklaidytos energijos kiekį, dalelė neatšoka į pradinę padėtį – ji grįžta, nes yra veikama adhezijos. Atsistatymo koeficientas yra $e = 0$. Sąveikos metu, taikant energijos sklaidos mechanizmus, tolimesnis grįžusios dalelės judėjimas laikomas sulipimo procesu. Apžvelgtoje literatūroje dalelių sulipimo procesas nėra pakankamai išnagrinėtas, daugiau akcentuojamas dalelės atšokimas. Tačiau yra žinoma, jog adhezinį sąveikų turinti dalelė ne tik atšoka, bet ir sulimpa – tai galima spręsti iš atšokimo-sulipimo sąlygų (Tomas 2004; Thornton ir Ning 1998). Ultrasulkių dalelių sulipimo procesą patvirtina ir fiziniai eksperimentai, atliekami naudojant atominę jėgos mikroskopą (AJM) (Tykhoniuk *et al.* 2007). Tokiu būdu dalelės judėjimas apibūdinamas ne tik sulipimo ir atšokimo sąlygomis, bet ir sulipimo procesu. Darbe siekiama sudaryti dalelės sulipimo procesą aprašantį sąveikos modelį.

Daroma prielaida, jog sulipimo proceso metu gėstantys dalelės svyravimai galėtų būti siejami su vidine trintimi. Sąveikos metu kinetinė energija išsklaidoma į šilumą. Sudarant sulipimo procesą įvertinantį modelį, kaip ir modeliuojant atšokimą, remiamasi Cundal ir Strack bei Tsuji netiesiniais klampiai tampriais modeliais.

Tomas (2004) pateikė modelį, aprašantį dalelės elgseną statikoje esant pakartotiniam jos apkrovimui. Šis modelis Hertz modelio pagrindu įvertina normalinės jėgos priklausomybės nuo poslinkio histerezę, esant adhezeinei tampriai

plastinei sąveikai. Daroma prielaida, jog vykstant dalelės sulipimo procesui bei taikant klampų slopinimą pakartotinio apkrovimo-nukrovimo metu, susidarys normalinės jėgos priklausomybės nuo poslinkio histerezė. Tačiau nepastebėta modelių, aprašančių ultrasmulkios dalelės sulipimo procesą. Daroma prielaida, jog pakartotinio apkrovimo metu gėstančiam dalelės judesiui apibrėžti gali būti taikomas sudarytas energijos sklaidos, siejamos su klampiu slopinimu, mechanizmas.

Darbe sudarytas sąveikos modelis, apimantis susietą su klampiu slopinimu energijos sklaidos mechanizmą. Šis modelis yra skirtas dalelės sulipimo procesui aprašyti.

2.4.1. Sulipimas esant adhezinei klampiai tampriai sąveikai

Darbe siekiama sudaryti ultrasmulkios dalelės sulipimo procesą aprašanti modelį, taikant sukurtą energijos sklaidos mechanizmą adhezinėje tamprioje sąveikoje.

Laikoma, jog sulipimo proceso metu dalelės judėjimas apima pakartotinį jos nukrovimą ir apkrovimą bei dalelės grįžimą ir pakartotinį atsiskyrimą. Sulipimo proceso aprašymas gali būti aktualus, tiriant dalelių aglomeraciją. Žinoma, kad sulipimo proceso metu dalelės judesiai yra gėstantys.

Sudaromas sulipimo procesą įvertinantis modelis, kai sąveika yra tampri. Modelis sudarytas, taikant klampaus slopinimo mechanizmą viso dalelės kontakto metu: apkraunant, nukraunant ir pakartotinai apkraunant bei nukraunant. Taip pat sudarytas kitas sulipimo procesą aprašantis modelis, taikant klampų slopinimą tik pakartotinio dalelės apkrovimo metu.

Tiriant sulipimo procesą, kai klampus slopinimas įvertinamas viso kontakto metu, taikoma sudaryta klampų slopinimą įvertinanti jėgos išraiška:

$$F_{diss,viscous,el} = \alpha_d \cdot \sqrt{m_{eff} \cdot K_{el} \cdot (h - h'_A)^{0,5}} \cdot h'(h_U). \quad (2.58)$$

Sulipimo proceso metu vykstant nukrovimui, dalelės greitis esant neigiamai normalinei jėgai gali pasiekti nulinę reikšmę (esant poslinkiui h'_A). Dėl to, dar nepasiekus atitrūkimo tašką atitinkančio poslinkio h_A , gali įvykti pakartotinis apkrovimas. Taikant klampaus slopinimo jėgą $F_{diss,viscous,el}$, pakartotinio apkrovimo metu įvertinamas poslinkis h'_A (formulė 2.58). Tuo siekiama išvengti papildomos jėgos, siejamos su klampiu slopinimu. Apkrovimas aprašomas formule (2.51).

Tiriant sulipimo procesą, kai klampus slopinimas įvertinamas pakartotinio apkrovimo metu, sklaidos mechanizmas taip pat aprašomas formule (2.58). Su klampiu slopinimu siejama energijos sklaida apkrovimo metu neįvertinama. Abiejuose mechanizmuose nukrovimo ir pakartotinio apkrovimo metu normali-

nės jėgos ir poslinkio priklausomybė atitiks histerezę. Šiuo atveju energijos sklaidą įvertinanti jėga gali priklausyti nuo klampaus slopinimo bei energijos sklaidos, susietos su adhezija F_{diss} ($F_{diss,viscous}$, $F_{diss,adh}$).

Svarbu paminėti, jog taikant pasiūlytus sulipimo procesą aprašančius mechanizmus bei didinant slopinimo koeficientą α_d , didėja išsklaidytos energijos kiekis, o dalelės sulipimo laikas trumpėja.

2.4.1.1. Klampaus slopinimo mechanizmas, taikomas viso kontakto metu

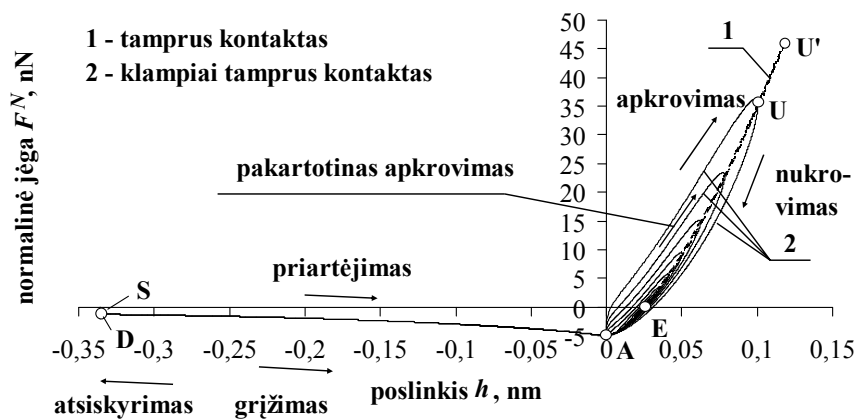
Darbe sudaromas klampiai tamprus adhezinis modelis, aprašantis dalelės sulipimo procesą. 2.13 paveiksle pavaizduota normalinės jėgos priklausomybė nuo poslinkio. Į dalelės sąveiką aprašančią normalinės jėgos lygtį įvesta klampaus slopinimo jėga aprašoma sudarytu energijos sklaidos mechanizmu, siejama su klampiu slopinimu.

Jei dalelei neužtenka kinetinės energijos atšokti į pradinę padėtį, ji grįžta ir prasideda sulipimo procesas. Pakartotinai apkraunant bei nukraunant, vyksta gęstantys svyravimai. Svyravimai nusistovi ties sulipimo persiklojimu $h_{E,stick}$, kuris atitinka poslinkį h_E .

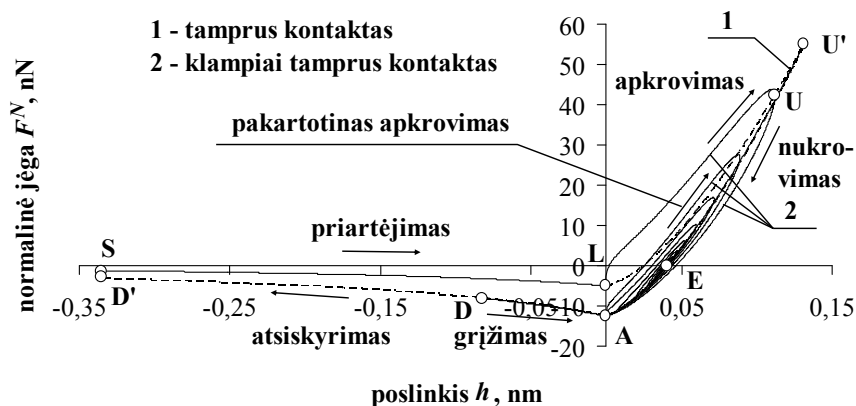
2.13 a paveiksle vaizduojamas adhezinės klampiai tamprios sąveikos sulipimo modelis, įvertinantis vieną sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su adhezija. Šiuo atveju pakartotinis apkrovimas prasideda A taške, kuris sutampa su apkrovimo pradžios tašku. Papildomai pavaizduota adhezinė tamprė sąveika, neįvertinus klampaus slopinimo. Lyginant su sąveika, kurioje neįvertintas klampus slopinimas, pasiektos normalinės jėgos ir poslinkio reikšmės yra mažesnės.

2.13 b paveiksle vaizduojamas adhezinės klampiai tamprios sąveikos sulipimo modelis, įvertinantis energijos sklaidą, siejamą su klampiu slopinimu bei adhezija. Dalelė sulimpa, kai normalinės jėgos bei greičio reikšmė yra nulis (esant sulipimo persiklojimui $h_{E,stick}$). Skirtingai nei 2.13 a paveiksle, 2.13 b paveiksle pakartotinis apkrovimas prasideda esant žemesnei normalinei jėgai. Pasiekta maksimali normalinė jėga ir poslinkis, lyginant su sąveika neįvertinus klampaus slopinimo, yra mažesni. Dalelė sulimpa taške E. Šis taškas sutampa su adhezinės tamprios sąveikos tašku neįvertinus klampaus slopinimo, bei nukrovimo kreivės tašku, kai normalinė jėga lygi nuliui.

2.13 a, b paveiksle pateiktos modelio variacijos įrodo, jog gęstantį dalelės svyravimą galima aprašyti, taikant sudarytą su klampiu slopinimu siejamos energijos sklaidos mechanizmą. Tuo pačiu patvirtinama, kad šis adhezinis klampiai tamprus modelis gali būti taikomas kartu su energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmu.



a)



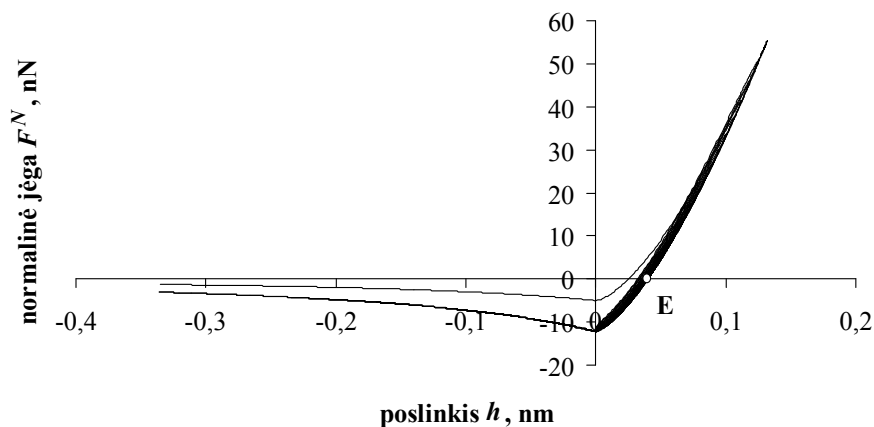
b)

2.13 pav. Adhezinė klampiai tampri sąveika. Sulipimo procesą aprašantis modelis. Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h . Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su klampiu slopinimu: a – neįvertinus energijos sklaidos mechanizmo, siejamo su adhezija, b – įvertinus energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su adhezija

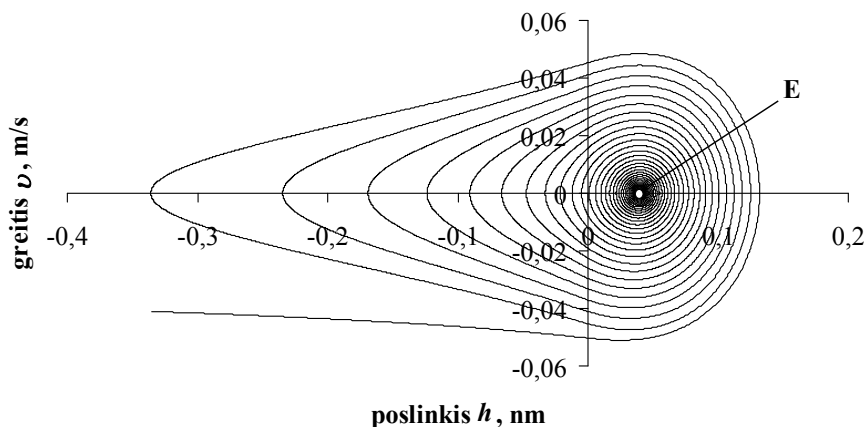
Fig. 2.13. Adhesive viscous elastic interaction. Model of sticking process. Normal force F^N versus displacement h . Energy dissipation mechanism, related to viscous damping: a – not included energy dissipation mechanism, related to adhesion, b – included energy dissipation mechanism, related to adhesion

2.4.1.2. Klampaus slopinimo mechanizmas, taikomas pakartotinio apkrovimo metu

Pastebima (2.14 paveikslas), jog pakartotinio apkrovimo metu normalinės jėgos priklausomybės nuo poslinkio histerezė apims didesnes normalinės jėgos reikšmes.



a)



b)

2.14 pav. Adhezinė klampiai tampri sąveika. Sulipimo procesą aprašantis modelis.

Normalinės jėgos F^N ir greičio v priklausomybė nuo poslinkio h .

Energijos sklaida, siejama su adhezija ir klampiu slopinimu

Fig 2.14. Adhesive viscous elastic interaction. Model of sticking process.

Normal force F^N and velocity v versus displacement h .

Energy dissipation, related to adhesion and viscous damping

Pasiekta maksimali normalinės jėgos reikšmė kontakto metu bus mažesnė. Daroma prielaida, jog esant tai pačiai poslinkio h reikšmei normalinė jėga F^N pakartotinio apkrovimo metu negali viršyti normalinės jėgos pirmo apkrovimo metu. Šiuo atveju apkrovimo kreivė yra laikoma riba, kurios negalima viršyti.

Sulipimo procesui apibrėžti darbe taikomas klampaus slopinimo mechanizmas, kuris turi normalinės jėgos priklausomybės nuo poslinkio histerezės pobūdį. Daroma išvada, jog prielaida gali būti tenkinama, jei bus įvertinti du energijos sklaidos mechanizmai ir sudarytas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su klampiu slopinimu bei adhezija.

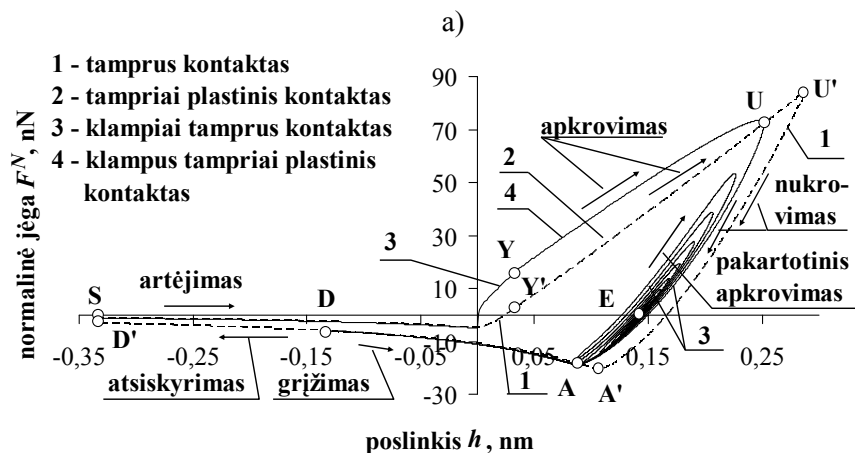
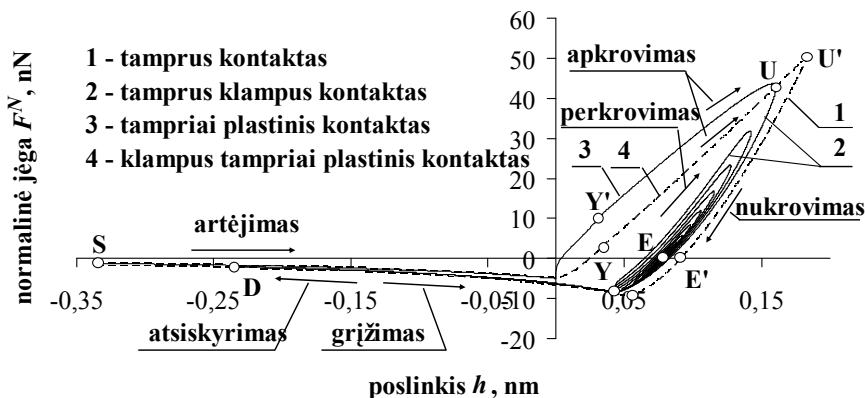
2.14 paveiksle pavaizduota dalelės sulipimo procesą aprašanti normalinės jėgos priklausomybė nuo poslinkio. Papildomai pateikiama ir dalelės greičio priklausomybė nuo poslinkio, kuri pavaizduota 2.14 b paveiksle. Paveiksle pateikta kreivė rodo, jog dalelė sulimpa esant poslinkiui h_E (2.14 a, b paveikslas), kai normalinės jėgos ir greičio reikšmės lygios nuliui. Dalelės greičio ir poslinkio priklausomybės kitimo elgsena išsidėsto pagal spiralės trajektoriją. 2.14 a paveikslas iliustruoja, jog gėstantį dalelės svyravimą galima aprašyti taikant sudarytus energijos sklaidos mechanizmus, siejamus su klampiu slopinimu ir adhezija. Skirtingai nei paveiksluose 2.13 ir 2.14, klampus slopinimas įvertinamas tik pakartotinio apkrovimo metu. Toks modelis gali būti taikomas įvertinus sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su adhezija.

2.4.2. Sulipimas esant adhezinei klampiai tampriai plastinei sąveikai

Darbe siekiama sudaryti sulipimo procesą aprašantį modelį esant adhezinei, klampiai tampriai plastinei sąveikai. Apkrovimo-nukrovimo metu, taikant klampų slopinimą, normalinės jėgos priklausomybė nuo poslinkio atitinka histerezę. Histerezės kilpa apima nukrovimo-pakartotinio apkrovimo ciklus.

2.4.2.1. Klampaus slopinimo mechanizmas, taikomas viso kontakto metu

Sudaromas adhezinės klampios tampriai plastinės sąveikos sulipimo modelis. 2.15 paveiksle vientisa linija pažymėtas normalinės jėgos priklausomybės nuo poslinkio sprendinys, įvertinus klampų slopinimą. Sprendinys neišvertinus klampaus slopinimo pažymėtas punktyrine linija. 2.15 a paveiksle pateiktas sulipimo proceso modelis, neišvertinantis siejamos su adhezija energijos sklaidos mechanizmo, tuo tarpu 2.15 b – įvertinantis. Dalelei sulipus, sulipimo persiklojimas taške E sutampa su poslinkiu be klampaus slopinimo nukraunant, kai normalinė jėga yra lygi nuliui. Šiuo atveju sulipimo persiklojimas $h_{E,stick}$ priklauso nuo maksimalaus poslinkio h_U .



2.15 pav. Adhezinė klampi tamptriai plastinė sąveika. Sulipimo procesą aprašantis modelis. Normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h . Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su klampiu slopinimu ir tamptriai plastiniu kontaktu:

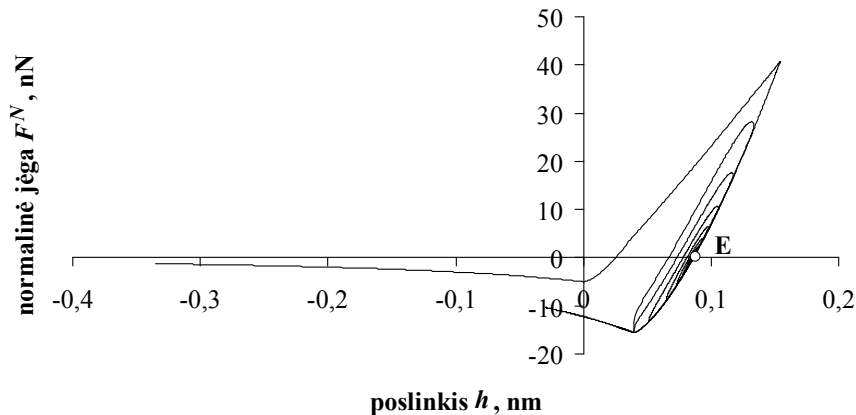
- a – neįvertintas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su adhezija,
- b – įvertintas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su adhezija

Fig. 2.15. Adhesive viscous elastic-plastic interaction. Model of sticking process. Normal force F^N versus displacement h . Energy dissipation mechanism related with viscous damping and elastic-plastic contact:

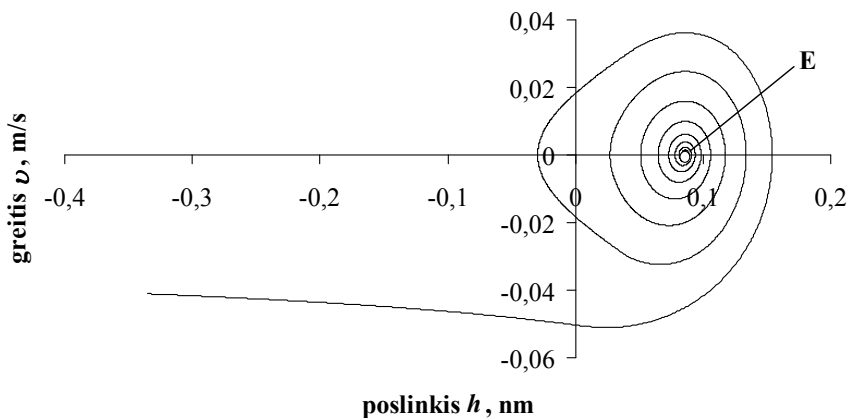
- a – not included energy dissipation mechanism related with adhesion,
- b – included energy dissipation mechanism related with adhesion

Taikant sudarytą (2.15 paveikslas) sulipimo proceso modelį, sulipimo persiklojimas priklausys nuo maksimalaus poslinkio. Didėjant maksimaliam poslinkiui, atitinkamai didės ir sulipimo persiklojimas.

2.4.2.2. Klampus slopinimo mechanizmas, taikomas pakartotinio apkrovimo metu



a)



b)

2.16 pav. Adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika. Sulipimo procesą aprašantis modelis. Normalinės jėgos F^N ir greičio v priklausomybė nuo poslinkio h .

Energijos sklaidos mechanizmas, susietas su klampiu slopinimu, tampriai plastiniu kontaktu ir adhezija

Fig. 2.16. Adhesive viscous elastic-plastic interaction. Model of sticking process. Normal force F^N and velocity v versus displacement h .

Energy dissipation mechanism, related with viscous damping, elastic-plastic contact and adhesion

Adhezinės klampios tampriai plastinės sąveikos jėgos ir poslinkio priklausomybės kitimas nukrovimo ir pakartotinio apkrovimo metu atitiks histerezę, kaip ir adhezinėje klampiai tamprioje sąveikoje.

Nagrinėjant adhezinę klampią tampriai plastinę sąveiką, energijos sklaida vyksta dalelei grįžus su liekamuoju poslinkiu, atitinkančiu poslinkį h_A . Sulipimo proceso metu vyksta gęstantys dalelės svyravimai, kol dalelės judėjimas nusistovi ties poslinkiu h_E . Tuo metu normalinė jėga F^N ir greitis v yra lygūs nuliui. Skirtingai nei tamprioje sąveikoje, tampriai plastinės sąveikos metu, didėjant pradiniam greičiui bei maksimaliam poslinkiui, didėja ir sulipimo persiklojimas. Tai lemia tampriai plastinės medžiagos savybės, dėl kurių sulipimo persiklojimas apytiksliai pasislenka poslinkiu h_A , t. y. $h_{E,stick,el-pl} \approx h_{E,stick,el} + h_{A,residual}$, todėl $h_{E,stick,el-pl} > h_{E,stick,el}$. Tas pats atsitinka, kai klampaus slopinimo mechanizmas taikomas viso kontakto metu. 2.16 paveiksle pateikiamas dalelės sulipimo modelis, kai klampus slopinimas įvertinamas pakartotinio apkrovimo metu. Toks modelis taikomas, įvertinus sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su adhezija. Sudarytame modelyje pastebėta, jog energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su klampiu slopinimu, yra fiziškai korektiškas. Klampus slopinimas neįtakoja liekamojo poslinkio susidarymo tiek tamprioje, tiek tampriai plastinėje sąveikoje. Pastebima, jog sudarytas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su klampiu slopinimu, tinka tirti adhezinę klampią tampriai plastinę sąveiką dalelės sulipimo proceso metu.

2.5. Antrojo skyriaus išvados

1. Sudarytas ultrasmulkios dalelės normalinės sąveikos modelis įvertina ir aprašo adhezijos, tampriai plastinės bei klampaus slopinimo energijos sklaidos mechanizmus. Taikant šį modelį, galima skaitiškai tirti dalelės atšokimą ir sulipimą.

2. Skirtingai nei esamuose modeliuose, taikant sudarytą energijos sklaidos, susietos su adhezija, mechanizmą, išsklaidytos energijos kiekis sąveikos metu yra didesnis. Jis gali būti padidintas siūlomu energijos sklaidos, susietos su adhezija, koeficientu. Tai leidžia apibrėžti norimą dalelės sulipimo-atšokimo sritį.

3. Apibrėžiant gęstantį dalelės svyravimą sulipimo proceso metu svarbus klampus slopinimas. Darbe sudarytas ir pasiūlytas modelis, leidžiantis tirti ultrasmulkių dalelių sulipimo procesą. Gęstantis sulipusios dalelės svyravimas aprašomas, taikant sudarytą klampaus slopinimo mechanizmą, kuris neįvertina liekamojo poslinkio. Dalelė sulimpa su persiklojimu, kai normalinė jėga ir greitis yra lygūs nuliui. Pastebėta, jog įvertinus klampų slopinimą, esant tampriai sąveikai sulipimo persiklojimas nuo pradinio greičio nepriklauso. Tuo tarpu tampriai plastinių savybių turinčios dalelės sulipimo persiklojimas didėja, didėjant pradiniam greičiui.

Tamprios dalelės sąveikos skaitinis tyrimas

Skyriuje aprašomi tamprioje sąveikoje taikomi energijos sklaidos mechanizmai, susieti su adhezija ir klampiu slopinimu. Tyrimui atlikti taikomas skaitinis DEM eksperimentas, kurio tikslas – įrodyti, jog ultrasmulkios dalelės adhezinę sąveiką gali skirtingai įtakoti įvairūs sklaidos mechanizmai. Siekiama ištirti ir atskleisti tiek pavienių sklaidos mechanizmų, tiek jų tarpusavio kombinacijų įtaką dalelių sąveikai. Taip pat siekiama apibrėžti tamprios puserdvės bei absoliučiai kieto pagrindo savybes, modeliuojant pagrindą sferine dalele. Sklaidos įtakai įvertinti pasirinktas dalelės atsistatymo koeficiento e tyrimas.

Skyriaus tematikos medžiaga atspindi tokius autoriaus su bendraautoriais paskelbtus straipsnius: Jasevičius *et al.* (2006, 2007, 2008, 2009, 2010).

Modeliuojamos ultrasmulkios dalelės ir pagrindo parametrai. Parametrai yra pateikti 3.1 ir 3.2 lentelėse.

3.1 lentelė. SiO₂ dalelės parametrai

Table 3.1. Parameters of SiO₂ particle

Parametrai	Reikšmė
Minimalus atsiskyrimo atstumas jėgos pusiausvyrai gauti, sąlygotas molekulinės traukos ir stūmos potencialų $a_{F=0}$, nm	0,336
Hamaker konstanta (siejama su Lifshitz teorija kietai–skystai–kietai sąveikai su skysčio pavidalo adsorbcijos sluoksniu, J) $C_{H,sls}$, J	$\approx 3,216 \cdot 10^{-20}$ J
Sferos spindulys R_i , μm	0,6
Tamprumo modulis E_i , GPa	75
Adhezijos jėga, neįvertinus deformavimo F_{H0} , nN	5,0
Sferos masė m_i , kg	$\approx 2,0 \cdot 10^{-15}$
Puasono koeficientas ν_i	0,17
Tankis ρ , kg/m ³	2201

3.2 lentelė. SiO₂ pagrindo parametrai

Table 3.2. Parameters of SiO₂ substrate

Parametrai	Reikšmė
Tamprumo modulis E_i , GPa	75
Puasono koeficientas ν_i	0,17

Adhezijos parametrai, tokie kaip atstumas $a_{F=0} = 0,336$ nm ir pradinė adhezijos jėga $F_{H0} = 5,0$ nN, paskaičiuoti pagal šlyties testus su SiO₂ milteliais, esant vidutiniam (efektyviajam) dalelės spinduliui 0,6 μm (Tomas 2007).

Žemės trauka tokiai dalelei nereikšminė, o adhezijos jėga F_{H0} daug kartų didesnė nei sunkio jėga $F_{H0}/F_s \approx 255 \cdot 10^3$. Čia sunkio jėga $F_s = m_i \cdot g$. Darbe, modeliuojant mikrometro dydžio dalelės sąveiką, sunkio jėga neįvertinama.

3.1. Deformuojamo pagrindo modeliavimas sferine dalele

Pagrindas stacionaria sferine dalele modeliuojamas esant neadhezeinei ir adhezeinei dalelės sąveikoms. Skyrelyje tiriama deformuojamo pagrindo elgsena, keičiant pagrindo (kaip dalelės) spindulį bei tamprumo modulį. Tamprus pagrindas laikomas standžiai įtvirtinta skirtingo spindulio bei tamprumo modulio sferine dalele.

Sąveikaujančios dalelės geometrija apibrėžiama dalelės spinduliu, kuris yra konstanta $R_i = \text{const}$. Pagrindo dalelės geometrija yra apibrėžiama kintamu spin-

duliu. Pagrindo savybės yra pažymėtos vienmatėje erdvėje, o pagrindo dalelės spindulys matuojamas santykiniu spinduliu $r = R_j/R_i$, ($1 \leq r \leq \infty$). Apatinė riba apribojama reikšme $r = 1$ ($R_j = R_i$), tuo tarpu viršutinė riba $r = \infty$, kas atitinka puserdvę.

Tiek judanti dalelė, tiek pagrindas turi tamprių savybių, apibrėžiamų Jungo modulių E bei Puasono koeficientu ν , tuo tarpu tankis žymimas ρ . Judančios ir stacionarios (pagrindo) dalelių Jungo modulis charakterizuojamas E_i ir E_j (3.1, 3.2 lentelės). Priimant, jog $E_i = \text{const}$, pagrindo tamprumo modulio savybių kitimas charakterizuojamas bedimensiu parametru $\zeta = E_j/E_i$, kur ($1 \leq \zeta \leq \infty$). Ribinis atvejis $\zeta = \infty$ atitinka visiškai kietą pagrindą.

Siekiant įvertinti pagrindo savybių įtaką, tirta dalelės šokinėjimo ant deformuojamo pagrindo istorija.

Vienmatis šokinėjančios dalelės judėjimas nustatomas poslinkiu $h(t)$. Taikomas klasikinis antrasis Niutono dėsnis (formulė 2.1). Dalelei kontaktuojant su pagrindu, efektyvioji masė yra lygi dalelės masei:

$$m_i = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \rho \cdot R_{\text{eff}}^3. \quad (3.1)$$

Efektyvusis sąveikaujančių dalelių spindulys bei tamprumo modulis yra nustatomi pagal formules (1.5, 1.8). Įvedami bedimensiniai koeficientai r ir ζ , apibrėžiantys krentančios dalelės ir pagrindo spindulio R bei tamprumo modulio E santykį:

$$R_j = r \cdot R_i \text{ ir } E_j = \zeta \cdot E_i. \quad (3.2)$$

Tokiu būdu efektyvieji parametrai gali būti išreikšti judančios dalelės parametrais. Šiuo atveju efektyvusis spindulys turi išraišką:

$$R_{\text{eff}} = \frac{R_i}{1 + r^{-1}}. \quad (3.3)$$

Priimant, jog sąveikaujančių dalelių Puasono koeficientai yra lygūs $\nu = \nu_i = \nu_j$, efektyvusis tamprumo modulis gali būti išreikštas:

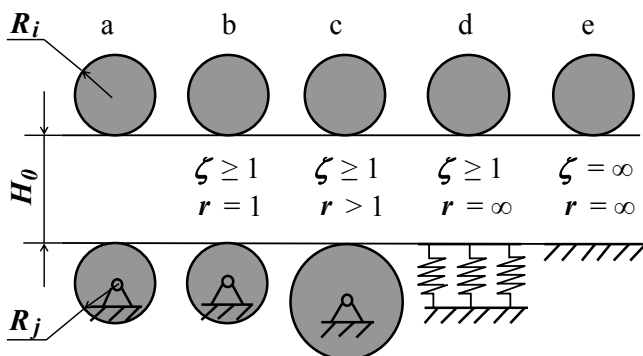
$$E_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{E_i}{(1 + \zeta^{-1}) \cdot (1 - \nu^2)}. \quad (3.4)$$

Atliekant skaitinį eksperimentą dalelės skersmuo yra laisvai pasirenkamas. Neįvertinus adhezijos poveikio, jis yra 1,2 mm, tuo tarpu įvertinus adhezijos poveikį – 1,2 μm .

3.1.1. Modeliavimas milimetro skalės dydžio dalele

Neadhezinės tamprios sferinės dalelės normalinis kontaktas su deformuojamu pagrindu nagrinėjamas, taikant diskrečiųjų elementų metodą. Tiriamas šokinėjančios dalelės pozicijos kitimas laike. Geometrinė judėjimo iliustracija pateikta 3.1 paveiksle. Priimama, jog adhezijos poveikis milimetro dydžio dalelei yra nereikšminis, todėl jis neįvertinamas. Sklaidos mechanizmai neįvertinami, todėl dalelė grįžta į pradinę padėtį, o kinetinė energija neišsklaidoma. Dalelė gali šokinėti begalinį laiko tarpą, esant pastoviam laiko periodui T .

3.1 paveiksle pateikiami tipinis pagrindo (kaip dalelės) modelis, charakterizuojamas $r = 1$, $r > 1$ (3.1 paveikslas, b ir c atvejai) ir ribinis tamprios bei kietos puserdvės atvejais (3.1 paveikslas, d ir e atvejai).



3.1. pav. Modeliavimo koncepcija (a) ir pagrindo dalelės modeliai (b-e)

Fig. 3.1. Conception of modelling (a) and particle-background models (b-e)

Pradiniu laiko momentu $t = t_0$, dalelė yra nutolusi nuo paviršiaus H_0 atstumu. Šis atstumas atitinka didžiausią judančios dalelės nuotolį nuo pagrindo. Šiuo laiko momentu pradinis greitis $v_0 = 0$, o pradinis pagreitis a_0 yra lygus laisvojo kritimo pagreičiui $g = -9,81 \text{ m/s}^2$ (dalelė laisvai juda link pagrindo). Laiko momentu $t = t_L$ dalelė įgauna greitį $v(t_L) = v_L$ ir susiduria su pagrindu. Dėl sukaupotos kinetinės energijos dalelė ir pagrindas deformuojasi. Daroma prielaida, jog dalelių susidūrimo metu persiklojimas yra apibrėžiamas poslinkiu h .

Kontaktas aprašomas remiantis Hertz modeliu. Kontakto metu dalelės greitis pasiekia didžiausią reikšmę, tuo tarpu pagreičio vektorius keičia kryptį. Tam tik-

ru laiko momentu t_U judanti dalelė pasiekia pusiausvyros būseną. Ši būsena apibrėžiama: nuliniu greičiu $v(t_U) = 0$, maksimaliu poslinkiu $h(t_U) = h_U$ bei maksimaliu pagreičiu $a(t_U) = a_U$. Pasiekusi didžiausią poslinkį, dalelė keičia judėjimo kryptį. Laiko momentu $t = t_A$, poslinkis sumažėja iki nulio $h(t_A) = 0$. Dalelė atskiria esant atšokimo greičiui $v(t_A) = v_A$. Rezultate, laiko momentu $t = t_D$ atšokanti dalelė pasiekia pradinę padėtį, kai greitis $v(t_D) = v_D = 0$.

Judančios dalelės lygtys. Dalelės normalinė jėga F^N susideda iš sunkio ir tampraus kontakto jėgų. Įvedamas bedimensis koeficientas $\beta_c \equiv \beta_c(t)$, kurio reikšmė $\beta_c = 0$ atitinka dalelės judėjimą ne kontakto metu. Tuo tarpu $\beta_c = 1$ atitinka dalelės kontaktą. Kontaktuojančios dalelės normalinė jėga gali būti užrašyta, taikant Hertz modelį:

$$F^N(t) = -m_i \cdot g + \beta_c \cdot F_{Hertz}^N(t). \quad (3.5)$$

Kai pradinis laiko momentas $t_0 = 0$, pradinės sąlygos yra užduotos kaip pradinis aukštis H_0 ir greitis v_0 . Sprendžiant uždavinį yra taikoma dalelės judėjimą aprašanti formulė (3.5).

Detalus dalelės judėjimas gali būti paaiškintas charakteringų parametru nariais, kurie skaičiavimo metu gali nežymiai kisti.

Dalelės laisvo judėjimo periodas yra:

$$T_f = \sqrt{2 \cdot H_0 \cdot g^{-1}}, \quad (3.6)$$

pradinis kontakto greitis išreiškiamas:

$$v_L = -\sqrt{2 \cdot H_0 \cdot g}. \quad (3.7)$$

Uždaviniui spręsti taikoma integravimo laike schema, parenkamas laiko žingsnis Δt . Remiantis esama praktika, laiko integravimo žingsnis yra kontakto periodo trupmena $\Delta t = \eta \cdot T_c$, čia skalės faktorius η dažniausiai svyruoja nuo 1/10 iki 1/30 (Džiugys, Peters 2001). Standžių dalelių kontakto skaitinis integravimas laike reikalauja mažesnio integravimo žingsnio. Netiesinio modelio kontakto periodas aprašytas Brilliantov *et al.* (1996):

$$T_c = 2,94 \cdot \left(\frac{m_{eff}}{k} \right)^{2/5} \cdot (v_c)^{-1/5}, \quad (3.8)$$

čia

$$k^2 = \left(\frac{4}{5} \cdot \frac{2}{3A} \right)^2 \cdot R_{eff}; \quad A = \frac{2 \cdot E_1 + 3 \cdot E_2}{E_1 \cdot (E_1 + 6 \cdot E_2)}; \quad (3.9)$$

$$E_1 = \frac{E_i}{1 + \nu}; \quad E_2 = \frac{E_i}{3 \cdot (1 - 2 \cdot \nu)}. \quad (3.10)$$

Mažėjant laiko žingsniui, mažėja ir paklaida. Žingsnio trupmena $\eta = 1/50$ yra pakankama, taikant skaitinius skaičiavimus (Jasevičius 2007).

Modeliavimo rezultatai. Norint nustatyti pagrindo savybes, šokinėjančios dalelės modelis tirtas, modeliuojant normalinį dalelės ir pagrindo kontaktą. Tai-koma skaitinė 5-to tikslumo Gear predikatoriaus-korektoriaus laiko integravimo schema.

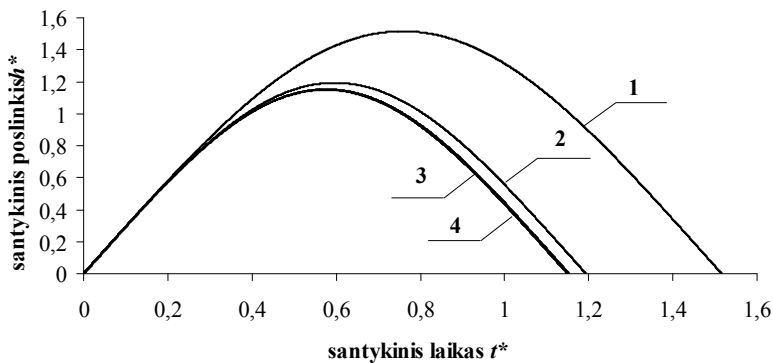
Kai dalelė juda vakuume, spindulys $R_i = 0,6$ mm, o pradinis aukštis $H_0 = 10 \cdot R_i$. Kiti duomenys, tokie kaip tamprumo modulis E , Puasono koeficientas ν , tankis ρ paimti iš 3.1 ir 3.2 lentelių.

Santykinis pagrindo spindulys r ir tamprumo modulis ζ yra laikomi modeliavimo kintamaisiais. Modeliavimo rezultatai ir poslinkio h priklausomybė nuo laiko parodyti 3.2 paveiksle. Poslinkis ir laikas yra normalizuoti ir išreikšti be-mačiais kintamaisiais $h^*(t) = h/h_{U,stiff}$ ir $t^* = t/T_{c,stiff}$.

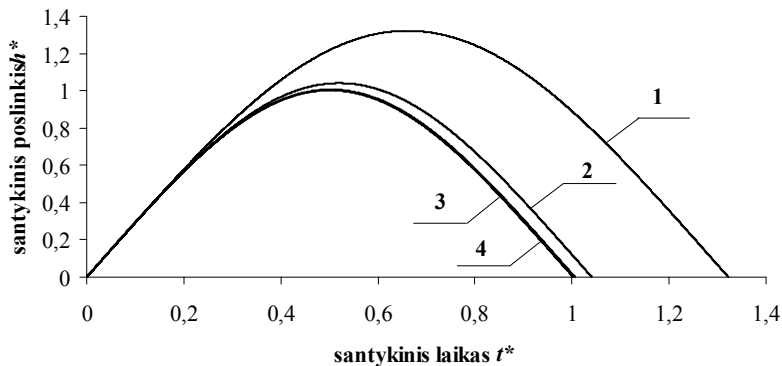
Skalės parametrai $h_{U,stiff} = 558$ nm ir $T_{c,stiff} = 478$ ns atitinka standžiausią kon-takto atvejį, kai $h^*(t) = 1$ ir $t^* = 1$. Šis atvejis atitinka ribą, kai pagrindas yra ab-soliučiai kieta puserdvė. Kontakto pradžioje dalelės greitis $v_L = 0,343$ m/s.

3.2 paveiksle pateikti rezultatai, gauti esant skirtingoms santykinio spindu-lio, apibrėžiamo $r_1 = 1$; $r_2 = 100$, reikšmėms (3.2 a, b paveikslai). Visos kreivės vaizduoja netiesinio modelio rezultatus, tačiau kiekviena iš keturių kreivių (1, 2, 3 ir 4) rodo rezultatus, esant skirtingiems santykiniams pagrindo tamprumo mo-duliams: $\zeta_1 = 1$; $\zeta_2 = 10$; $\zeta_3 = 100$; $\zeta_4 = 1000$. 3.2 a ir b paveiksluose matyti, jog rezultatai kreivėje 3, esant santykiniam pagrindo tamprumo moduliui $\zeta_3 = 100$, sutapo su kreivės 4 rezultatais, kai $\zeta_4 = 1000$. Padidėjus pagrindo santykiniam spinduliui $r_2 = 100$ (3.2 b paveikslas), rezultatai atitinka dalelės kontaktą su tam-pria puserdve. Kai 1 ir 2 kreivės sutampa, rezultatai atitinka dalelės kontaktą su absoliučiai kieta puserdve.

Judančios dalelės elgsena, jai kontaktuojant su stacionariu pagrindu paaiški-nama, atsižvelgiant į santykinio maksimalaus poslinkio kitimą $h_U^* = h_U/h_{U,stiff}$ ir sulyginta su buvusiu nustatytu parametru $h_{U,stiff}$. Kitimas $h_U^*(r)$ nuo santykinio pagrindo spindulio r yra parodytas 3.3 paveiksle. Čia kiekviena iš keturių kreivių parodo rezultatus, gautus esant įvairiems santykiniams pagrindo dalelės tampru-mo moduliams, t. y. $\zeta_1 = 1$, $\zeta_2 = 10$, $\zeta_3 = 100$ $\zeta_4 = 1000$.



a)



b)

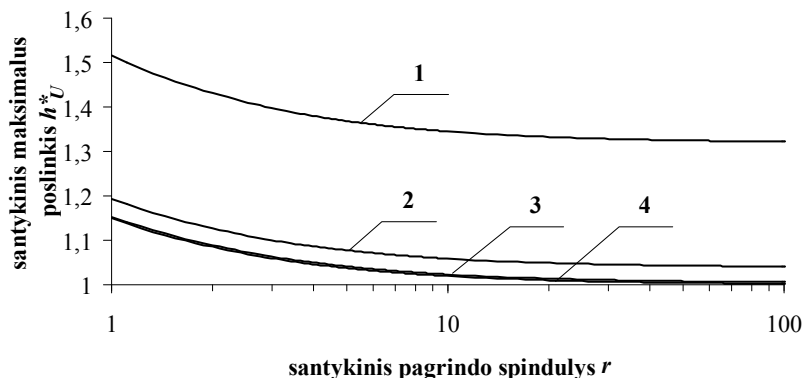
3.2. pav. Tamprus kontaktas. Santykinio poslinkio h^* priklausomybė nuo santykinio laiko t^* : 1- $\zeta_1 = 1$; 2- $\zeta_2 = 10$; 3- $\zeta_3 = 100$; 4- $\zeta_4 = 1000$. a- $r_1 = 1$; b- $r_2 = 100$

Fig. 3.2. Elastic contact. Relative displacement h^* versus relative time t^* :

1- $\zeta_1 = 1$; 2- $\zeta_2 = 10$; 3- $\zeta_3 = 100$; 4- $\zeta_4 = 1000$. a- $r_1 = 1$; b- $r_2 = 100$

Nustatyta, jog pagrindo (dalelės) didėjimas bei kietėjimas, atitinkamai didinant pagrindo spindulį bei tamprumo modulį, įtakoja maksimalaus poslinkio rezultatus, kurie turi nusistovėjimo tendenciją. Ši tendencija išlaikoma ir esant kitiems kontakto parametrams: kontakto periodui T_c , maksimaliam pagreičiui a_U bei atšokimo greičiui v_D .

Iš skyrelyje pateiktų paveikslų galima pastebėti, jog didėjant koeficientams r ir ζ maksimalaus poslinkio h_U reikšmė mažėja ir priartėja prie sprendinio $h_{U,stiff}$, tai atitinka santykinio poslinkio reikšmę $h_U^* = h_U/h_{U,stiff} = 1$. Iš 3.3 paveikslo matyti, jog kreivės 3 ir 4 sutapo. Tai paaiškinama reikšmės h_U konvergavimu esant tamptai puserdvei.



3.3 pav. Tamprus kontaktas. Santykinio maksimalaus poslinkio h_U^* priklausomybė nuo santykinio spindulio r

Fig. 3.3. Elastic contact. Relative maximum displacement h_U^* versus relative radius r

Pagrindiniai dalelės kontakto parametrai – kontakto trukmė, maksimalus poslinkis ir atšokimo greitis – prie atitinkamų ribų konverguoja dėl padidėjusio pagrindo tamprumo modulio ir spindulio (Jasevičius *et al.* 2007). Remiantis rezultatais daroma išvada, jog, nepaisant nežymaus skirtumo, nustatyto kontakto modelyje, santykinis pagrindo dalelės $r = 100$ spindulys ir santykinis pagrindo tamprumo modulis $\zeta = 100$ galėtų būti laikomi ribinėmis reikšmėmis. Darbe nustatytos ribinės reikšmės galėtų būti naudingos, modeliuojant DEM.

3.1.2. Modeliavimas mikrometro skalės dydžio dalele

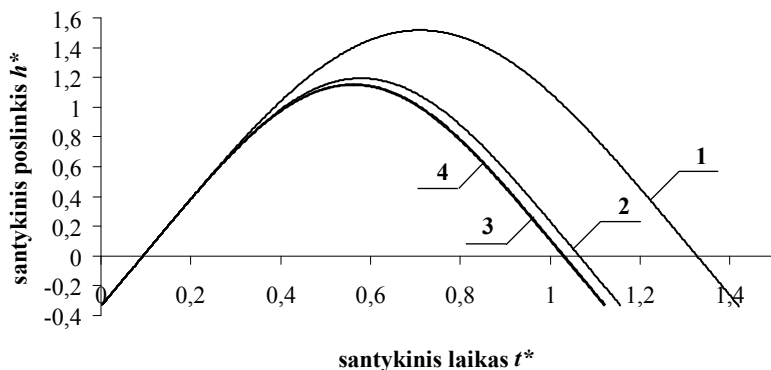
Kadangi adhezijos jėga daug kartų didesnė už ultrasmulkios dalelės sunkio jėgą, modeliuojant ultrasmulkios dalelės sąveiką žemės trauka neįvertinama. Dalelių sąveikos metu įvertinamas adhezijos poveikis ne kontakto ir kontakto metu. Dalelės pagrindo sąveikos modelis pavaizduotas 3.1 paveiksle. Skaitinis eksperimentas atliekamas, kai dalelė yra nutolusi nuo pagrindo $H_0 = a_{F=0}$ atstumu.

Dalelė pradeda judėti vakuume užduotu pradiniu greičiu $v_0 = 1$ m/s. Įvertinamas sudarytas su adhezija siejamos energijos sklaidos mechanizmas. Sąveikos metu išsklaidytos energijos kiekis apskaičiuojamas, remiantis (2.21) formule. Modeliuojamos ultrasmulkios dalelės ir pagrindo parametrai paimti iš 3.1 ir 3.2 lentelių. Priimama, jog kintančios pagrindo dalelės spindulys adhezijos jėgos F_{H0} reikšmei įtakos neturi.

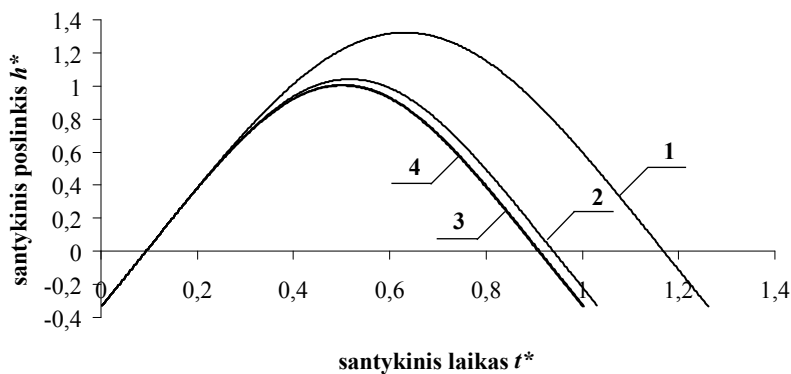
Dalelės santykinio poslinkio kitimas, esant adhezinei tampriai sąveikai, pavaizduotas 3.4 paveiksle.

Judančios dalelės lygtys. Vienmatis šokinėjančios adhezinės dalelės judėjimas aprašomas normaline jėga pagal formules (2.4, 2.5, 2.25, 2.26). Įvertinus adhezijos poveikį, taikant sudarytą su adhezija siejamą energijos sklaidos mechanizmą, dalelė gali ne tik atšokti, bet ir sulipti. Tiriama adhezinė tampri sąveika. Aprašant dalelės judėjimą, yra taikoma integravimo laike schema. Maksimalus poslinkis h_U nustatomas skaitiškai, sekant dalelės sąveikos istoriją.

Modeliavimo rezultatai. Norint nustatyti pagrindo savybes, šokinėjančios dalelės modelis (formulės 2.4, 2.5, 2.25, 2.26) tirtas, modeliuojant normalinę sąveiką tarp dalelės ir pagrindo.



a)



b)

3.4. pav. Adhezinė tampri sąveika. Santykinio poslinkio h^* priklausomybė nuo dalelės santykinio laiko t^* : 1- $\zeta_1 = 1$; 2- $\zeta_2 = 10$; 3- $\zeta_3 = 100$; 4- $\zeta_4 = 1000$. a- $r_1 = 1$; b- $r_2 = 100$

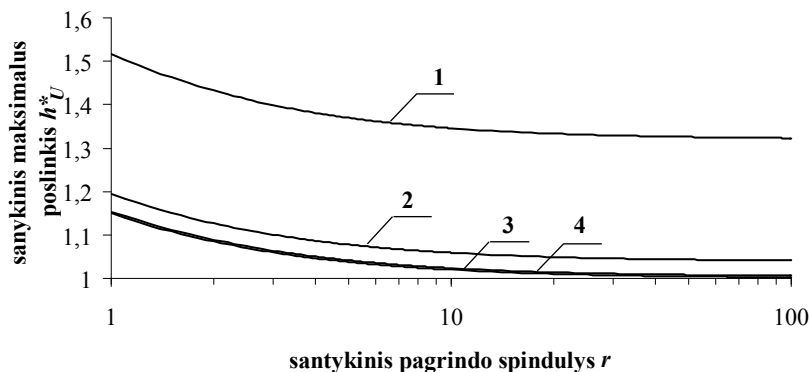
Fig. 3.4. Adhesive elastic interaction. Relative displacement h^* versus relative time t^* : 1- $\zeta_1 = 1$; 2- $\zeta_2 = 10$; 3- $\zeta_3 = 100$; 4- $\zeta_4 = 1000$. a- $r_1 = 1$; b- $r_2 = 100$

Santykinis pagrindo spindulys r ir tamprumo modulis ζ yra laikomi modeliavimo kintamaisiais. Santykinio poslinkio h^* istorija pavaizduota 3.4 paveiksle. Poslinkis ir laikas yra normalizuoti bei išreikšti bemačiais kintamaisiais $h^*(t) = h/h_{U,stiff}$ ir $t^* = t/T_{c,stiff}$. Skalės parametrai $h_{U,stiff} = 0,997$ nm ir $T_{stiff} = 3,6$ ns atitinka standžiausią sudaryto modelio tampraus kontakto atvejį, kada $h^*(t) = 1$ ir $t^* = 1$. Šis atvejis nurodo skaitiškai pasiekiamą ribą, kai pagrindas yra absoliučiai kieta puserdvė.

3.4 paveiksle parodyti rezultatai, gauti esant skirtingoms santykinio spindulio $r_1 = 1, r_2 = 100$ reikšmėms. Kiekvienu atveju keturios kreivės: 1, 2, 3 ir 4 vaizduoja gautus rezultatus, kai pagrindo dalelės tamprumo moduliai yra skirtingi, t. y. $\zeta_1 = 1, \zeta_2 = 10, \zeta_3 = 100, \zeta_4 = 1000$. Kreivių pobūdis, pateiktas 3.2 a ir b paveiksluose (neįvertinus adhezijos), atitinka kreivių pobūdį įvertinus adheziją. Tai pavaizduota 3.4 a ir b paveiksluose. Matyti, jog kreivėje 3 pateikti rezultatai, esant santykiniam pagrindo tamprumo moduliui $\zeta_3 = 100$, sutapo su kreivėje 4 pateiktais rezultatais, kai $\zeta_4 = 1000$.

Padidėjus pagrindo santykiniam spinduliui $r_2 = 100$ (3.4 b paveikslas), rezultatai atitinka dalelės sąveiką su absoliučiai kieta puserdve.

Judančios dalelės elgsena, jai sąveikaujant su stacionariu pagrindu (laikomu dalele) tirama, atsižvelgiant į santykinio maksimalaus poslinkio kitimą $h_U^* = h_U/h_{U,stiff}$ ir sulyginata pagal anksčiau nustatytą parametą $h_{U,stiff}$.



3.5 pav. Adhezinė tampri sąveika. Santykinio maksimalaus poslinkio h_U^* kitimas, priklausomai nuo santykinio spindulio r

Fig. 3.5. Adhesive elastic interaction. Variations of maximal relative displacement h_U^* versus relative radius r

$h_U^*(r)$ kitimas nuo santykinio pagrindo spindulio r yra pavaizduotas 3.5 paveiksle. Čia kiekviena iš keturių kreivių (1, 2, 3, 4) parodo rezultatus, esant įvairiems santykiniams pagrindo dalelės tamprumo moduliams, t. y.: $\zeta_1 = 1, \zeta_2 = 10, \zeta_3 = 100, \zeta_4 = 1000$.

Nustatyta, jog pagrindo (dalelės) didėjimas bei kietėjimas, atitinkamai didinant pagrindo spindulį bei tamprumo modulį, įtakoja maksimalaus poslinkio rezultatus, kurie turi nusistovėjimo tendenciją. Ši tendencija išlaikoma esant ir kitiems sąveikos parametrams: sąveikos periodui T_c , maksimaliam pagreičiui a_U bei atšokimo greičiui v_D .

Iš 3.5 paveikslo galima stebėti didėjančio santykinio pagrindo spindulio r įtaką santykinio maksimalaus poslinkio h_U^* reikšmei. Poslinkio h_U reikšmė mažėja ir priartėja prie sprendinio $h_{U,stiff}$, tai atitinka santykinio poslinkio reikšmę $h_U^* = h_U/h_{U,stiff} = 1$. Iš 3.5 paveikslo patyti, jog kreivės 3 ir 4 sutapo. Tai paaiškina reikšmės h_U konvergavimu esant tampriai pusei.

Dėl padidėjusio pagrindo-dalelės tamprumo modulio ir spindulio, rezultatų reikšmės konverguoja prie atitinkamų ribų, kaip ir esant kontaktui be adhezijos. Remiantis rezultatais, patvirtinama buvusi išvada, jog santykinis pagrindo dalelės $r = 100$ spindulys ir santykinis pagrindo tamprumo modulis $\zeta = 100$ galėtų būti laikomi ribinėmis reikšmėmis, apibūdinant pagrindą kaip tamprią ar absoliučiai kietą puserdę.

3.2. Energijos sklaidos mechanizmų tyrimas

Skyrelyje tiriami su adhezija ir klampiu slopinimu susieti energijos sklaidos mechanizmai. Tyrimui atlikti taikomas skaitinis DEM eksperimentas. Siekiama iširti ir atskleisti tiek pavienių sklaidos mechanizmų, tiek jų tarpusavio kombinacijų įtaką dalelių sąveikai. Modeliuojamos ultrasmulkios dalelės ir pagrindo parametrai paimti iš 3.1 ir 3.2 lentelių. Energijos sklaidos mechanizmų įtaka tirama, pateikiant atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 grafikus. Pradinis greitis kinta nuo kritinio sulipimo greičio v_{cr} iki 30 m/s. Esant mažesniai nei v_{cr} pradiniam greičiui, sąveikaujanti dalelė sulimpa su pagrindu, o atsistatymo koeficientas $e = 0$.

3.2.1. Energijos sklaida, siejama su adhezija

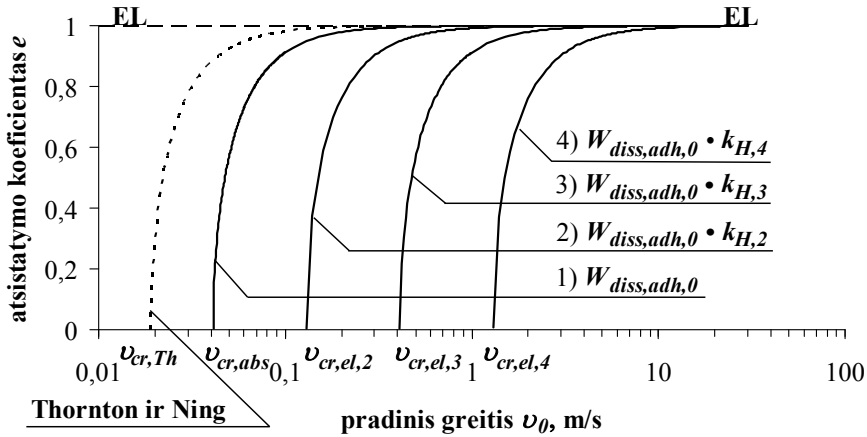
Ultrasmulkios sferinės dalelės normalinė sąveika su plokščiu pagrindo paviršiumi tirta skaitiškai, taikant DEM. Sąveika yra adhezinė tampri, ji įvertinama trumpo nuotolio Van der Valso jėga.

Skyrelyje siekiama iširti sklaidos mechanizmo įtaką tampriai adheazinei sąveikai ir įvertinti energijos absorbciją, dalelei atšokus į pradinę padėtį. Tiriamas sudarytas energijos sklaidos mechanizmas, kuris yra siejamas su adhezija ir aprašytas 2 skyriuje. Adhezinės tamprios sąveikos modelis yra aprašomas jėgomis, pateiktomis formulėse (2.4, 2.5, 2.25, 2.26). Pirmiausia yra tiriamas absorbcijos

energijos $W_{diss,abs}$ poveikis, kuris laikomas proporcingu energijos sklaidai dėl adhezijos $W_{diss,adh}$ ir kontroliuojamas faktoriumi k_H :

$$W_{diss,abs} = W_{diss,adh} = k_H \cdot F_{H0} \cdot a_{F=0} = k_H \cdot W_{diss,adh,0} \quad (3.11)$$

Fiksuotas energijos sklaidos kiekis nustatomas analitiškai, remiantis formule (2.21). Jis pažymėtas formulėje (3.11) $W_{diss,adh,0} = F_{H0} \cdot a_{F=0}$ ir visuose skaičiavimuose apibrėžiamas kaip *const*. Kai su adhezija siejamos energijos sklaidos koeficientas $k_H = 1$, sąveikos pabaigoje absorbuotos energijos kiekis yra lygus $W_{diss,abs} = W_{diss,adh,0} = 1,68 \cdot 10^{-18}$ J. Koeficientas k_H naudojamas, kai norima įvertinti adhezijos poveikį, kuris apima ne tik Van der Valso jėgas, bet ir kitus adhezijos efektus, aprašytus 1.1.1. skyrelyje. Šis koeficientas yra siejamas su sudarytu sklaidos mechanizmu. Įvedus koeficientą k_H , su sklaida dėl adhezijos siejama jėga $F_{diss,adh,W}$, yra aprašoma: $F_{diss,adh,W} = k_H \cdot 2 \cdot W_{diss,adh,0} \cdot (a_{F=0} + h_U - h_A)^{-1}$.



3.6 pav. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo pradinio greičio v_0 , esant adheziniai tampriai silicio dalelės sąveikai, kai absorbcijos energijos reikšmės yra įvairios.

Energijos sklaidos koeficientai: $k_{H,2} = 10$; $k_{H,3} = 100$; $k_{H,4} = 1000$

Fig. 3.6. Variations of coefficient of restitution e depending on initial velocity v_0 at adhesive elastic silica interaction with various values of energy absorbtion.

Coefficients of energy dissipation are: $k_{H,2} = 10$; $k_{H,3} = 100$; $k_{H,4} = 1000$

Skaitinio modeliavimo rezultatai pavaizduoti 3.6 paveiksle. Kreivės 1–4 yra gautos skaitiškai. Šios kreivės nubraižytos, esant skirtingoms absorbcijos energijos reikšmėms, taikant adhezinės sklaidos bedimensius koeficientus: $k_{H,2} = 10$; $k_{H,3} = 100$; $k_{H,4} = 1000$. Linija EL rodo atsistatymo koeficiento e ribą, esant adhe-

zinei tampriai sąveikai. Ši riba atitinka atsistatymo koeficiento $e = 1$ rezultatus, taikant DMT modelį. Skaitinis rezultatas palyginamas su įvertinančiu adheziją JKR adheziniu tampriu kontakto modeliu. Pateikiamas šio modelio analitinis sprendinys (Thornton ir Ning 1998), pavaizduotas punktyrine linija. Skaičiuojama, naudojant sandūros (paviršiaus) energiją, lygią $W_A = 2 \cdot \gamma_A = 2 \cdot \sigma_{sls}$ (žr. Tomas 2007 a,b). Čia paviršiaus įtempimas σ_{sls} apskaičiuojamas formule (1.14).

Visos 3.6 paveikslą kreivės atkartoja vienodą tendenciją – didėjant pradiniam greičiui, atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 funkcija artėja prie sprendinio, neįvertinančio energijos sklaidos, siejamos su adhezija. Daroma išvada, jog didėjant pradiniam greičiui, pradinė kinetinė energija taip pat didėja, tačiau mažėja su adhezija siejamos energijos sklaidos įtaka, t. y. prie didelių greičių adhezijos poveikis yra nereikšminis. Atsistatymo koeficientas konverguoja iki $e = 1$ ribos, pažymėtos punktyrine linija EL.

Taikant sudarytą sąveikos modelį ir įvertinus sklaidos energiją $W_{diss,adh}$, apibrėžiama dalelės atšokimo-sulipimo sritis bei slenkstinis kritinis sulipimo greitis

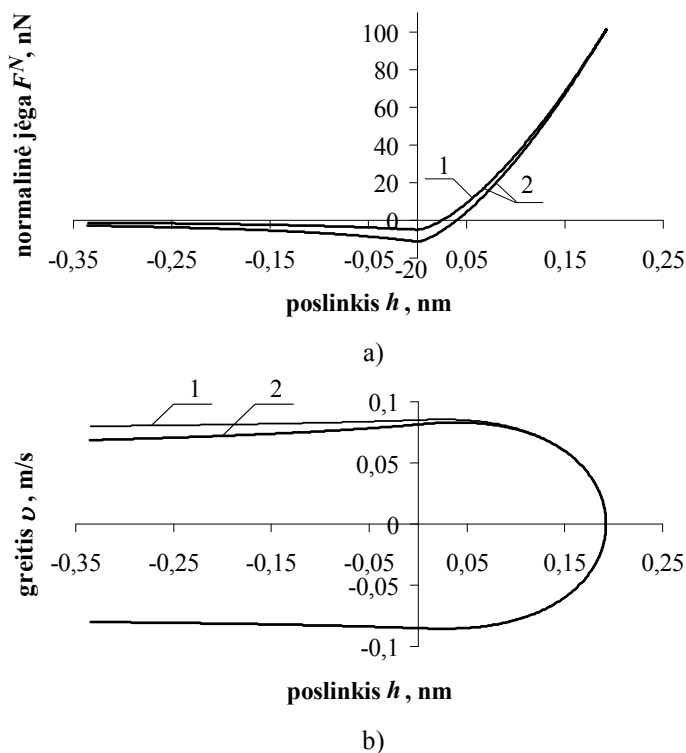
$$v_{cr} = \sqrt{(2 \cdot k_H \cdot W_{diss,adh,0}) / m_i}.$$

Jei pradinės kinetinės energijos $E_{kinetic,0}$ neužtenka, m_i masės dalelė neatšoka į pradinę padėtį. Pastebima, jog išsklaidytos energijos augimas gali padidinti kritinį sulipimo greitį.

Visos kreivės yra charakterizuojamos kritiniu sulipimo greičiu v_{cr} . 1 kreivė yra apskaičiuota, remiantis DMT modeliu, kuris lemia kritinį sulipimo greitį $v_{cr,abs} = 0,041$ m/s. Esant kritiniam sulipimo greičiui, remiantis JKR modeliu ir taikant analitinį sprendinį, reikšmė yra mažesnė ($v_{cr,Th} = 0,019$ m/s). Analitinio ir skaitinio atsistatymo koeficientų priklausomybių nuo pradinio greičio sprendinio skirtumai atsirado dėl skirtingos absorbuotos energijos, kadangi Thornton ir Ning (1998) naudoja JKR modelį ir gauna mažesnę absorbuotos energijos reikšmę, lyginant su DMT modeliu (formulė 1.13).

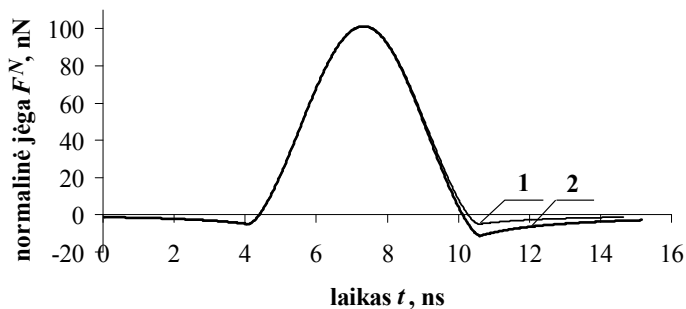
Pastebima, jog lyginant su žinomais adhezinio kontakto modeliais (DMT, JKR, MD), taikant sudarytą energijos sklaidos mechanizmą ir didinant koeficientą k_H , galima gauti didesnę kritinio sulipimo greičio v_{cr} reikšmę, t. y. apimti platesnę dalelės pradinių greičių sritį, prie kurių dalelė sulimpa. Sukurtas modelis apima didesnę išsklaidytos energijos kiekį. Be to, esant adhezinei tampriai sąveikai visi rezultatai gali būti aprašyti ta pačia analitine formule $e = [1 - (v_{cr}/v_0)]^{1/2}$ (žr. Thornton ir Ning 1998). Tai parodo, jog lyginant su esamais žinomais modeliais, įvertinančiais adhezijos poveikį, atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio greičio funkcijos pobūdis yra vienodas, aprašomas analitine išraiška. Ši tendencija išlieka, didinant koeficientą k_H (3.6 paveikslas, $k_{H,2}$, $k_{H,3}$, $k_{H,4}$) visose kreivėse. Parodomas skaičiavimo metodo tikslumas, kadangi analitiniai rezultatai visiškai sutapo su skaitiniais. Taikant sudarytą formulę (2.43), aprašančią kritinį sulipimo greitį, gauti rezultatai patvirtina,

kad visos kritinio sulipimo greičio skaitinės reikšmės sutampa su analitiniu sprendiniu ir tiksliai derinasi su kvadratine šaknimi, taikant proporcingumo faktorių $\sqrt{k_H}$. Šie rezultatai įrodo pasiūlyto sąveikos modelio ir sklaidos mechanizmo teisingumą bei skaitinio modeliavimo tikslumą.

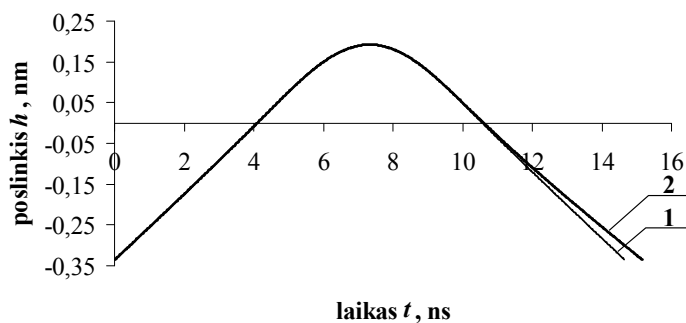


3.7 pav. Adhezinė tampri sąveika: 1 – neįvertinus sudaryto energijos sklaidos mechanizmo, siejamo su adhezija, 2 – įvertinus sudarytą energijos sklaidos mechanizmą. a – normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h , b – greičio v priklausomybė nuo poslinkio h . Pradinis greitis $v_0 = -0,08$ m/s

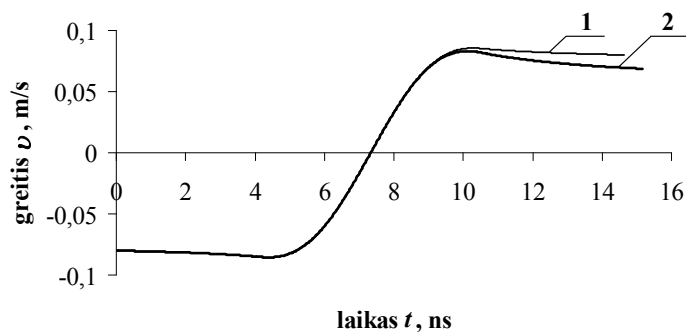
Fig. 3.7. Adhesive elastic interaction: 1 – not included energy dissipation mechanism, related with adhesion, 2 – included. a – normal force F^N versus displacement h , b – velocity v versus displacement h . Initial velocity $v_0 = -0,08$ m/s



a)



b)



c)

3.8 pav. Adhezinė tampri sąveika: 1 – neįvertinus sudaryto energijos sklaidos mechanizmo, siejamo su adhezija, 2 – įvertinus energijos sklaidos mechanizmą.
a – normalinės jėgos F^N , b – poslinkio h , c – greičio v istorija.

Pradinis greitis $v_0 = -0,08$ m/s

Fig. 3.8. Adhesive elastic interaction: 1 – not included energy dissipation mechanism, related with adhesion, 2 – included. a – normal force F^N , b – displacement h , c – velocity v history. Initial velocity $v_0 = -0,08$ m/s

3.6 paveiksle nubraižytos kreivės vaizduoja bendrą sąveikos metu išsklaidytą energiją. Papildomai nubraižyti 3.7 ir 3.8 paveikslai, parodantys dalelės elgseną. 3.7 ir 3.8 paveiksluose (kreivė 2) pateikiamas atskiras 3.6 paveikslo (kreivė 1) sprendinys, esant pradiniam greičiui $v_0 = -0,08$ m/s, kai atsistatymo koeficiento reikšmė $e = 0,86$. Papildomai pateikiamas 3.6 paveikslo sprendinys (atsistatymo koeficiento e riba EL), 3.7 ir 3.8 paveikslai (kreivė 1).

Pastebima, jog pritaikius sudarytą su adhezija siejamos energijos sklaidos mechanizmą, dalelės sąveika trunka ilgiau. Dalelė atitruksta nuo paviršiaus esant didesnei traukos jėgai ir atšoka mažesniu greičiu.

3.2.2. Energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu

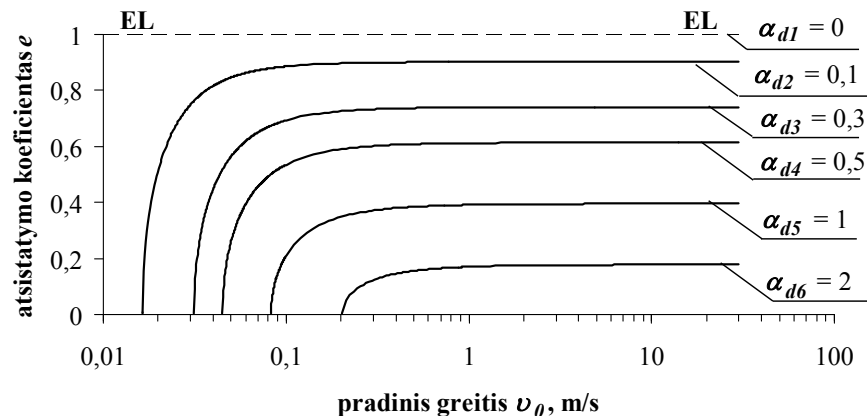
Skyrelyje siekiama atskleisti ir ištirti energijos sklaidos mechanizmus, siejamus su klampiu slopinimu, esant ultrasmulkios dalelės normalinei sąveikai. Pateikiami paveikslai, kuriuose pavaizduota atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo pradinio greičio v_0 . Taikomas pasiūlytas korektiškas klampaus slopinimo mechanizmas. Sudarytas adhezinis sklaidos mechanizmas nėra taikomas.

3.9 paveiksle pavaizduota slopinimo įtaka adhezinėje tamprioje sąveikoje. Taikant skirtingus slopinimo koeficientus α_d , įvertinamas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su klampiu slopinimu. Gauti rezultatai palyginami su sprendiniu, neįvertinus energijos sklaidos, siejamos su adhezija bei klampiu slopinimu, poveikio. Kai slopinimo koeficientas $\alpha_{dl} = 0$, šis sprendinys pavaizduotas punktyrine linija.

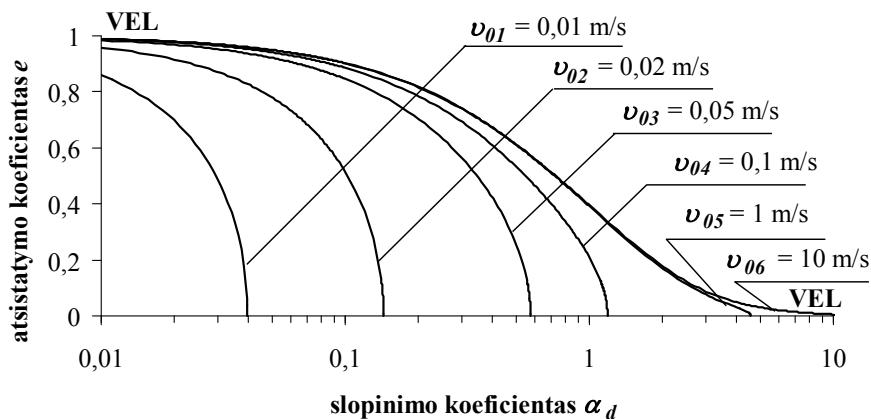
Kadangi dalelės sąveika apima neigiamas normalines jėgas, dalelė gali ne tik atšokti, bet ir sulipti. Tai įvyksta dėl energijos sklaidos, siejamos su klampiu slopinimu bei taikant adhezinę sąveiką. Toliau apibrėžiamos sulipimo-atšokimo sritys. Pastebima, jog didinant slopinimo koeficientą $\alpha_d = 0,1; 0,3; 0,5; 1; 2$, didėja energijos sklaida ir kritinis sulipimo greitis, tačiau mažėja atsistatymo koeficientas. Tai rodo, kad didėjant slopinimui, didėja energijos sklaida bei gali būti apibrėžtos didesnės pradinio kritinio sulipimo greičio v_{cr} reikšmės, tačiau atsistatymo koeficientas žymiai sumažėja. Pasirinkus slopinimo koeficiento reikšmę $\alpha_{d6} = 2$ (3.9 a paveikslas), kritinis sulipimo greitis yra lygus $v_{cr,6} = 0,2$ m/s. Didėjant pradiniam greičiui v_0 , didžiausia pasiekiamą atsistatymo koeficiento reikšmė yra $e = 0,2$. Parodoma, jog taikant energijos sklaidos mechanizmą, galima įvertinti sulipimo sąlygas, tačiau sudaryti sklaidos mechanizmai veikia skirtingai.

Ankstesniame skyrelyje buvo teigiama, jog taikant adhezinį sklaidos mechanizmą ir didinant išsklaidytos energijos kiekį, funkcijos pobūdis išlieka toks pats. Šiame skyrelyje, taikant klampaus slopinimo mechanizmą ir didinant slopinimo koeficientą α_d , atsistatymo koeficiento reikšmės e mažėja. Taikant dideles slopi-

nimo koeficiento reikšmės, apimamos didesnės kritinio sulipimo greičio reikšmės, tačiau, kaip jau minėta, atsistatymo koeficiento reikšmės stipriai sumažėja.



a)



b)

3.9 pav. Adhezinė klampiai tampri sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo: a – pradinio greičio v_0 , b – slopinimo koeficiento α_d

Fig. 3.9. Adhesive viscous elastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on: a – initial velocity v_0 , b – damping coefficient α_d

Klampauso slopinimo įtaka dalelės sąveikai su pagrindu pavaizduota 3.9 b paveiksle. Pastebėta, kad didėjant pradiniam greičiui v_0 , skaitinio eksperimento rezultatai artėja prie sprendinio VEL, neįvertinančio adhezijos poveikio. VEL atitinka atsistatymo koeficiento e ribą adheziniai klampiai tampriai sąveikai, tai-

kant sudarytą klampaus slopinimo mechanizmą. Ši kreivė atitinka 2.10 paveiksle pateiktą kreivę 3. Daroma išvada, jog esant dideliems pradiniam greičiams adhezijos poveikis tampa nereikšminis. Taip pat pastebima, kad esant didesniems dalelės pradiniam greičiams, dalelė gali atšokti į pradinę padėtį, esant didesnėms slopinimo koeficiento α_d reikšmėms.

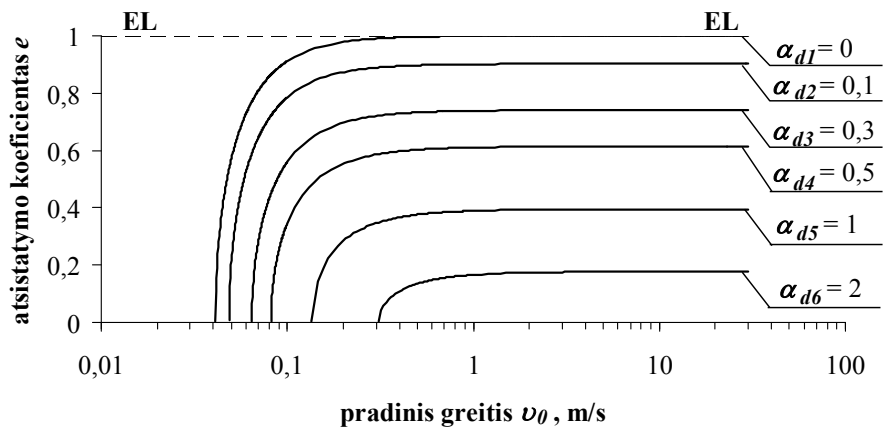
3.2.3. Energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu ir adhezija

Skyrelyje siekiama atskleisti ir ištirti dviejų sudarytų energijos sklaidos mechanizmų, siejamų su klampiu slopinimu bei adhezija, įtaką ultrasmulkios dalelės normalinei sąveikai. Tiriama atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo pradinio greičio v_0 . Sudarytas sąveikos modelis, apimantis du energijos sklaidos mechanizmus.

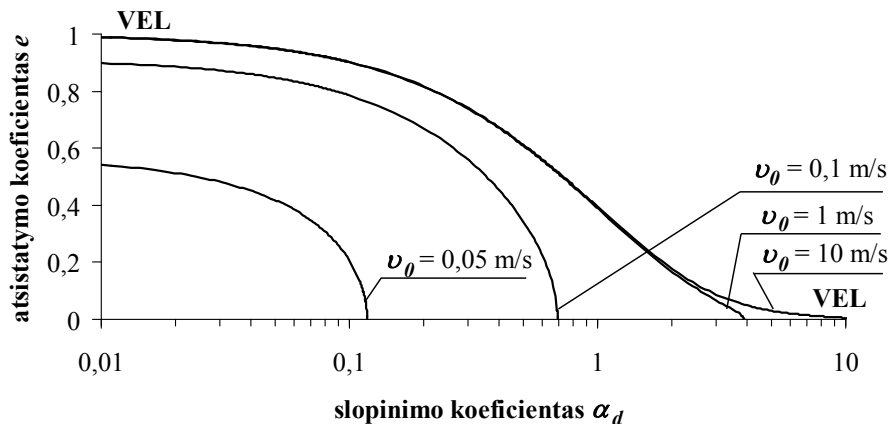
Taikomi du sąveikos modelyje sudaryti energijos sklaidos mechanizmai: 1) korektiškas, klampaus slopinimo mechanizmas; 2) su adhezija siejamas energijos sklaidos mechanizmas. Su adhezija siejamas išsklaidytos energijos kiekis $W_{diss,adh,0}$ nėra didinamas, t. y. energijos sklaidos koeficientas $k_H = 1$.

3.10 a paveiksle pastebimos analogiškos tendencijos kaip ir 3.9 a paveiksle: didinant slopinimo koeficientą $\alpha_d = 0,1; 0,3; 0,5; 1; 2$, didėja energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu. Tuo pačiu didėja kritinis sulipimo greitis (dalelė sulimpa prie didesnių greičių), bet žymiai sumažėja atsistatymo koeficientas.

Kai slopinimo koeficiento reikšmė lygi $\alpha_{d6} = 2$ (3.10 a paveikslas), kritinis sulipimo greitis lygus $v_{cr,6} = 0,3$ m/s. Didėjant pradiniam greičiui v_0 , didžiausia pasiekta atsistatymo koeficiento reikšmė yra $e = 0,2$. 3.10 a paveiksle pateikti rezultatai apima du energijos sklaidos mechanizmus, todėl, lyginant su 3.9 a paveikslu, išsklaidytos energijos kiekis yra didesnis. Taip atsitinka, kadangi energija sklaidosi papildomai įvertinus energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su adhezija, tuo pačiu didesnis ir kiekvienos kreivės kritinis sulipimo greitis (3.10 a paveikslas). Lyginant su 3.9 a paveikslu, kai pradiniai greičiai $v_0 = 0,01$ m/s ir $v_0 = 0,02$ m/s, sprendinių nėra, nes esant papildomai energijos sklaidai kritinis sulipimo greitis – didesnis (dalelė atšoka į pradinę padėtį esant didesniems pradiniam greičiams). 3.9 b ir 3.10 b paveiksluose pastebima bendra tendencija, jog didėjant pradiniam greičiui v_0 , atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio greičio sprendinys artėja prie atsistatymo koeficiento e ribinės kreivės VEL, neįvertinant su adhezija siejamos energijos sklaidos.



a)



b)

3.10 pav. Adhezinė klampiai tampri sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo: a – pradinio greičio v_0 , b – slopinimo koeficiento α_d .

Pritaikytas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su adhezija

Fig. 3.10. Adhesive viscous elastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on: a – initial velocity v_0 , b – damping coefficient α_d .

Included energy dissipation mechanism, related with adhesion

VEL kreivė pateikta 3.10 b paveiksle. Kai dalelės pradinis greitis yra $v_0 = 10$ m/s, atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio greičio kreivė apytiksliai sutampa su VEL kreive. Dar kartą patvirtinama nuostata, jog didėjant pradiniam greičiui adhezijos poveikis yra nereikšminis.

3.3. Trečiojo skyriaus išvados

1. Modeliuojant pagrindą kaip sferinę dalelę, dalelės kontakto maksimalaus poslinkio parametras, padidėjus pagrindo dalelės tamprumo moduliui ir spinduliui, konverguoja prie ribos, atitinkančios kietą puserdvę. Pasiūlytos ribinės reikšmės apibrėžiamos santykinio pagrindo tamprumo modulio koeficiento reikšme 100 ir santykinio pagrindo spindulio koeficiento reikšme 100. Šios reikšmės galėtų būti naudingos, modeliuojant DEM.

2. Atlikus eksperimentą pastebėta, jog siejamas su adhezija sklaidos mechanizmas dominuoja nustatant dalelės kritinį sulipimo greitį bei apibrėžiant sulipimo-atšokimo sąlygą. Didėjant pradiniam sąveikos greičiui, kai jis yra didesnis nei kritinis sulipimo greitis, mažėja adhezijos poveikis, jis tampa nereikšminis.

3. Įvertinus sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su klampiu slopinimu, didinant slopinimo koeficientą mažėja atsistatymo koeficiento reikšmė, kuri tampa mažesnė už 1 ir gali priartėti prie 0. Sudarytas su klampiu slopinimu siejamas energijos sklaidos mechanizmas yra fiziškai korektiškas ir neapima neigiamų jėgų, kurios būdingos adhezijai. Lyginant su esamais klampiais tampraus kontakto modeliais (Tsuji, Brilliantov, Kuwabara ir Kono), kadangi sudarytas modelis neapima neigiamų jėgų, didėjant pradiniam sąveikos greičiui, dalelė gali atšokti į pradinę padėtį, esant didesnei slopinimo koeficiento reikšmei, todėl apimamos didesnės atsistatymo koeficiento reikšmės.

Tampriai plastinės dalelės sąveikos skaitinis tyrimas

Šiame skyrelyje tiriami su adhezija ir klampiu slopinimu siejami energijos sklaidos mechanizmai, kai sąveika apima tampriai plastinį kontaktą. Tyrimui atlikti taikomas skaitinis DEM eksperimentas. Sprendžiant dalelės sąveikos uždavinį, taikomas sudarytas teorinis modelis. Siekiama ištirti dalelės atšokimo sąlygas ir atskleisti tiek pavienių sklaidos mechanizmų, tiek jų tarpusavio kombinacijų įtaką dalelių sąveikai. Stengiamasi įrodyti, jog ultrasmulkios dalelės adhezinę sąveiką gali skirtingai įtakoti įvairūs sklaidos mechanizmai. Sklaidos įtakai įvertinti pasirinktas dalelės atsistatymo koeficiento e tyrimas.

Skyriaus tematikos medžiaga atspindi tokius autoriaus su bendraautoriais paskelbtus straipsnius: Jasevičius *et al.* (2007, 2008, 2009, 2010).

4.1. Energijos sklaidos mechanizmų tyrimas

Tiriant normalinę dalelės sąveiką yra įvertinami trys energijos sklaidos mechanizmai, kurie siejami su tampriai plastiniu kontaktu, klampiu slopinimu bei adhezija. Skaitinis eksperimentas atliekamas, tiriant silicio dioksido (SiO_2) dalelės normalinę sąveiką su plokščiu deformuojamo pagrindo paviršiumi. Modeliuo-

jamos ultrasmulkios dalelės ir pagrindo parametrai paimti iš 3.1 ir 3.2 lentelių. Energijos sklaidos mechanizmų įtaka tirama, pateikiant atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 grafiką. Pradinis greitis kinta nuo kritinio sulipimo greičio v_{cr} iki 30 m/s. Esant mažesniajam pradiniam greičiui nei v_{cr} , sąveikaujanti dalelė sulimpa su pagrindu, o atsistatymo koeficientas $e = 0$.

Sąveikos tyrimai su kalcio karbonato dalele (CaCO_3) galėtų būti rasti Jasevičius *et al.* (2008, 2009).

4.1.1. Energijos sklaida, siejama su adhezija

Taikant sudarytą energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmą, siekiama ištirti tampriai plastinę ultrasmulkios dalelės sąveiką su pagrindu. Modeliuojamos ultrasmulkios dalelės ir pagrindo parametrai pateikti 3.1. skyrelyje.

Tiriamas modelis susideda iš adhezinės tamprios ir tampriai plastinės sąveikų, įvertinant Van der Valso jėgas. Darbe siekiama ištirti energijos absorbcijos įtaką dalelės sąveikai.

Sudarytas sąveikos modelis buvo pritaikytas diskrečiųjų elementų metode. Remiantis statiniais eksperimentais (Tomas 2004), buvo pasirinktos dalelės mikrotakumo įtempių reikšmės $p_f = 300$ MPa ir $p_f = 650$ MPa, kurios laikomos ribinėmis ir taikomos apibrėžiant atsistatymo koeficiento ribines reikšmes.

Skaitiniame tyrime taikomas sudarytas adhezinės tampriai plastinės sąveikos modelis, aprašomas formulėmis (2.4, 2.5, 2.25, 2.46, 2.48). Įvedus koeficientą k_H , su sklaida dėl adhezijos siejama jėga $F_{diss,adh,W}$, kaip ir tamprios sąveikos atveju, yra aprašoma sekančiai: $F_{diss,adh,W} = k_H \cdot 2 \cdot W_{diss,adh,0} \cdot (a_{F=0} + h_U - h_A)^{-1}$.

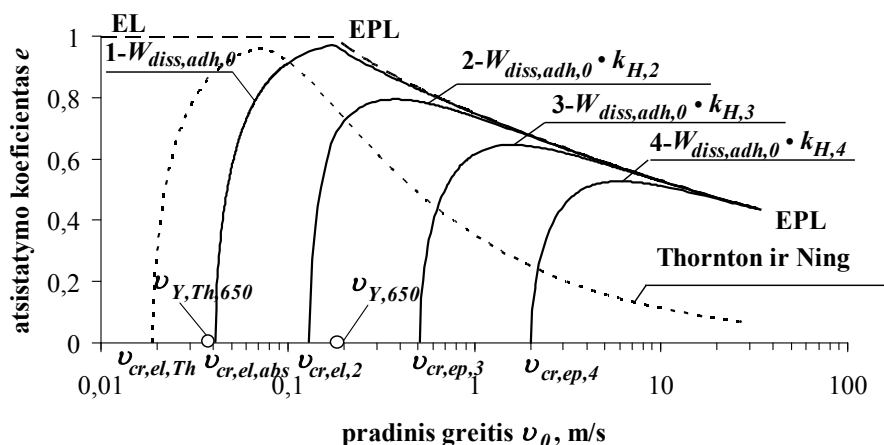
Dalelės plastiškumo savybės yra apibrėžiamos pagal mikrotakumo įtempio reikšmę $p_f = 650$ MPa, kai plastinis stūmos koeficientas $\kappa_p = 0,07$. Atliekamas modeliavimas analogiškas, kaip ir adhezinėje tamprioje sąveikoje: naudojant tuos pačius tamprumo duomenis, nagrinėjamas absorbcijos energijos $W_{diss,abs}$ poveikis.

4.1 paveiksle pateiktos kreivės (1–4) gautos, kai su adhezija susietos sklaidos bedimensiniai koeficientai yra: $k_{H,2} = 10$; $k_{H,3} = 100$; $k_{H,4} = 1000$, o su adhezija siejamas energijos sklaidos kiekis yra $W_{diss,adh,0} = F_{H0} \cdot a_{F=0} = 1,68 \cdot 10^{-18}$ J. Kreivės 1 ir 2 prasideda tampriomis atšakomis, atitinkančiomis adhezinę tamprią sąveiką. Šios atšakos atitinka dalelių sąveikos rezultatus, kai absorbuotos energijos kiekis sąveikai pasibaigus $W_{diss,abs} = W_{diss,abs,el} = W_{diss,adh}$. Esant adhezinėi tampriai plastinei sąveikai absorbuotos energijos kiekis lygus $W_{diss,abs} = W_{diss,abs,el-pl}$. Skirtingai nei esant tampriai sąveikai, pasibaigus tampriai plastinei sąveikai išsklaidytos energijos kiekis yra didesnis, kadangi papildomos įtakos turi su tampriai plastiniu kontaktu siejama energijos sklaida. Be to, didesnis išsklaidytos energijos kiekis, siejamas su adhezija. Tai įvertinus $W_{diss,abs,el-pl} > W_{diss,abs,el}$.

Pateikiant rezultatus (4.1 paveikslas) įvertintas greitis v_Y atitinka pradinį greitį, kurio dalelei pakanka, kad kontakto metu ji pasiektų takumo ribą. Šis grei-

tis adhezinėje tampriai plastinėje sąveikoje priklauso nuo mikrotakumo įtempio p_f reikšmės ir 4.1 paveiksle žymimas $v_{Y,650}$, pažymint, kad $p_f = 650$ MPa. Įvedus energijos sklaidos bedimensį koeficientą k_H ir jį didinant, takumo ribą apimantis pradinis greitis nesikeis. Tačiau pastebima, kad kreivių 3, 4 kritiniai sulipimo greičiai $v_{cr,ep,3}$, $v_{cr,ep,4}$ yra didesni, nei $v_{Y,650}$. Tokiu atveju pradinę padėtį pasiekusios dalelės kontaktas buvo tampriai plastinis. Svarbu pažymėti, kad kai pradinis greitis yra mažesnis nei v_Y , kontaktas laikomas tampriu. Lyginant su žinomais sprendiniais, apimantis takumo ribą Thornton ir Ning analitinio sprendinio pradinis greitis pažymėtas $v_{Y,Th}$.

Didėjant absorbcijos energijos reikšmei, mažėjančios visų kreivių atsistatymo koeficiento e atšakos konverguoja link vienos kreivės, pažymėtos EPL. Ši kreivė bus laikoma ribine, nes ji apriboja atsistatymo koeficiento e reikšmes.



4.1 pav. Adhezinė tampriai plastinė sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo pradinio greičio v_0 , esant įvairioms absorbuotos energijos reikšmėms.

Mikrotakumo įtempis $p_f = 650$ MPa

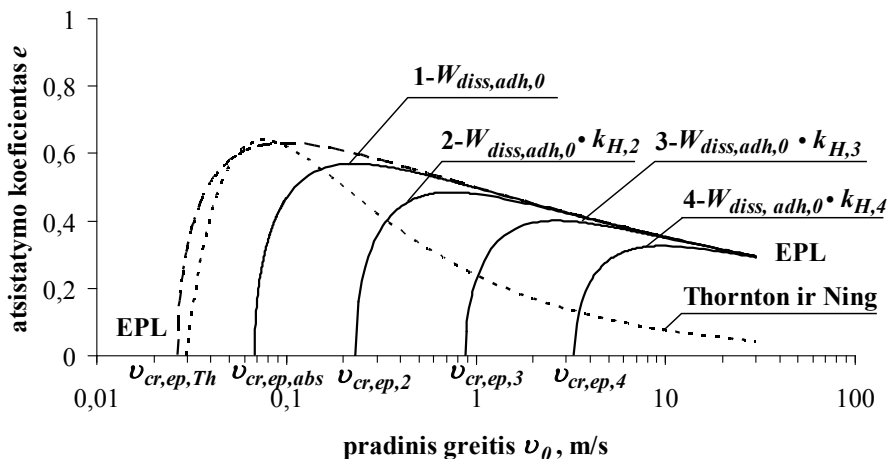
Fig. 4.1. Adhesive elastic-plastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on initial velocity v_0 with different absorption energy values.

Micro-yield strength $p_f = 650$ MPa

Skaitinis sprendinys yra palygintas su žinomo modelio atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio greičio analitine išraiška. Remiantis JKR modeliu, Thornton ir Ning (1998) pasiūlytas analitinis sprendinys 4.1 paveiksle pavaizduotas taškine linija. Minėtas modelis įvertina energijos sklaidą, siejamą su tampriai plastiniu kontaktu bei adhezija. Šis sprendinys gautas atlikus skaitinius skaičiavimus, kai mikrotakumo įtempis p_f yra vienodas visoms kreivėms.

Analitinis (remiantis JKR modeliu) ir skaitinis (remiantis DMT modeliu) sprendiniai charakterizuojami kritiniais sulipimo greičiais $v_{cr,Th}$ ir $v_{cr,abs}$. Kritinio sulipimo greičio reikšmės priskiriamos tampriam sprendiniui ir yra pavaizduotos 4.1 paveiksle, 1–2 kreivėse. 3 ir 4 kreivėse pavaizduotas kritinis sulipimo greitis yra paveiktas energijos sklaidos, kuri susieta su tampriai plastiniu kontaktu. Didėjant pradiniam greičiui, atsistatymo koeficientas taip pat pradeda didėti.

Akivaizdu, jog skaitiniai rezultatai, gauti remiantis DMT teorija, duoda didesnes atsistatymo koeficiento e reikšmes. Taip yra todėl, kad detalizuotas analitinis modelis deformavimosi metu neįvertina adhezijos poveikio sąveikos perimetro išorėje. Lyginant sudarytą modelį su Thornton ir Ning analitiniu sprendiniu, atsistatymo koeficiento e kreivių skirtumas bei jų pasvirimas kritimo dalyje galėtų būti paaiškintas skirtingu adhezijos jėgų įvertinimu, nors plastiškumo prielaidos ir nėra identiškos. Sąveikos ypatumus paaiškina papildomi skaičiavimai.



4.2 pav. Adhezinė tampriai plastinė sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo pradinio greičio v_0 , esant įvairioms absorbuotos energijos reikšmėms.

Mikrotakumo įtempis $p_f = 300$ MPa

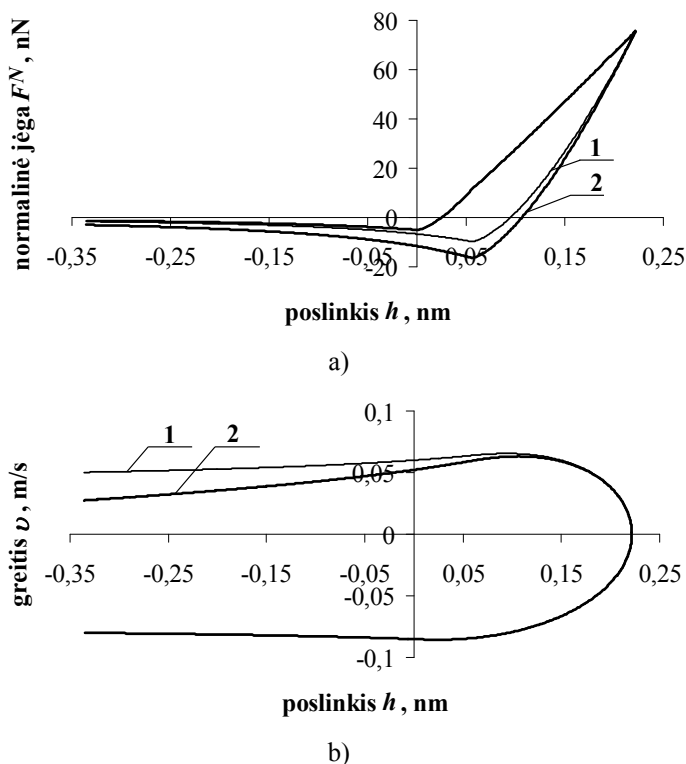
Fig. 4.2. Adhesive elastic-plastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on initial velocity v_0 with different absorbion energy values.

Micro-yield strength $p_f = 300$ MPa

4.2 paveiksle pateikti atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio greičio rezultatai, kai absorbuotos energijos reikšmės yra įvairios. Kreivės 1–4 gautos, kai sklaidos, susietos su adhezija, bedimensiniai koeficientai lygūs $k_{H,2} = 10$, $k_{H,3} = 100$, $k_{H,4} = 1000$. Mikrotakumo įtempio reikšmė $p_f = 300$ MPa, o plastinis stūmos koeficientas $\kappa_p = 0,152$. Kai su adhezija siejamos energijos

sklaidos koeficientas $k_H = 1$, sąveikos pabaigoje siejamas su adhezija išsklaidytas energijos kiekis $W_{diss,adh,0} = 1,68 \cdot 10^{-18}$ J. Kreivė EPL atitinka adhezinės tampriai plastinės sąveikos atsistatymo koeficiento ribą.

Esant adhezeinei tampriai plastinei sąveikai, kai mikrotakumo įtempio reikšmė yra $p_f = 650$ MPa, lyginant su $p_f = 300$ MPa, atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio greičio sprendinys EPL prie mažų greičių apima adhezinės tamprios sąveikos sprendinį EL. Šis sprendinys atitinka adhezinės tamprios sąveikos atsistatymo koeficiento ribą, neįvertinus energijos sklaidos mechanizmų. Esant tokiai sąveikai, atsistatymo koeficiento reikšmė $e = 1$.



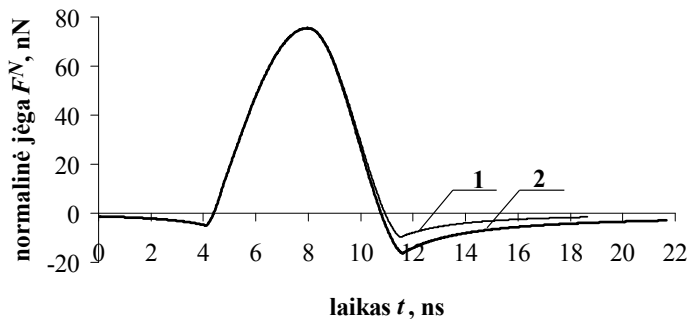
4.3 pav. Adhezinė tampriai plastinė sąveika: 1 – neįvertinus sudaryto energijos sklaidos mechanizmo, siejamo su adhezija, 2 – įvertinus.

a – normalinės jėgos F^N priklausomybė nuo poslinkio h , b – greičio v priklausomybė nuo poslinkio h . Pradinis greitis $v_0 = -0,08$ m/s, mikrotakumo įtempis $p_f = 300$ MPa

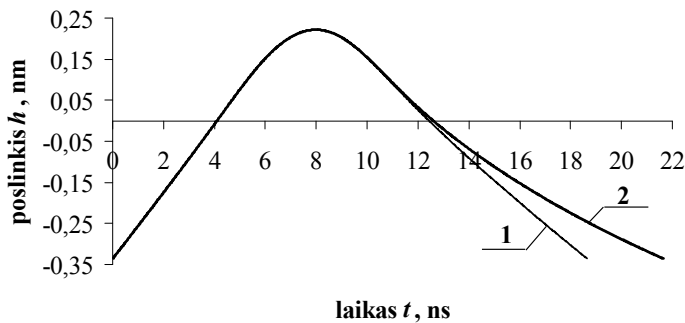
Fig. 4.3. Adhesive elastic-plastic interaction: 1 – not included energy dissipation mechanism, related with adhesion, 2 – included.

a – normal force F^N versus displacement h , b – velocity v versus displacement h .

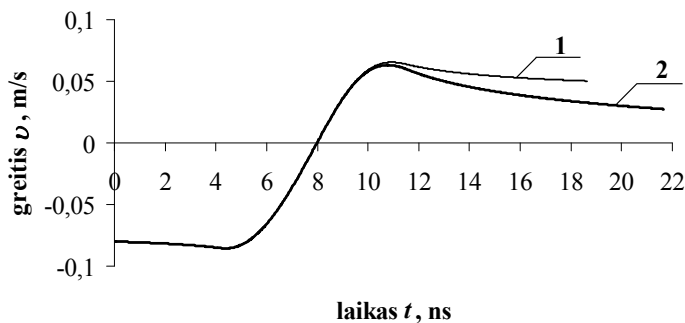
Initial velocity $v_0 = -0,08$ m/s, micro-yield strength $p_f = 300$ MPa



a)



b)



c)

4.4 pav. Adhezinė tampriai plastinė sąveika: 1 – neįvertinus sudaryto energijos sklaidos mechanizmo, siejamo su adhezija, 2 – įvertinus. a – normalinės jėgos F^N , b – poslinkio h , c – greičio v istorija. Pradinis greitis $v_0 = -0,08$ m/s, mikrotakumo įtempis $p_f = 300$ MPa

Fig. 4.4. Adhesive elastic-plastic interaction: 1 – not included energy dissipation mechanism, related with adhesion, 2 – included. a – normal force F^N , b – displacement h , c – velocity v history. Initial velocity $v_0 = -0,08$ m/s, micro-yield strength $p_f = 300$ MPa

Taikant mažesnę mikrotakumo įtempį $p_f = 300$ MPa ir neįvertinus siejamo su adhezija sudaryto energijos sklaidos mechanizmo, prie mažų pradinių greičių dalelė sulips. Kreivė EPL prie mažų greičių apima atsistatymo koeficiento nulio reikšmes. Minėti atvejai laikomi ribomis, su kuriomis yra palyginami skaitinio eksperimento rezultatai, taikant sudarytą energijos sklaidos mechanizmą. Daroma išvada, jog adhezinės sąveikos metu, taikant mažesnę mikrotakumo įtempio p_f reikšmę, energijos sklaida, siejama su plastinėmis dalelės savybėmis, sustiprėja ir gali būti pakankama, kad dalelė neatšoktų į pradinę padėtį.

Skirtingai, nei 4.1 paveiksle, 4.2 paveiksle visų kreivių kritinis sulipimo greitis v_{cr} yra didesnis, nei $v_{Y,300}$, be to, $v_{Y,650} > v_{Y,300}$. Kai pradinis greitis yra $v_{Y,300}$, dalelė sulimpa. Lyginant 4.2 paveiksle pateiktus rezultatus su Thornton ir Ning sprendiniu, kritinis sulipimo greitis taip pat yra didesnis, nei v_Y .

Taikant bedimensį koeficientą k_H pastebima bendra tendencija – didėjant koeficientui, didėja dalelės kritinis sulipimo greitis, t. y. kad atšoktų dalelei reikia didesnės pradinės kinetinės energijos $E_{kinetic,0}$.

4.2 paveiksle nubraižytos kreivės atspindi bendrą išsklaidytą energiją sąveikos metu. Papildomai nubraižyti 4.3 ir 4.4 paveikslai parodo dalelės elgseną sąveikos metu. 4.3 ir 4.4 paveiksluose pateikiamas atskiras 4.2 paveikslo (kreivė 1) sprendinys, esant pradiniam greičiui $v_0 = -0,08$ m/s, kai atsistatymo koeficiento reikšmė $e = 0,34$.

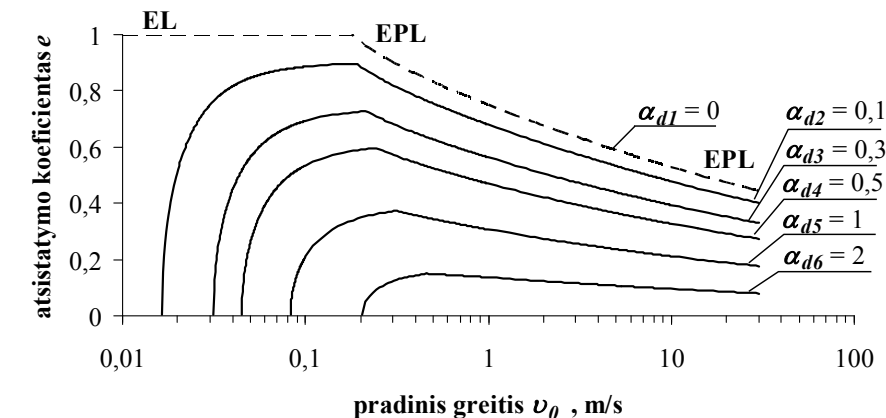
4.3 ir 4.4 (kreivė 1) paveiksluose pateikiamas 4.2 paveikslo sprendinys (atsistatymo koeficiento e riba EPL), kai atsistatymo koeficiento reikšmė $e = 0,63$. Pastebima, jog pritaikius sudarytą energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmą, ilgėja dalelės sąveikos laikas, nes ji atitrūksta nuo paviršiaus esant didesnei traukos jėgai bei atšoka mažesniu greičiu.

4.1.2. Energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu

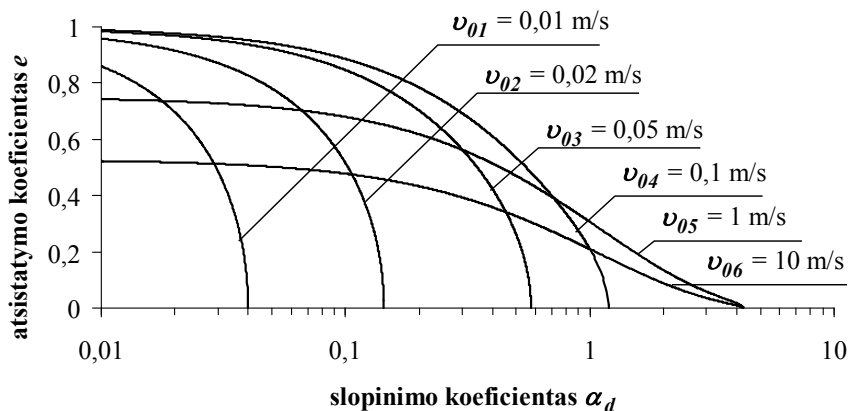
Siekama ištirti sudarytą energijos sklaidos mechanizmų įtaką esant adhezi- nei tampriai plastinei sąveikai. Taikomi du energijos sklaidos mechanizmai, susieti su klampiu slopinimu bei tampriai plastiniu kontaktu. Sąveika yra adhezinė klampi tampriai plastinė. Kaip ir 4.1.1. skyrelyje, laisvai pasirenkamos dvi mikrotakumo įtempių reikšmės: $p_f = 650$ MPa ir $p_f = 300$ MPa.

Nagrinėjant klampaus slopinimo įtaką adheziinei klampiai tampriai plastinei sąveikai (neįvertinant sudaryto energijos sklaidos mechanizmo, susieto su adhezija), 4.5 a paveiksle pateiktos atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 . Kadangi sąveika apima neigiamas normalines jėgas, įvertinus klampų slopinimą, t. y. papildomą energijos sklaidos mechanizmą, dalelė gali neatšokti į pradinę padėtį. Mažų pradinių greičių skalėje atsistatymo koeficiento e reikšmės yra lygios nuliui. Rezultatai rodo, jog visos kreivės prasideda nuo

tampraus sprendinio. Ne išimtis kreivė, kurios rezultatų reikšmės pateiktos neįvertinus klampaus slopinimo $\alpha_{dl} = 0$.



a)



b)

4.5 pav. Adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo: a – pradinio greičio v_0 , b – slopinimo koeficiento α_d .

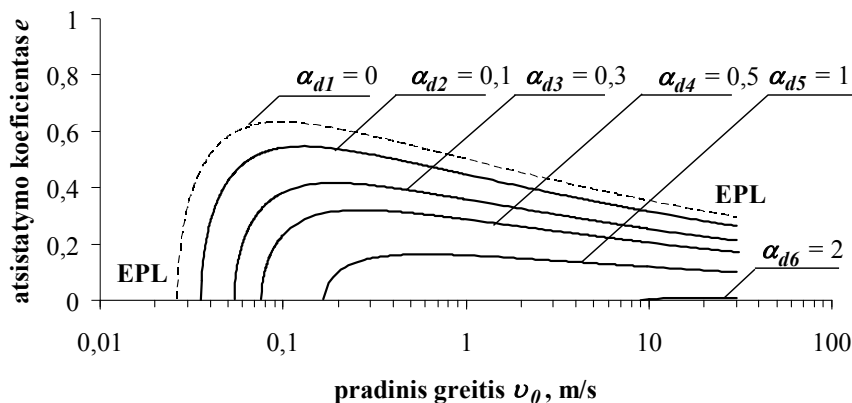
Mikrotakumo įtempis $p_f = 650$ MPa

Fig. 4.5. Adhesive viscous elastic-plastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on: a – initial velocity v_0 , b – damping coefficient α_d .

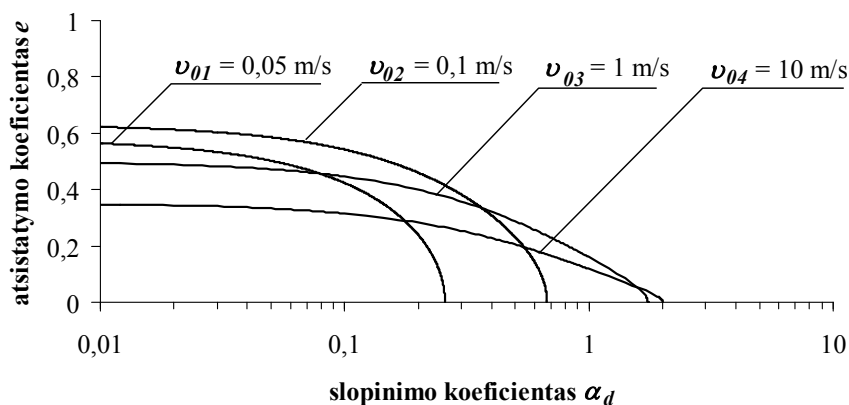
Micro-yield strength $p_f = 650$ MPa

Didėjant pradiniam greičiui, atsiskyrusi nuo pagrindo dalelė pasiekia buvusią pradinę padėtį. Dalelei pasiekus pradinę padėtį laikoma, kad dalelė atšoko, yra

įvertinama atsistatymo koeficiento reikšmė, kuri pradžioje lygi nuliui. Didėjant pradiniam greičiui, atsistatymo koeficiento reikšmė kyla.



a)



b)

4.6 pav. Adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo: a – pradinio greičio v_0 , b – slopinimo koeficiento α_d .

Mikrotakumo įtempis $p_f = 300$ MPa

Fig. 4.6. Adhesive viscous elastic-plastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on: a – initial velocity v_0 , b – damping coefficient α_d .

Micro-yield strength $p_f = 300$ MPa

Kontakto metu prie atitinkamos pradinio greičio reikšmės pasiekama takumo riba, o dalelės sąveika tampa tampriai plastine. Pasiekus takumo ribą yra įvertinama sklaida, kuri siejama su tampriai plastiniu kontaktu. Toliau didėjant

pradiniam greičiui, atsistatymo koeficiento e kreivė pradeda kristi. Tas pats pastebima ir neįvertinus klampaus slopinimo, kai slopinimo koeficientas $\alpha_{d1} = 0$.

Taip pat svarbu pažymėti, kad kontakto metu įvertinus klampų slopinimą ir didinant slopinimo koeficientą, didėja pradinis greitis v_y , kurio pakanka pasiekti poslinkį atitinkančią takumo ribą. Taikant su klampiu slopinimu siejamą energijos sklaidos mechanizmą, kaip ir esant tampriai sąveikai, dalelė nepasiekia atsistatymo koeficiento reikšmės 1. Didėjant slopinimo koeficientui, atsistatymo koeficiento e reikšmė sumažėja. Daroma išvada, jog stiprėja energijos sklaida, siejama su klampiu slopinimu.

4.5 a paveiksle pavaizduota atsistatymo koeficiento priklausomybė nuo pradinio greičio. 4.5 b paveiksle pavaizduota atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo slopinimo koeficiento α_d . Esant mažiems greičiams, dalelės pradinė kinetinė energija, lyginant su klampiu slopinimu siejama energijos sklaida, yra nedidelė, todėl atsistatymo koeficientas e taip pat yra mažesnis. Didėjant pradiniam greičiui, didėja ir kinetinė energija, yra apimamos didesnės atsistatymo koeficiento e reikšmės. Reikia paminėti, jog didėjant pradinei kinetinei energijai dalelė gali atšokti į pradinę padėtį, kai slopinimo koeficiento reikšmės α_d yra didesnės. Kiekviena kreivė baigiasi ties kritine slopinimo reikšme, kai atsistatymo koeficientas e pasiekia nulį. Toliau, didėjant slopinimo įtakai, dalelė jau nebeatšoka į buvusią pradinę padėtį. Šiuo atveju pradinės kinetinės energijos kiekis yra lygus išsklaidytos energijos kiekiui. Šis pradinės kinetinės energijos kiekis yra mažesnis už darbą, kurį dalelė turėtų atlikti, kad grįžtų į pradinę padėtį.

Rezultatai, pateikti 4.6 paveiksle, rodo analogišką tendenciją, kuri pastebima ir 4.5 paveiksle. Didinant slopinimo koeficientą α_d , didėja klampaus slopinimo įtaka ir yra apimamos žymiai mažesnės atsistatymo koeficiento reikšmės, nei 4.5 paveiksle. Svarbu pažymėti, kad esant mažesnei mikrotakumo įtempio p_f reikšmei, sąveikos metu išsklaidytos energijos kiekis, siejamas su tampriai plastiniu kontaktu, yra didesnis. Tampriai plastinis kontaktas prasideda esant mažesniai poslinkiui h_y , kuris atitinka takumo ribą. Didėjant pradiniam greičiui, dėl tampriai plastinių savybių apimama didesnė energijos sklaida. Rezultatai, pateikti 4.6 b paveiksle rodo, jog didėjant pradiniam greičiui, atsistatymo koeficiento e reikšmė mažėja, kadangi kontaktas apima tampriai plastinį deformavimą, o energijos sklaida žymiai sustiprėja dėl tampriai plastinių savybių.

Nors dalelė apima tampriai plastinį kontaktą, visos atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 kreivės (4.6 a paveikslas) apima atsistatymo koeficiento kilimą ir kritimą. Kreivės apima nulinę reikšmę, kadangi energijos sklaidos kiekis, siejamas su tampriai plastiniu kontaktu, buvo pakankamas, kad dalelė neatšoktų į pradinę padėtį. Didėjant pradinei kinetinei energijai dalelė atšoka į pradinę padėtį, o atsistatymo koeficiento reikšmių kreivės kyla.

4.1.3. Energijos sklaida, siejama su adhezija ir klampiu slopinimu

Poskyryje siekiama iširti sudarytus energijos sklaidos, siejamos su adhezija bei klampiu slopinimu, mechanizmus. Pateikiamos atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 kreivės.

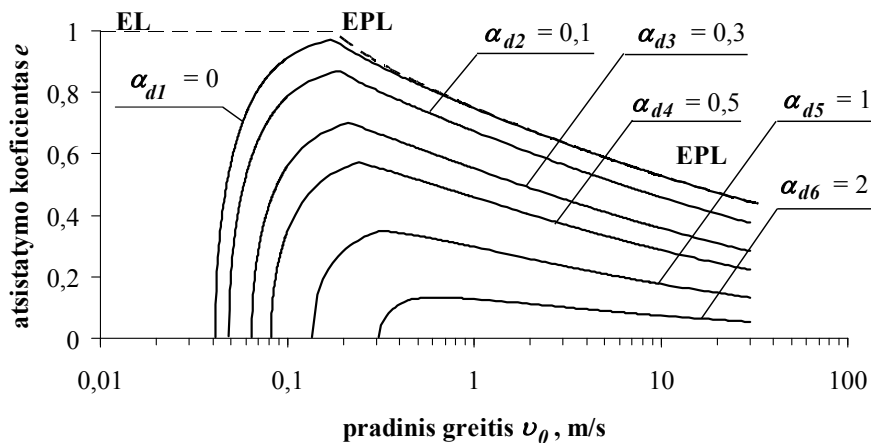
Tiriama trijų energijos sklaidos mechanizmų įtaka: energijos sklaida siejama su adhezija, tiesiai plastiniu kontaktu bei klampiu slopinimu. Rezultatai pateikti 4.7 paveiksle, jame pavaizduotos atsistatymo koeficiento e kitimo priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 , esant fiksuotam mikrotakumo įtempiui $p_f = 650$ MPa. Reikėtų pažymėti, jog kritinis sulipimo greitis, neįvertinus klampaus slopinimo, lygus $v_{cr,abs} = 0,041$ m/s ir dėl adhezijos poveikio yra siejamas su absorbcijos energija esant adhezinei tiesiai sąveikai. Taip pat svarbu, kad įvertinus kontakto metu klampų slopinimą ir didinant slopinimo koeficientą, didėja pradinis greitis v_Y , kurio pakanka pasiekti poslinkį atitinkančią takumo ribą. Tuo tarpu sudarytas siejamos su adhezija energijos sklaidos mechanizmas pradinio greičio v_Y reikšmei įtakos neturi.

Lyginant su ankstesniais skyriais, papildomai pritaikius su adhezija susietą energijos sklaidos mechanizmą, gaunama didesnė kritinio sulipimo greičio reikšmė. Įvertinus su klampiu slopinimu siejamą energijos sklaidą, didėjant slopinimo koeficiento α_d reikšmei didėja ir kritinis sulipimo greitis, tačiau stipriai sumažėja atsistatymo koeficiento reikšmė.

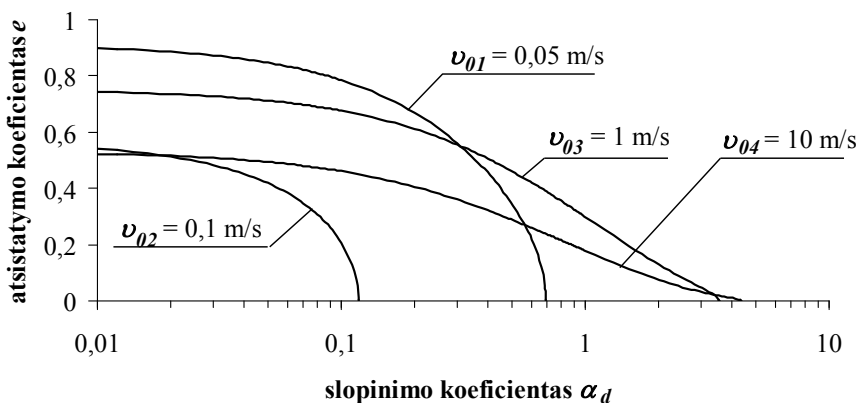
Lyginant 4.7 a ir 4.8 a paveikslus su 4.5 a ir 4.6 a paveikslais, 4.7 a ir 4.8 a paveiksluose kritinio sulipimo greičių reikšmės yra didesnės. Be to 4.7 b ir 4.8 b paveiksluose nėra sprendinių, kai dalelės pradiniai greičiai $v_0 = 0,01$ m/s ir $v_0 = 0,02$ m/s, kadangi šie greičiai yra mažesni nei kritinis sulipimo greitis $v_{cr,abs}$.

Taikant mažesnę mikrotakumo įtempio reikšmę p_f (4.8 paveikslas), padidėja kritinis sulipimo greitis. Pastebima, jog sprendiniui gauti reikalingas didesnis pradinis greitis. Kaip ir 4.7 a paveiksle, yra gaunamos mažesnės atsistatymo koeficiento e reikšmės.

Skaitiniai rezultatai patvirtina, kad tiesiai plastinis kontaktas yra dominuojantis energijos sklaidos mechanizmas, lemiantis atsistatymo koeficiento e mažėjimą, didėjant pradiniam greičiui v_0 . Tuo tarpu, apibrėžiant dalelės sulipimą, adhezinė sklaida yra dominuojantis energijos sklaidos mechanizmas. Šio modeliavimo rezultatai galėtų būti panaudoti įvairių sklaidos mechanizmų kombinacijoms paaiškinti.



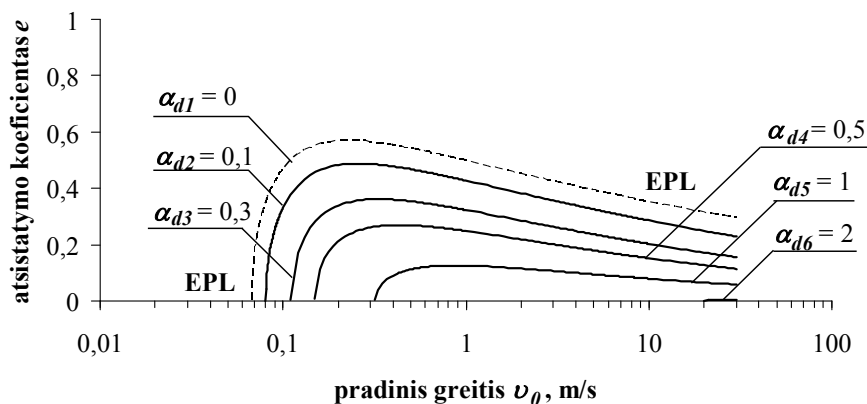
a)



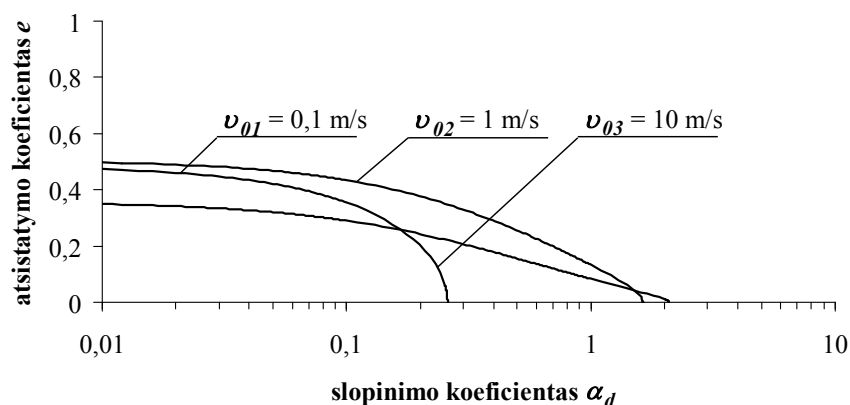
b)

4.7 pav. Adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo: a – pradinio greičio v_0 , b – slopinimo koeficiento α_d . Mikrotakumo įtempis $p_f = 650$ MPa. Pritaikytas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su adhezija

Fig. 4.7. Adhesive viscous elastic-plastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on: a – initial velocity v_0 , b – damping coefficient α_d . Micro-yield strength $p_f = 650$ MPa. Included energy dissipation mechanism, related to adhesion



a)



b)

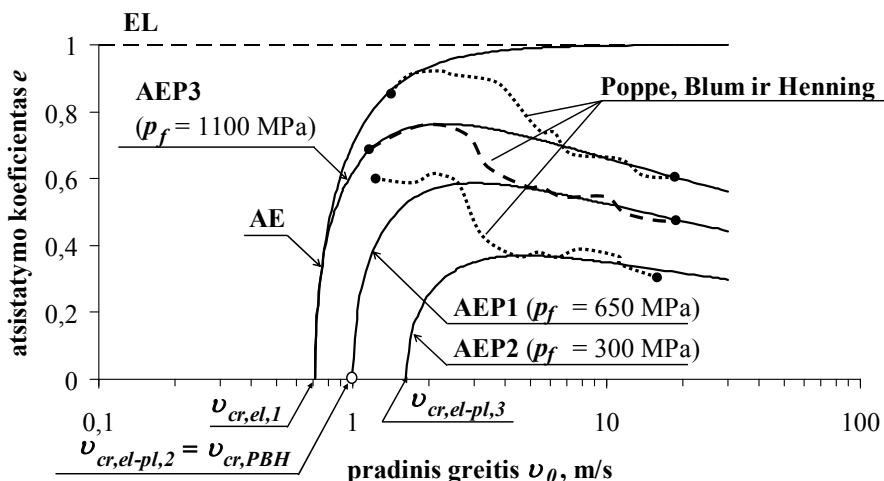
4.8 pav. Adhezinė klampi tampriai plastinė sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybė nuo: a – pradinio greičio v_0 , b – slopinimo koeficiento α_d . Mikrotakumo įtempis $p_f = 300$ MPa. Pritaikytas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su adhezija

Fig. 4.8. Adhesive viscous elastic-plastic interaction. Variations of coefficient of restitution e depending on: a – initial velocity v_0 , b – damping coefficient α_d . Micro-yield strength $p_f = 300$ MPa. Included energy dissipation mechanism, related to adhesion

Rezultatai rodo, jog sudaryti energijos sklaidos mechanizmai yra taikytini ultrasmulkios dalelės normalinei sąveikai tirti.

4.2. Skaitinio ir fizinio eksperimentų rezultatų palyginimas

Normalinis glotnios sferinės silicio dioksido dalelės smūgis $R = 0,6 \mu\text{m}$ į plokščią pagrindo paviršių tirtas skaitiškai, taikant DEM. Naudojant sudarytą modelį bei skaitinius rezultatus, siekiama pagrįsti ir paaiškinti dalelės smūgio fizinį eksperimentą, atliktą Poppe, Blum ir Henning (2000) (4.9 paveikslas).



4.9 pav. Adhezinė tampriai plastinė sąveika. Atsistatymo koeficiento e priklausomybės nuo pradinio greičio v_0 rezultatai, skirti paaiškinti fizinio eksperimento rezultatus (Poppe, Blum ir Henning 2000)

Fig. 4.9. Adhesive elastic-plastic interaction. The variation of coefficient of restitution e versus the initial velocity v_0 in interpreting the experimental results (Poppe, Blum and Henning 2000)

Fizinio eksperimento metu susidūrimas tarp monodispersinių silicio dioksido dalelių ir fiksuoto taikinio buvo nustatytas, fiksuojant dalelių judėjimo trajektorijas bei naudojant optinius vaizdo gavimo įrenginius. Iš silicio dioksido pagaminto taikinio paviršius yra plokščias, šlifluotas. Susidūrimas tirtas vakuume, normalės kryptimi. Fizinio eksperimento atsistatymo koeficiento reikšmės paimtos iš Poppe, Blum ir Henning (2000). Dalelės atšokimas yra aptinkamas pradinį greičių skaleje nuo 0,7 iki 30 m/s. Apdoroti fizinio eksperimento rezultatai yra pateikiami grafiškai, trimis kreivėmis. Kreivės nubraižytos intervale nuo 1 iki 30 m/s. Poppe, Blum ir Henning gauti rezultatai pažymėti taškine ir brūkšnine linijomis. Vientisos kreivės atitinka skaitinio modeliavimo rezultatus. Kreivė AE atitinka tamprų sprendinį, kuris konverguoja prie tampos ribos EL, kai $e = 1$. Vientisos kreivės AEP1 ($p_f = 300 \text{ MPa}$), AEP2 ($p_f = 650 \text{ MPa}$) ir AEP3 ($p_f = 1100 \text{ MPa}$) atitinka adhezinės tampriai plastinės sąveikos rezultatus.

Pagrindinės reikšmės yra pažymėtos plona brūkšnine linija, apatinė ir viršutinė ribos parodytos taškinėmis linijomis. Taip pavaizduotas mažiausias kritinis sulipimo greitis $v_{cr,PBH}$, kuris yra lygus 1 m/s.

Skaitiniai eksperimentai jungia du pradžioje nepriklausomus energijos sklaidos mechanizmus, siejamus su adhezija ir tampriai plastiniu kontaktu. Taikant šiuos du energijos sklaidos mechanizmus yra atkartojamas fizinis eksperimentas. Atkartojant fizinio eksperimento rezultatus, įvertinamas apibrėžtas energijos sklaidos kiekis $W_{diss,adh,0} = 1,68 \cdot 10^{-18}$ J, bei taikomas energijos sklaidos koeficientas $k_H = 300$. Šie dydžiai apibrėžia galutinę su adhezija siejamos energijos sklaidos reikšmę $W_{diss,adh} = 0,5 \cdot 10^{-15}$ J (2.32 formulė), kuri yra taikoma tolimesniuose skaičiavimuose.

Siekiant atkartoti fizinio eksperimento rezultatų išsibarstymą, atliekamas skaitinis eksperimentas. Skaitinio modeliavimo bei žinomo fizinio eksperimento rezultatai pateikti 4.9 paveiksle. Vientisa kreivė AE vaizduoja adhezinės tamprios sąveikos sprendinį, kuris yra interpretuojamas kaip skaitinių rezultatų riba. Įvertinus išsklaidytos energijos kiekį $W_{diss} = 0,5 \cdot 10^{-15}$ J, gaunamas minimalus kritinis sulipimo greitis $v_{cr,el,1} = 0,71$ m/s. Kreivė AE konverguoja prie viršutinės atsistatymo koeficiento e ribos, pažymėtos linija EL, kai $e = 1$. Ši riba nubrėžta, esant adheazinei tampriai sąveikai, neįvertinus sudarytų energijos sklaidos mechanizmų poveikio.

Siekiant paaiškinti eksperimentą bei atsistatymo koeficiento kitimą esant įvairiems pradiniam greičiams, parenkamos įvairios mikrotakumo įtempių reikšmės. Nesunku pastebėti, kad skaitiškai gautas atsistatymo koeficiento e charakteris sutampa su tendencija, pastebima fizinio eksperimento rezultatuose, kai pradiniai sąveikos greičiai yra dideli. Rezultatai pateikti, esant adheazinei tampriai plastinei sąveikai, atsižvelgiant į tris mikrotakumo įtempių reikšmes: $p_{f1} = 300$ MPa, $p_{f2} = 650$ MPa ir $p_{f3} = 1100$ MPa. Trys vientisos linijos: AEP1, AEP2 ir AEP3 vaizduoja tampriai plastinį sprendinį, gautą esant vienodai energijai $W_{diss,adh} = 0,5 \cdot 10^{-15}$ J.

Reikšmingi darbe gauti kritiniai sulipimo greičiai. Esant mikrotakumo įtempio reikšmei $p_f = 1100$ MPa, kritinis sulipimo greitis atitinka tamprų sprendinį $v_{cr,el,1} = 0,71$ m/s. Tai reiškia, jog pirmą kreivės atšaką atitinka adhezinės tamprios, o kita – tampriai plastinės sąveikos sprendinį. Esant mikrotakumo įtempio reikšmei $p_f = 650$ MPa, gauta kritinio sulipimo greičio reikšmė sutampa su fizinio eksperimento kritinio sulipimo greičio reikšme $v_{cr,el-pl,2} = v_{cr,PBH}$. Be to, sklaidos didėjimas, esant adheazinei tampriai plastinei sąveikai, lemia kritinio sulipimo greičio didėjimą $v_{cr,el-pl,2} \geq v_{cr,el}$. Pastebima, jog net esant ekstremaliai didelei p_f , tampriai plastinis modelis negali apimti eksperimentinės atsistatymo koeficiento e fizinio eksperimento srities. Parodyta, jog fiziniu eksperimentu nustatytas atsistatymo koeficiento e išsibarstymas gali būti atkartotas atsistatymo koeficiento kreivėmis, susietomis su skirtingais tiriamais sklaidos mechanizmais.

Skaitiniai rezultatai patvirtina, kad su adhezija siejama energijos sklaida apibrėžiant dalelės sulipimo sritį yra pagrindinis energijos sklaidos šaltinis. Tuo tarpu energijos sklaida, susieta su tampriai plastiniu kontaktu, yra reikšminis sklaidos mechanizmas, apibrėžiantis didėjančią energijos sklaidą, kai didėja pradinis greitis. Skaitiškai įrodyta, kad adhezinės tampriai plastinės sąveikos modelis gali apimti atsistatymo koeficiento e reikšmes esant dideliam pradiniam greičiui.

Reiktų paminėti, jog adhezinės sąveikos modelis ir DEM įdiegimas šiuo metu yra pradinėje stadijoje. Žinios apie įvertinančius paviršiaus šiurkštumą dalelės paviršiaus adsorbcijos sluoksnius arba mikroskopinės medžiagos savybių pasiskirstymą (nehomogeniškumą) yra reikalingos, norint apibūdinti dalelės smūgio elgseną.

4.3. Ketvirtojo skyriaus išvados

1. Žinomo fizinio eksperimento rezultatuose pateiktas atsistatymo koeficiento e reikšmių išsibarstymas gali būti paaiškintas skaitiniu eksperimentu, taikant sudarytą modelį, apimančią du energijos sklaidos mechanizmus.

2. Kadangi literatūroje žinomi sąveikos modeliai neapima visų ultrasmulkioms dalelėms būdingų efektų, darbe pasiūlytas naujas teorinis modelis, apimantis visus dalelei būdingus esminius efektus: adhezijos poveikį, tamprią bei tampriai plastinę sąveiką, klampų slopinimą. Modelio veikimas patikrintas, atliekant įvairius skaitinius eksperimentus ir palygintas su žinomais rezultatais.

3. Remiantis atliktu skaitiniu bei taikytu fiziniu ultrasmulkios dalelės normalinės sąveikos eksperimentu teigiama, jog adhezija yra pagrindinis sklaidos mechanizmas, nulemiantis sulipimą. Tuo tarpu tampriai plastinis kontaktas yra pagrindinis sklaidos mechanizmas, nulemiantis energijos sklaidos didėjimą ir atsistatymo koeficiento mažėjimą, didėjant pradiniam sąveikos greičiui.

4. Esant adheazinei tampriai plastinei sąveikai, taikant sudarytą su adhezija siejamos energijos sklaidos mechanizmą, pastebėta, jog dalelei atsiskyrus su liekamuoju poslinkiu ir padidėjus atsiskyrimo atstumui, energijos sklaida, siejama su adhezija, taip pat padidėja. Tai įrodo, jog adhezijos poveikis tampriai plastinių savybių turinčiai dalelei yra stipresnis.

5. Pastebėta, jog esant adheazinei tampriai plastinei sąveikai, neįvertinus su adhezija siejamos energijos sklaidos bei klampaus slopinimo, mikrotakumo įtempis apsprendžia dalelės elgseną, kai pradinis sąveikos greitis yra nedidelis. Skyriuje sudaryti grafikai parodo, jog esant mažai mikrotakumo įtempio reikšmei, dalelė, turėdama daugiau plastinių savybių, gali neatšokti į pradinę padėtį, tuo tarpu atsistatymo koeficientas yra 0. Esant didesnei mikrotakumo reikšmei ir mažam pradiniam sąveikos greičiui dalelė turi daugiau tamprių savybių: ji visada atšoka į pradinę padėtį, o atsistatymo koeficientas yra didesnis už 0.

Dalelių sistemos sulipimo proceso skaitinis tyrimas

Ankstesniuose skyriuose buvo tirta vienos adhezinės dalelės normalinė sąveika su pagrindu, įvertinant įvairius energijos sklaidos mechanizmus. Šiame skyriuje siekiama skaitiškai ištirti energijos sklaidos mechanizmus, esant normalinei kohezinių ultrasmulkių dalelių sistemos sąveikai su pagrindu. Taikomi sudaryti energijos sklaidos mechanizmai. Tiriant normalinę sąveiką bei neįvertinant tangentinių jėgų, pasirenkamas grandine išdėstytų dalelių sistemos modelis. Šis modelis naudingas sulipusių dalelių – konglomerato – tyrimams. Dalelės ir pagrindo parametrai pavaizduoti 3.1 ir 3.2 lentelėse.

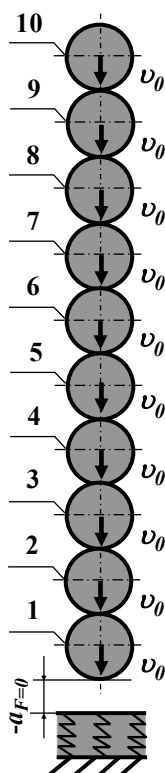
Skyriaus tematikos medžiaga atspindi tokius autoriaus su bendraautoriais paskelbtus straipsnius: Jasevičius *et al.* (2008, 2009, 2010).

5.1. Dalelių sistemos modelis

Sąveikos modelis sudaromas, kai dalelių sistema pradiniu laiko momentu yra nutolusi nuo pagrindo $-a_{F=0}$ atstumu. Tuo tarpu sistemą sudarančios pavienės dalelės viena kitos atžvilgiu nėra nutolusios ir liečiasi paviršiais. Pradinis greitis v_0 parenkamas vienodas visoms dalelėms.

Traukos jėga apkrovimo metu sudaro sąlygas sausoms dalelėms aglomeruotis – tai svarbi mechaninės elgsenos savybė. Dalelių sulipimui tirti pasirinktas dešimties dalelių modelis. Svarbu tai, jog vienos dalelės ir pagrindo Van der Valso jėgų ryšys apibūdinamas kaip adhezija, tuo tarpu dalelių sistemą sudarančių dalelių tarpusavio sąveika bei sąveika su pagrindu vadinama kohezija.

5.1 paveiksle pateiktas dalelių sistemos sąveikos su pagrindu modelis. Visų sąveikaujančių dalelių ir pagrindo savybės vienodos. Visos dalelės vienodu pradiniu greičiu juda link pagrindo. Dalelės sąveikauja tarpusavyje, o dalelių sistema sąveikauja su pagrindu. Laisvai pasirinkta dalelių sistema susideda iš dešimties dalelių.



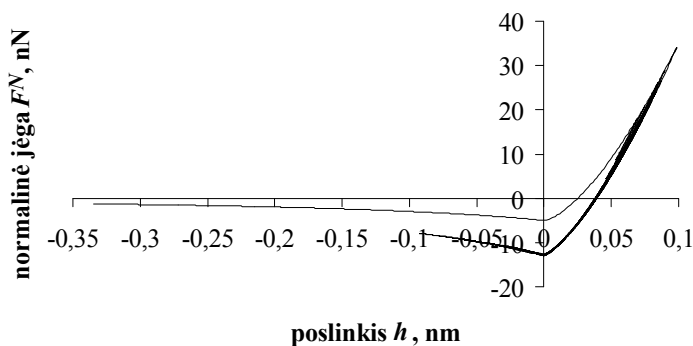
5.1. pav. Kohezinių dalelių sistemos sąveikos su pagrindu modelis
Fig. 5.1. Model of cohesive particle system interaction with background

Skyrelyje analizuojama normalinės jėgos priklausomybė nuo poslinkio, taip pat normalinės jėgos bei greičio ir poslinkio istorijos. Pradinis greitis parenkamas

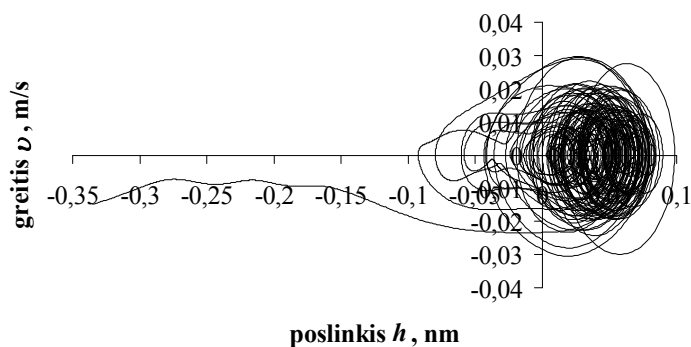
$v_0 = 0,015$ m/s. Modeliuojamų ultrasmulkių dalelių ir pagrindo parametrai paimti iš 3.1 ir 3.2 lentelių.

5.2. Dalelių sistemos sulipimo tyrimas, esant tampriai sąveikai

Tiriama tampri dalelių sistemos sąveika su pagrindu. Pateikiami du atvejai, kai kontakto metu įvertinamas ir neįvertinamas klampa slopinimo mechanizmas. Atliekant dešimties dalelių sąveikos su pagrindu tyrimą, pateikiami pirmos dalelės (5.1 paveikslas) sąveikos su pagrindu rezultatai.



a)



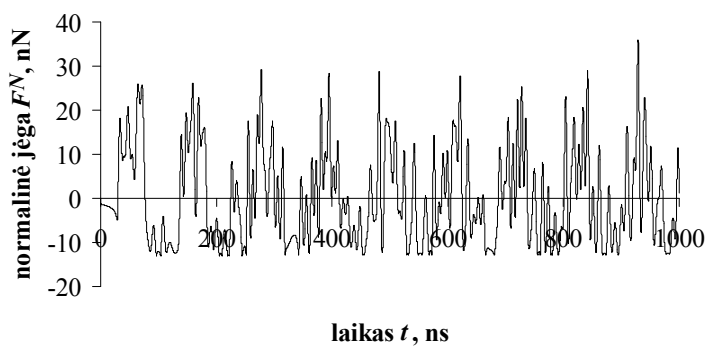
b)

5.2 pav. Kohezinė tampri sąveika:

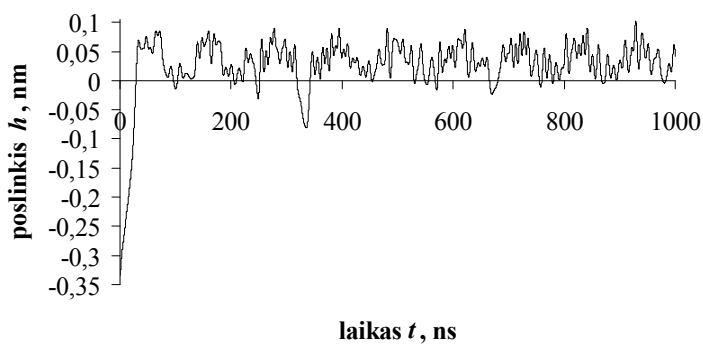
a – normalinės jėgos F^N , b – greičio v priklausomybė nuo poslinkio h

Fig. 5.2. Cohesive elastic interaction:

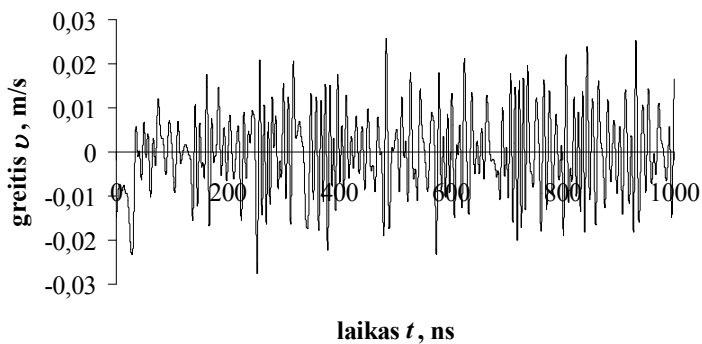
a – normal force F^N , b – velocity v versus displacement h



a)



b)



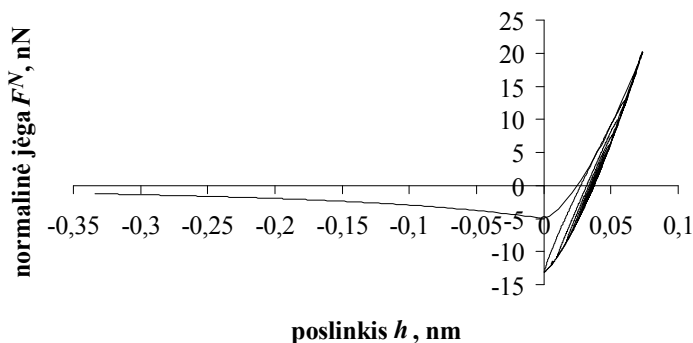
c)

5.3 pav. Kohezinė tampri sąveika: a – normalinės jėgos F^N , b – poslinkio h ,
c – greičio v istorija

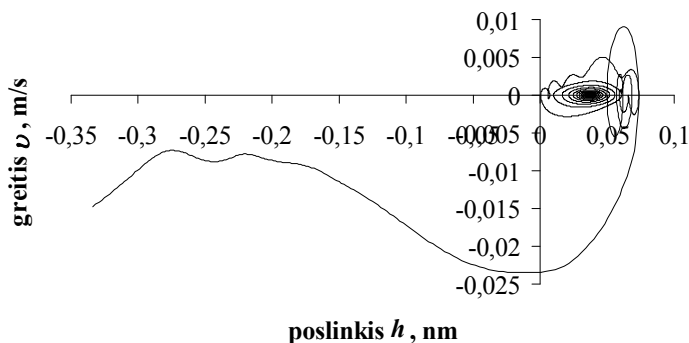
Fig. 5.3. Cohesive elastic interaction: a – normal force F^N , b – displacement h ,
c – velocity v history

Atvejis, kai pakartotinio apkrovimo metu neįvertinamas klampa slopinimo modelis, pavaizduotas 5.2 ir 5.3 paveiksluose. Pirmo apkrovimo-nukrovimo metu yra įvertinamas su adhezija susietas energijos sklaidos mechanizmas. Pradinis sistemą sudarančių dalelių greitis yra mažesnis, nei kritinis sulipimo greitis. Kiekvienos dalelės sąveikos metu prarastos energijos kiekis yra $W_{diss,abs}$. Jis apskaičiuojamas formule (2.21) ir siejamas su adhezijos poveikiu.

Rezultatai, pateikti 5.2 ir 5.3 paveiksluose rodo, jog dalelių sistema po sąveikos neatšoka į pradinę padėtį, o veikiama kohezijos grįžta atgal prie pagrindo. Neįvertinus pakartotinio apkrovimo energijos sklaidos mechanizmo, tolimesni dalelės svyravimai nenusistovi.



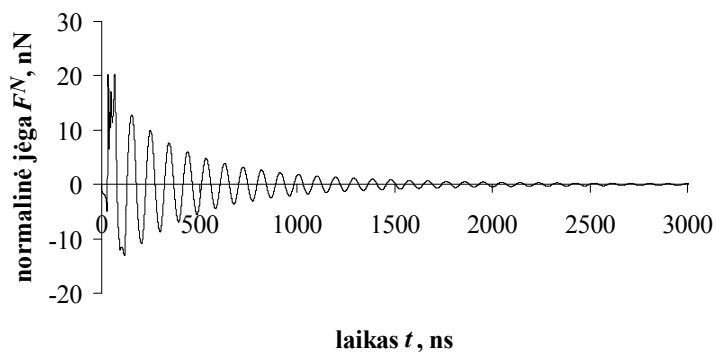
a)



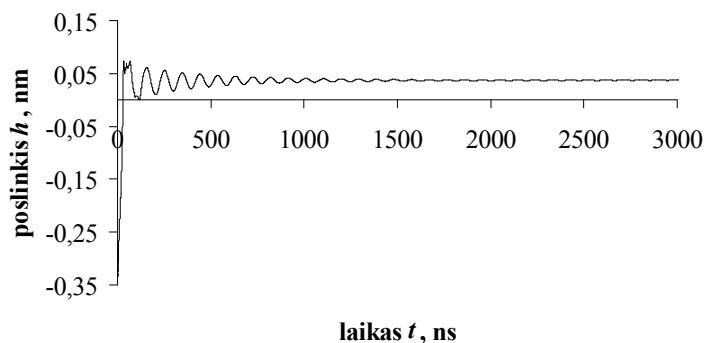
b)

5.4 pav. Kohezinė klampiai tampri sąveika: a – normalinės jėgos F^N , b – greičio v priklausomybė nuo poslinkio h . Slopinimo koeficientas $\alpha_d = 2,5$

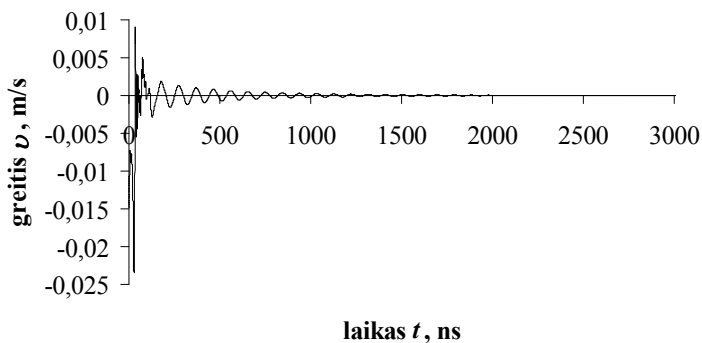
Fig. 5.4. Cohesive viscous elastic interaction: a – normal force F^N , b – velocity v versus displacement h . Damping coefficient $\alpha_d = 2.5$



a)



b)



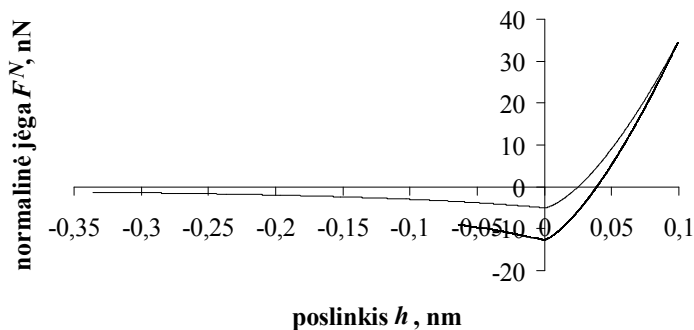
c)

5.5 pav. Kohezinė klampiai tampri sąveika: a – normalinės jėgos F^N , b – poslinkio h , c – greičio v istorija. Slopinimo koeficientas $\alpha_d = 2,5$

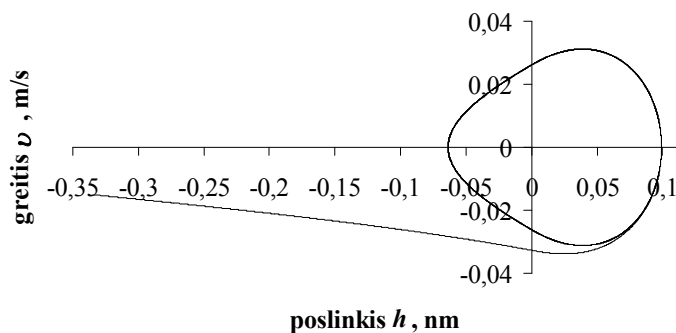
Fig. 5.5. Cohesive viscous elastic interaction: a – normal force F^N , b – displacement h , c – velocity v history. Damping coefficient $\alpha_d = 2.5$

Svarbu pastebėti, kad dalelių sistema neatšoka į pradinę padėtį, nes yra veikiami Van der Valso jėgų, bet tuo pačiu ir nesulimpa. Dalelių sistema gali atitrūkti nuo pagrindo, bet veikiami Van der Valso jėgų vėl grįžta. 5.2 a paveiksle pavaizduota normalinės jėgos priklausomybė nuo poslinkio dalelės sulipimo proceso metu, taip pat pakartotinai nukraunant, atsiskiriant bei grįžtant, svyruoja apytiksliai viena trajektorija. Tuo tarpu tos pačios dalelės judėjimas parodo (5.2 b paveikslas), jog greičio svyravimai poslinkio atžvilgiu tam tikrose greičio ir poslinkio ribose kinta chaotiškai.

Iš pateiktų rezultatų matyti, jog pakartotinio apkrovimo metu pasiekta normalinės jėgos reikšmė gali pakisti, lyginant su buvusiu apkrovimu. Šį reiškinį paaiškina papildomas viršuje išsidėsčiusių kohezinių dalelių poveikis sąveikos metu. Kadangi sąveikauja daugiau nei viena dalelė, dalelių svyravimai atitinka neperiodinius stacionariusius.



a)



b)

5.6 pav. Vienos dalelės adhezinė tampri sąveika
Fig. 5.6. Adhesive elastic interaction of one particle

5.4 ir 5.5 paveiksluose pateikiami dalelių sistemos sąveikos rezultatai, kai pakartotinio apkrovimo metu yra taikomas su klampiu slopinimu siejamas energijos sklaidos mechanizmas. Įvertinami du energijos sklaidos mechanizmai, siejami su adhezija ir klampiu slopinimu. Šiuo atveju, dalelių sistemai neatšokus į pradinę padėtį, tolimesnis jos judėjimas yra gėstantis, nes pakartotinio apkrovimo metu vyksta energijos sklaida. Toks judėjimas laikomas sulipimo procesu, kurio metu dalelių sistema yra veikiamą traukos bei stūmos jėgų ir pereina į rimties būseną. Rezultatai rodo, jog taikant pasirinktą dalelių sistemos sąveikos modelį, kai slopinimo koeficientas $\alpha_d = 2,5$, praėjus apie $t = 3 \cdot 10^3$ ns laiko tarpui dalelių sistemos normalinės jėgos ir greičio reikšmės yra nykstamai mažos. Daroma išvada, kad dalelių sistema sulipo.

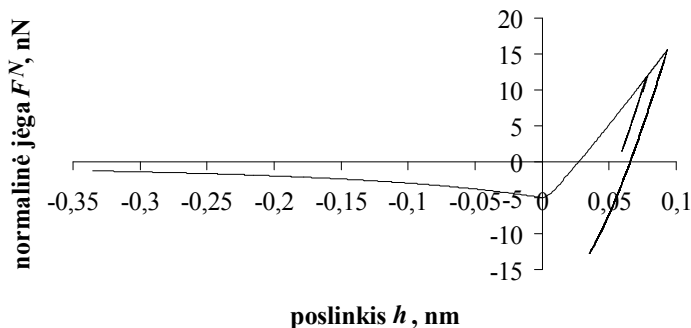
5.6 paveiksle parodyta vienos dalelės sąveika su pagrindu, kai pradinis greitis $v_0 = -0,015$ m/s. Šiuo atveju pradinis greitis mažesnis už kritinį v_{cr} , todėl dalelė neatšoka į pradinę padėtį. Tolimesnis tokios dalelės judėjimas, neįvertinus sudaryto klampaus slopinimo mechanizmo, yra negėstantis. 5.6 b paveiksle pavaizduota susidariusi greičio priklausomybės nuo poslinkio kilpa, kurios trajektorija, nepritaikius sudaryto klampaus slopinimo mechanizmo, dalelė judės begalinį laiko tarpą. Lyginant dešimties (5.4, 5.5 paveikslai) ir vienos dalelės sąveikas (5.6 paveikslas), pastebima, jog pasiektos maksimalios jėgos ir greičio reikšmės yra neviršijamos.

5.3. Dalelių sistemos sulipimo tyrimas, esant tampriai plastinei sąveikai

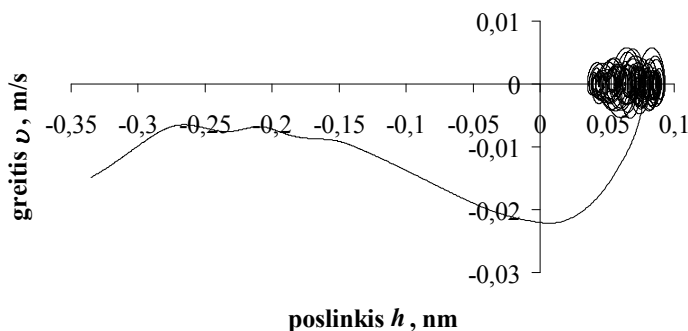
Atvejis, kai klampaus slopinimo modelis kohezinėje tampriai plastinėje sąveikoje pakartotinio apkrovimo metu neįvertinamas, pavaizduotas 5.7 ir 5.8 paveiksluose. Tampriai plastinis kontaktas vyksta pirmo apkrovimo metu, tuo tarpu nukrovimas bei pakartotinis apkrovimas yra tamprūs. Siekiant gauti didesnę energijos sklaidą, siejamą su tampriai plastiniu kontaktu pirmo apkrovimo-nukrovimo metu, pasirenkama mikrotakumo įtempio reikšmė $p_f = 200$ MPa. Ši mikrotakumo įtempio reikšmė neprieštarauja Poppe, Blum ir Henning (2000) fiziniam eksperimentui, kadangi pateiktas rezultatų išsibarstymas apima mažesnes atsistatymo koeficiento reikšmes, kurios galimos esant mažesnei mikrotakumo įtempio reikšmei.

5.7 ir 5.8 paveiksluose įvertinti du sklaidos mechanizmai, siejami su tampriai plastiniu kontaktu bei adhezija. Pradinis sistemą sudarančių dalelių greitis yra mažesnis, nei kritinis sulipimo greitis. Kiekvienos dalelės sąveikos metu įvertinamas siejamos su adhezija energijos sklaidos kiekis yra $W_{diss,adh}$. Jis apskaičiuojamas formule (2.21). Tuo tarpu absorbcijos energija $W_{diss,abs,el-pl}$, lyginant su tampriu sprendiniu, yra didesnė ($W_{diss,abs,el-pl} > W_{diss,abs,el}$). Rezultatai, pateikti 5.7

ir 5.8 paveiksluose rodo, jog dalelių sistema po sąveikos neatšoka į pradinę padėtį ir grįžta atgal prie pagrindo.



a)

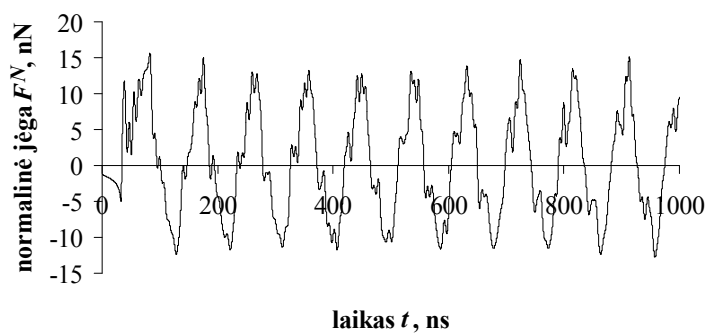


b)

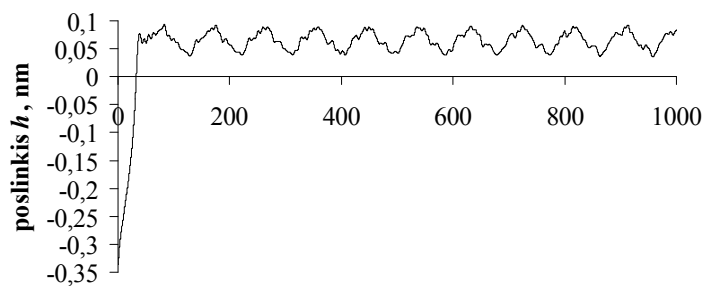
5.7 pav. Kohezine tampriai plastinė sąveika: a – normalinės jėgos F^N ,
b – greičio v priklausomybė nuo poslinkio h . Mikrotakumo įtempis $p_f = 200$ MPa

Fig. 5.7. Cohesive elastic-plastic interaction: a – normal force F^N ,
b – velocity v versus displacement h . Micro-yield strength $p_f = 200$ MPa

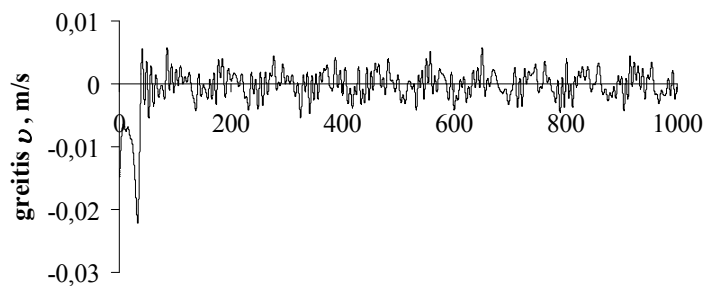
Pakartotinio apkrovimo metu, neįvertinus energijos sklaidos mechanizmo, tolimesni dalelės svyravimai nenusistovi, bet dalelių sistema neatitrūksta nuo pagrindo, kadangi yra veikiami Van der Valso jėgų. Kaip ir esant kohezinei tampriai sąveikai, neįvertinus klampaus slopinimo, pakartotinio apkrovimo metu pasiekta normalinės jėgos reikšmė gali pakisti, lyginant su buvusiu apkrovimu. Tai paaiškina papildomas viršuje išsidėsčiusių kohezinių dalelių poveikis sąveikos metu. Priimama, jog pakartotinio apkrovimo metu, viršijus buvusio apkrovimo normalinės jėgos reikšmę, tolimesnis apkrovimas yra tampriai plastinis.



a)



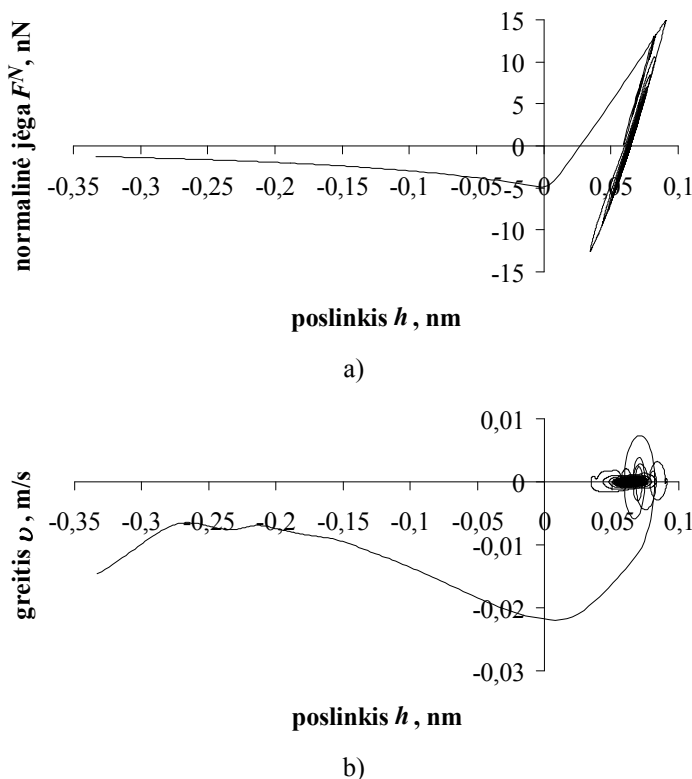
b)



c)

5.8 pav. Kohezinė tampriai plastinė sąveika: a – normalinės jėgos F^N , b – poslinkio h , c – greičio v istorija. Mikrotakumo įtėmpis $p_f = 200$ MPa

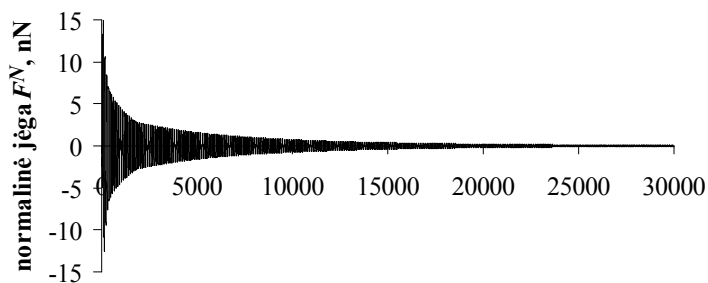
Fig. 5.8. Cohesive elastic-plastic interaction: a – normal force F^N , b – displacement h , c – velocity v history. Micro-yield strength $p_f = 200$ MPa



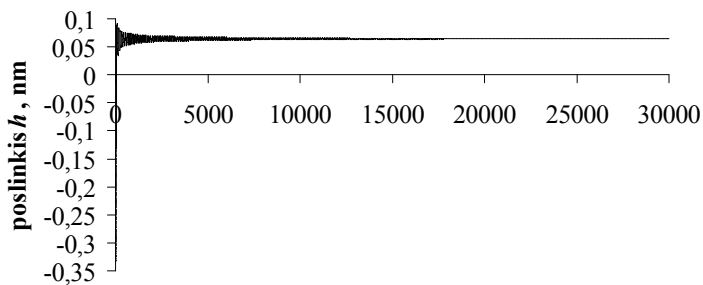
5.9 pav. Kohezinė klampi tampriai plastinė sąveika: a – normalinės jėgos F^N , b – greičio v priklausomybė nuo poslinkio h . Mikrotakumo įtempis $p_f = 200$ MPa. Slopavimo koeficientas $\alpha_d = 2,5$

Fig. 5.9. Cohesive viscous elastic-plastic interaction: a – normal force F^N , b – velocity v versus displacement h . Micro-yield strength $p_f = 200$ MPa. Damping coefficient $\alpha_d = 2.5$

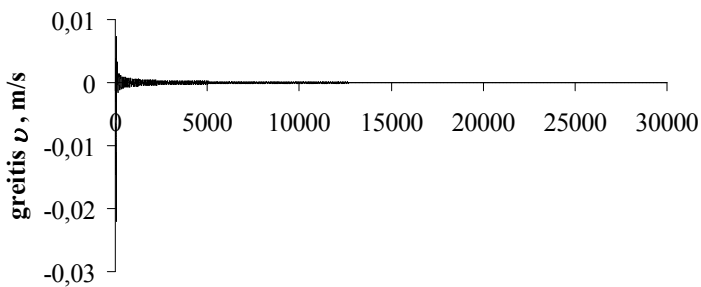
5.9 ir 5.10 paveiksluose pateikiami dalelių sistemos sąveikos rezultatai, kai pakartotinio apkrovimo metu taikytas sudarytas energijos sklaidos mechanizmas, siejamas su klampiu slopinimu. Įvertinami trys energijos sklaidos mechanizmai, siejami su adhezija, tampriai plastiniu kontaktu ir klampiu slopinimu. Dalelių sistemai neatšokus į pradinę padėtį, tolimesnis jos judėjimas yra gėstantis, nes pakartotinio apkrovimo metu vyksta energijos sklaida. Šis judėjimas vertinamas kaip sulipimo procesas, kurio metu dalelių sistema sulimpa su pagrindu.

laikas t , ns

a)

laikas t , ns

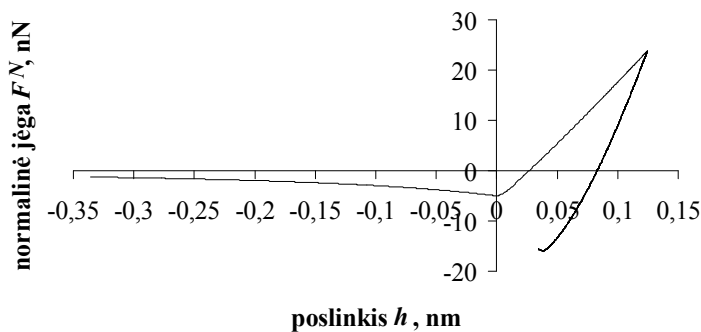
b)

laikas t , ns

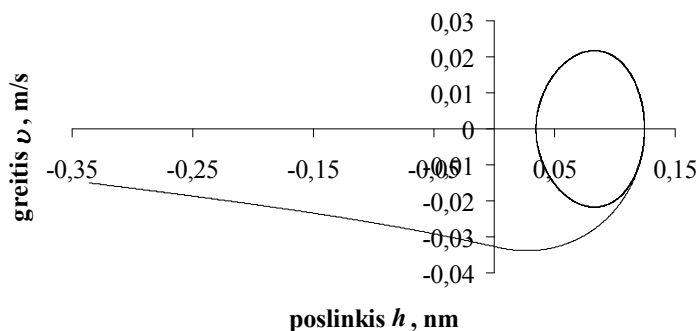
c)

5.10 pav. Kohezinė klampi tampriai plastinė sąveika: a – normalinės jėgos F^N , b – poslinkio h , c – greičio v istorija. Mikrotakumo įtempis $p_f = 200$ MPa. Slopinimo koeficientas $\alpha_d = 2,5$

Fig. 5.10. Cohesive viscous elastic-plastic interaction: a – normal force F^N , b – displacement h , c – velocity v history. Micro-yield strength $p_f = 200$ MPa. Damping coefficient $\alpha_d = 2.5$



a)



b)

5.11 pav. Vienos dalelės adhezinė tampriai plastinė sąveika.

Mikrotakumo įtempis $p_f = 200$ MPa

Fig. 5.11. Adhesive elastic-plastic interaction of one particle.

Micro-yield strength $p_f = 200$ MPa

Rezultatai rodo, jog taikant pasirinktą dalelių sistemos sąveikos modelį, kai slopinimo koeficientas $\alpha_d = 2,5$, praėjus apie $t = 30 \cdot 10^3$ ns laiko tarpui dalelių sistemos normalinės jėgos bei greičio reikšmės yra nykstamai mažos. Priimama, jog dalelių sistema sulipo.

Lyginant dalelių sulipimą esant tampriai bei tampriai plastinei sąveikoms, pastebima, jog sulipimo procesas esant tampriai plastinei sąveikai trunka apie 10 kartų ilgiau. Tai paaiškinama tuo, jog esant tampriai plastinei sąveikai, pirmo apkrovimo-nukrovimo metu veikia du su tampriai plastiniu kontaktu bei adhezija siejami energijos sklaidos mechanizmai. Tuo tarpu pakartotinio apkrovimo-nukrovimo metu sąveika yra tampri ir veikia tik vienas su adhezija siejamas energijos sklaidos mechanizmas, todėl pakartotinio apkrovimo-nukrovimo metu sistemą sudarančių dalelių greičiai, lyginant su visiškai tampria sąveika, yra mažesni. Kadangi klampus slopinimo sklaidos mechanizmas priklauso nuo dalelės

poslinkio greičio, pakartotinio apkrovimo-nukrovimo metu energijos sklaida bus mažesnė, o sulipimo procesas užtruks ilgiau.

5.11, kaip ir 5.6 paveiksle, siekiant palyginti dešimties dalelių sąveikos rezultatus, parodytas vienos dalelės sąveikos su pagrindu atvejis, kai pradinis greitis $v_0 = -0,015$ m/s. Šiuo atveju pradinis greitis mažesnis už kritinį v_{cr} , dalelė neatšoka į pradinę padėtį. Tolimesnis tokios dalelės judėjimas, neišvertinus sudaryto klampaus slopinimo mechanizmo, yra neįvertinamas. Todėl 5.11 b paveiksle susidaro greičio priklausomybės nuo poslinkio kilpa, kurios trajektorija, nepritaikius sudaryto klampaus slopinimo mechanizmo, dalelė judės begalinį laiko tarpą. Lyginant dešimties (5.9, 5.10 paveiksmai) ir vienos dalelės sąveikas (5.11 paveiksmai), pastebima, jog pasiektos maksimalios jėgos ir greičio reikšmės yra neviršijamos.

5.4. Penktojo skyriaus išvados

1. Tiriant dalelių sistemos sulipimą pastebėta, kad skirtingai nei vienos dalelės sąveikos metu, sulipimo procesas trunka ilgiau, nors sąveikos parametrai yra vienodi. Lyginant su pirmu apkrovimo bei nukrovimo ciklu pastebėta, jog kartojantis dalelių sistemos apkrovimo-nukrovimo ciklams, dėl jų sąveikos gali padidėti pasiektos maksimalios normalinės jėgos bei poslinkio reikšmės. Lyginant kohezines klampias tamprias ir kohezines klampios tampa plastinės dalelių sistemos sulipimo procesą, plastinių savybių turinčios dalelių sistemos sulipimo trukmė yra ilgesnė.

2. Vien energijos sklaidos dėl adhezijos neužtenka, norint aprašyti gėstantį dalelės svyravimą sulipimo proceso metu, todėl reikia papildomų energijos sklaidos mechanizmų, tokių kaip klampus slopinimas. Esant normalinei sąveikai, gėstantis sulipusių kohezinių dalelių svyravimas aprašomas taikant sudarytą klampaus slopinimo mechanizmą.

3. Atlikus dalelių sistemos normalinės sąveikos skaitinį eksperimentą, ištirtas sulipimo procesas. Pastebėta, jog neišvertinus sudaryto klampaus slopinimo mechanizmo, atitinkamose ribose dalelė svyruoja chaotiškai. Įvertinus sudarytą energijos sklaidos mechanizmą, siejamą su klampiu slopinimu, dalelių svyravimai yra gėstantys ir nusistovi ties normalinės jėgos bei greičio reikšme 0, esant atitinkamai sulipimo persiklojimo reikšmei.

Bendrosios išvados

1. Ultrasmulkių dalelių normalinei sąveikai aprašyti pasiūlytas naujas standžios dalelės su minkštu kontaktu teorinis modelis, kuris įvertina mažų matmenų kūnui būdingus efektus. Šis modelis apima adhezinę sąveiką su tampriu ir tampriai plastiniu deformavimu bei energijos sklaidos mechanizmus. Jo veikimas patikrintas, atliekant įvairius skaitinius eksperimentus ir palygintas su žinomais rezultatais.

2. Skaitiškai ištyrus energijos sklaidai būdingus mechanizmus, galima teigti, jog energijos sklaida, siejama su adhezija, lemia dalelės prilipimą prie pagrindo bei dalelių sulipimą tarpusavyje. Dalelės plastinės savybės lemia energijos sklaidos didėjimą, taip pat atsistatymo koeficiento mažėjimą didėjant pradiniam greičiui bei apibrėžiant didžiausias pasiektas atsistatymo koeficiento reikšmes.

3. Energijos sklaida, esant tampriam dalelės kontaktui, apibrėžiama tik vienu rodikliu – adhezinės sąveikos metu sugertu energijos kiekiu. Skaitiniai eksperimentai parodė, kad būtent šio rodiklio reikšmė lemia kritinį sulipimo greitį. Tuo tarpu atsistatymo koeficiento priklausomybės nuo pradinio sąveikos greičio pobūdis visame intervale nuo 0 iki 1 nuo išsklaidytos energijos kiekio nepriklauso.

4. Adhezinė tampriai plastinė sąveika apibūdinama dviejų energijos sklaidos mechanizmų sąsaja, kurią lemia dalelės mikrotakumo įtempis. Priklausomybė nuo pradinio sąveikos greičio, esant skirtingos sudėties energijoms, konverguoja į ribinę kreivę, kurios pobūdį lemia mikrotakumo įtempio reikšmės. Didėjant

pradiniam sąveikos greičiui atsistatymo koeficientas pradeda mažėti. Lyginant su tampriąja sąveika pastebėta, kad kai mikrotakumo įtempio reikšmė yra 650 MPa, maksimali atsistatymo koeficiento reikšmė sumažėja nuo 1 iki 0,95, o esant mikrotakumo įtempio reikšmei 300 MPa, atsistatymo koeficiento reikšmė sumažėja nuo 1 iki 0,6.

5. Taikant sudarytą energijos sklaidos, siejamos su adhezija, mechanizmą esant tampriai plastinei sąveikai, pastebėta, jog lyginant su adhezine tampria sąveika, dalelei atsiskyrus su liekamuoju poslinkiu ir padidėjus atsiskyrimo atstumui, su adhezija siejama energijos sklaida yra didesnė. Liekamasis poslinkis ir su adhezija siejama energijos sklaida didėja, didėjant pradiniam sąveikos greičiui. Tai įrodo, jog adhezijos poveikis plastinių savybių turinčiai dalelei yra stipresnis.

6. Pasiūlyta sąveika papildomai veikiant klampiajam slopinimui yra suderinta su adhezinėmis savybėmis, kadangi adhezijos riba neviršijama, o atsiskyrusios dalelės liekamasis poslinkis susidaro tik dėl plastinio deformavimo.

7. Skaitiškai ištyrus dalelės sulipimo procesą pastebėta, jog įvertinus energijos, siejamos su klampiu slopinimu, sklaidą sulipimo proceso metu, dalelės svyravimai yra gėstančio pobūdžio. Dalelė prilimpa prie pagrindo bei dalelės sulimpa tarpusavyje su persiklojimu, kai sąveikos metu normalinė jėga ir greitis yra lygūs nuliui. Pastebėta, jog įvertinus klampų slopinimą esant tampriai sąveikai, sulipimo persiklojimas nuo pradinio greičio nepriklauso. Tuo tarpu tampriai plastinių savybių turinčios dalelės sulipimo persiklojimas turi tendenciją didėti, mažėjant mikrotakumo įtempiui bei didėjant pradiniam sąveikos greičiui.

8. Sudarytas modelis buvo pritaikytas žinomam silicio dioksido dalelės smūgio į pagrindą eksperimento (Poppe, Blum ir Henning 2000) rezultatų išsibarstymui paaiškinti: eksperimento skaitinis modeliavimas parodė, kad eksperimento rezultatų gaubtinės galima sudaryti kombinuojant įvairius sudarytus energijos sklaidos mechanizmus. Interpretuojant rezultatus galima teigti, kad atsistatymo koeficiento mažėjimą, esant dideliame sąveikos greičiui, nulemia plastinių deformacijų silicio dioksido dalelėje susidarymas.

Padėka

Dėkoju savo moksliniam vadovui Prof. Habil. Dr. Rimantui Kačianauskui bei Prof. Habil. Dr-Ing. Jürgen Tomas už suteiktas žinias. Taip pat dėkoju recenzentams, oponentams ir tarybos nariams už vertingas pastabas.

Acknowledgements

I would like to acknowledge scientific supervisor Prof Dr Habil Rimantas Kačianauskas and Prof Dr-Ing Habil Jürgen Tomas for discussion, providing relevant information and theoretical tips. Valuable comments of reviewers, opponents and members of senate are appreciated.

Literatūros sąrašas

- Abd-Elhady, M. S.; Rindt, C. C. M.; Wijers, J. G.; van Steenhoven, A. A. 2006. Modeling the impaction of a micron particle with a powdery layer, *Powder Technology* 168: 111–124.
- Adams, J. C.; Brainerd, W. S.; Martin, J. T.; Smith, B. T.; Wagener, J. L. 1992. *Fortran 90 Handbook. Complete ANSI / ISO Reference*, Intertext Publications McGraw–Hill Book Company, New York, 835.
- Allen, M. P.; Tildesley, D. J. 1987. *Computer simulation of liquids*, Oxford Science Publication, 408.
- Antonyuk, S.; Khanal, M.; Tomas, J.; Heinrich, S.; Morl, L. 2006. Impact breakage of spherical granules: Experimental study and DEM simulation, *Chemical Engineering and Processing* 45(10): 838–856.
- Antonyuk, S.; Heinrich, S.; Tomas, J.; Deen, N. G.; Buijtenen, M. S.; Kuipers, J. A. M. 2010. Energy absorption during compression and impact of dry elastic-plastic spherical granules, *Granular Matter* 12: 15–47.
- Balevičius, R.; Džiugys, A.; Kačianauskas, R. 2004. Discrete element method and its application to the analysis of penetration into granular media, *Journal of Civil Engineering and Management* 10(1): 3–14.
- Barauskas, R.; Ostaševičius, V. 1998. *Tampriųjų vibrosmūginių sistemų analizė ir optimizavimas: kompiuteriniai metodai ir jų taikymas*, Kaunas: Technologija, 210.
- Bradley, R. S. 1932. The cohesive force between solid surfaces and the surface energy of solids, *Phil. Mag.* 13: 853–862.

- Brilliantov, N. V.; Pöschel, T. 2005. Adhesive interactions of viscoelastic spheres, *Powders and Grains* 5: 505–509.
- Brilliantov, N. V.; Spahn, F.; Hertzsch, J.; Pöschel, T. 1996. Model for collisions in granular masses, *Physical Review E* 53(5): 5382–5392.
- Brilliantov, V. N.; Albers, N.; Spahn, F.; Pöschel, T. 2007. Collision dynamics of granular particles with adhesion, *Physical Review E* 76: 051302(1–12).
- Briscoe, B. J.; Liu, K. K.; Williams, D. R. 1997. Adhesive Contact Deformation of a Single Microelastomeric Sphere, *Journal of Colloid and Interface Science* 200: 256–264.
- Brizmer, V.; Kligerman, Y.; Etsion, I. 2007. The effect of contact conditions and material properties on the elasticity terminus of a spherical contact, *Int. J. of Solids and Structures* 43: 5737–5749.
- Cundall, P. A.; Strack, O. D. L. 1979. A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique* 29(1): 47–65.
- Derjaguin, B. 1934. Analysis of friction and adhesion. IV. The theory of adhesion of small particles, *Kolloid-Zeitschrift* 69(2): 115–164.
- Derjaguin, B. V.; Muller, V. M.; Toporov, Y. P. 1975. Effect of contact deformations on the adhesion of particles, *Journal of Colloid and Interface Science* 53(2): 314–325.
- De Jesus, M. C.; Morgan, J.; Ahmed, R.; Rimai, D. S. 2007. The time dependence of the detachment force of ground micrometer-size particles from a planar substrate: Effect of particle rotation, *Particulate Science and Technology* 25(1): 107–116.
- Džiugys, A.; Peters, B. J. 2001. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers, *Granular Material* 3(4): 231–266.
- Forsyth, A. J.; Rhodes, M. J. 2000. A simple model incorporating the effects of deformation and asperities into the van der Waal's force for macroscopic spherical solid particles, *Journal of Colloid and Interface Science*, 223: 133–138.
- Fuller, K. N. G.; Tabor, D. 1975. The effect of surface roughness on the adhesion of elastic solids, *Proc. R. Soc. London Ser. A* 324: 327–342.
- Gilbert, F. A.; Roux, J. N.; Castellanos, A. 2007. Computer simulation of model cohesive powders: Influence of assembling procedure and contact laws on low consolidation states, *Physical review E*, 75: 011303(1–25).
- Gilardi, G.; Sharf, I. 2002. Literature survey of contact dynamics modelling, *Mechanism and Machine Theory* 37: 1213–1239.
- Greenwood, J. A. 1997. Adhesion of elastic spheres, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 453: 1277–1297.
- Greenwood, J. A.; Johnson, K. L. 1981. The mechanics of adhesion of viscoelastic bodies, *Phil. Mag.* A 43: 697–711.
- Greenwood, J. A.; Williamson, J. B. P. 1966. Contact of nominally flat surfaces, *Proc. R. Soc. London Ser. A* 295: 300–319.
- Ebenstein, D. M.; Wahl, K. J. 2006. A comparison of JKR-based methods to analyze quasi-static and dynamic indentation force curves, *Journal of Colloid and Interface Science* 298: 652–662.
- Ermis, E.; Farnish, R. J.; Berry, R. J.; Bradley, M. S. A. 2009. Direct measurement of powder flavor adhesion onto crisp surface using a novel adhesion teste, *Particulate Science and Technology* 27, 4th Relpowflo symposium 2008, Tromso, Norway, 362–372.

- Feng, X. Q.; Li, H.; Zhao, H. P.; Yu, S. W. 2009. Numerical simulations of the normal impact of adhesive microparticles with a rigid substrate, *Powder Technology* 189: 34–41.
- Hamaker, H. C. 1937. The London – van der Waals Attraction Between Spherical Particles, *Physica* 4(10): 1058–1070.
- Herrmann, H. J.; Luding, S. 1998. Modelling granular media on the computer, *Continuum Mech. Thermodyn.* 10: 189–231.
- Herrmann, H. J. 2002. *Granular matter*, *Physica A* 313: 188–210.
- Hosokawa, M.; Nogi, K.; Naito, M.; Yokoyama, T. 2007. *Nanoparticle technology handbook*, Elsevier Science, 644.
- Hunter, S. C. 1957. Energy absorbed by elastic waves during impact, *J Mech Phys Solids* 8: 162–71.
- Imre, B.; Rábsamen, S.; Springman, S. M. 2008. A coefficient of restitution of rock materials, *Computers & Geosciences* 34: 339–350.
- Ismail, K. A.; Strange, W. J. 2008. Impact of viscoplastic bodies: dissipation and restitution, *J. Appl. Mech.*, Transactions ASME 75(6): 061011(1–5).
- Israelachvili, J. N. 1992. *Intermolecular and surface forces*, Academic press inc., San Diego, 472.
- Jaeger, H. M.; Nagel, S. R.; Behringer, R. P. 1996. Granular solids, liquids, and gases, *Reviews of Modern Physics* 68(4): 1259–1273.
- Jasevičius, R.; Kačianauskas, R. 2007. Modelling deformable boundary by spherical particle for normal contact, *Mechanika* 68(8): 5–13.
- Jasevičius, R.; Kačianauskas, R.; Tomas, J. 2009. Simulation of sticking of adhesive particles under normal impact, *JVE Journal of Vibroengineering* 11(1): 6–17.
- Johnson, K. L.; Kendall, K.; Roberts, A. D. 1971. Surface energy and the contact of elastic solids. *Proc. R. Soc. Lond. A* 324: 301–313.
- Johnson, K. L.; Greenwood, J. A. 1997. An adhesion map for the contact of elastic spheres, *J. Coll. Interface Sci.* 192: 326–333.
- Johnson, K. L. 1985. *Contact Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge, MA, 465.
- Johnson, K. L. 1998. Mechanics of adhesion, *Tribology International* 31(8): 413–418.
- Jones, R. 2003. From Single Particle AFM Studies of Adhesion and Friction to Bulk Flow: Forging the Links, *Granular Matter* 4: 191–204.
- Kačianauskas, R.; Maknickas, A.; Kačeniauskas, A.; Markauskas, D.; Balevičius, R. 2009. Parallel discrete element simulation of poly-dispersed granular material, *Advances in Engineering Software* 41(1): 52–63.
- Kaushik, A.; Srinivasa, A. R.; Phares, D. J. 2007. Dynamic effects in microparticle pull-off using an AFM, *Particulate Science and Technology* 25(5): 387–399.
- Kendall, K. 2001. *Molecular adhesion and its application*, Kluwer Academic/Plenum Publ., New York, 440.
- Kohring, G. A. 1994. Computer simulations of granular materials: the effects of mesoscopic forces. *Phys. I France* 4: 1779–1782.
- Kohring, G. A. 1996. Dynamic simulations of granular flows on multi-processor computers, in *Computational Methods in Applied Sciences* 96, John Wiley and Sons Ltd., 190–196.

- Kremmer, M.; Favier, J. F. 2001. A method for representing boundaries in discrete element modelling – part I: Geometry and contact detection, *Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 51: 1407–1421.
- Kremmer, M.; Favier, J. F. 2001. A method for representing boundaries in discrete element modelling – part II: Kinematics, *Int. J. or numerical and analytical methods in geomechanics* 51: 1423–1436.
- Kruggel, E. H.; Simsek, E.; Rickelt, S.; Wirtz, S.; Scherer, V. 2007. Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method, *Powder Technology* 171(3): 157–173.
- Krupp, H. 1967. Particle adhesion theory and experiment. *Advan. Colloid Interface Sci.* 1: 111–239.
- Kuninaka, H.; Hayakawa, H. 2009. Simulation of cohesive head-on collisions of thermally activated nanoclusters, *Physical review* 79: 031309(1–9).
- Kuwabara, G.; Kono, K. 1987. Restitution coefficient in a collision between two spheres, *Japanese Journal of Applied Physics* 26: 1230–1233.
- Landman, U.; Luedtke, W. D.; Ringer, E. M. 1992. Molecular dynamics simulations of adhesive contact formation and friction. In *Fundamentals of Friction*, 220.
- Lifshitz, E.M. 1955. Teorija moleculyarnykh sil prityasheniya meshdu tverdyimi telami. *Journal of Experimental and Theoretical Physics USSR*. 29: 94–110.
- Lifshitz, E. M. 1956. The Theory of Molecular Attractive Force Between Solids. *Soviet Physics* 2: 73–83.
- Luding, S.; Tykhoniuk, R.; Tomas, J. 2003. Anisotropic material behaviour in dense, cohesive powders, *Chem. Eng. Technol.* 26(12): 1229–1232.
- Luding, S. 2005. Shear flow modeling of cohesive and frictional fine powder, *Powder Technology* 158: 45–50.
- Maugis, D. 1996. On the contact and adhesion of rough surfaces, *J. Adhesion Sci. and Tech.* 10: 161–175.
- Maugis, D. 1992. Adhesion of spheres: the JKR–DMT transition using a Dugdale model. *J. Coll. Interface Sci.* 150: 243–269.
- Maugis, D.; Barquins, M. 1978. Fracture mechanics and the adherence of viscoelastic bodies. *J. Phys. Appl. Phys.* 11: 1989–2023.
- Minamoto, H.; Kawamura, S. 2009. Effects of material strain rate sensitivity in low speed impact between two identical spheres, *International Journal of Impact Engineering* 36: 680–686.
- Moghini, S. M.; Hunter, A. C.; Murray, J. C. 2005. Nanomedicine: Current Status and Future Prospects, *The FASEB Journal* 19(3): 311–330.
- Molerus, O. 1975. Theory of yield of cohesive powders, *Powder Technology* 12: 259–275.
- Molerus, O. 1978. Effect of interparticle cohesive forces on the flow behaviour of powders, *Powder Technology* 20: 161–175.
- Muller, V. M.; Yushenko, V. S.; Derjaguin, B. V. 1980. On the influence of molecular forces on the deformation of an elastic sphere and its sticking to a rigid plane, *J. Coll. Interface Sci.* 77: 91–101.
- Munjiza, A. 2004. *The combined finite–discrete element method*, London, Wiley, 333 p.

- Particle Flow Code in 2 Dimensions Manual, Vers. 3.0.* 2002. Itasca Consulting Group Inc., Minneapolis, Minnesota, US.
- Poppe, T.; Blum, J.; Henning, T. 2000(a). Analogous experiments on the stickiness of micron-sized preplanetary dust, *The Astrophysical Journal* 533: 454–471.
- Poppe, T.; Blum, J.; Henning, T. 2000(b). Experiments on collisional grain charging of micron-sized preplanetary dust, *The Astrophysical Journal* 533: 472–480.
- Pöschel, T.; Schwager, T. 2004. *Computational granular dynamics, Models and algorithms*, Springer, Berlin, 322.
- Rabinovich, Y. I.; Adler, J. J.; Ata, A.; Moudgil, B. M.; Singh, R. K. 2000(a). Adhesion between Nanoscale Rough Surfaces: Part I: Role of Asperity Geometry, *J. Colloid Interface Sci.* 232: 10–16.
- Rabinovich, Y. I.; Adler, J. J.; Ata, A.; Moudgil, B. M.; Singh, R. K. 2000(b). Adhesion between Nanoscale Rough Surfaces: Part II: Measurement and Comparison with Theory, *J. Colloid Interface Sci.* 232: 17–24.
- Rougier, E.; Munjiza, A.; John, N. W. M. 2004. Numerical comparison of some explicit integration schemes used in DEM, FEM/DEM and molecular dynamics, *Int. J. Numerical Methods Engineering* 61: 856–879.
- Rumpf, H. 1958. Grundlagen und Methoden des Granulierens, *Chemie-Ingenieur-Technik* 30: 144–158.
- Rumpf, H. 1974. Die Wissenschaft des Agglomerierens, *Chemie-Ingenieur-Technik* 46: 1–11.
- Seifried, R.; Schiehlen, W.; Eberhard, P. 2005. Numerical and theoretical evaluation of the coefficient of restitution for repeated impacts, *International Journal of Impact Engineering* 32: 508–524.
- Sorace, C. M.; Louge, M. Y.; Crozier, M. D.; Law, V. H. C. 2009. High apparent adhesion energy in the breakdown of normal restitution for binary impacts of small spheres at low speed, *Mechanics Research Communications* 36: 364–368.
- Tabor, D. 1976. Surface forces and surface interactions, *J. Coll. Interface Sci.* 58: 1–13.
- Tavares, L. M.; King, R. P. 2002. Modeling of particle fracture by repeated impacts using continuum damage mechanics, *Powder Technology* 123: 138–146.
- Tykhoniuk, R.; Tomas, J.; Luding, S.; Kappl, M.; Heim, L.; Butt, H. J. 2007. Ultra fine cohesive powders: from interparticle contacts to continuum behaviour, *Chemical Engineering Science* 62: 2843–2864.
- Thornton, C.; Yin, K. K. 1991. Impact of elastic spheres with and without adhesion, *Powder Technol.* 65: 153–166.
- Thornton, C.; Ning, Z. 1998. A theoretical model for the stick/bounce behaviour of adhesive, elastic-plastic spheres, *Powder Technol.* 99: 154–162.
- Thornton, C. 1997. Coefficient of Restitution for Collinear Collisions of Elastic-Perfectly Plastic Spheres, *Journal of Applied Mechanics* 64: 383–386.
- Tomas, J. 2001. Assessment of mechanical properties of cohesive particulate solids: Part 1. Particle contact constitutive model, *Part. Sci. Technol.* 19: 95–110.
- Tomas, J. 2001. Assessment of mechanical properties of cohesive particulate solids: Part 2. Powder flow criteria, *Part. Sci. Technol.* 19: 11–129.
- Tomas, J. 2003. Mechanics of nanoparticle adhesion – A continuum approach. Detection, Adhesion and Removal, *Particles on Surfaces* 8: 1–47.

- Tomas, J. 2004. Fundamentals of cohesive powder consolidation and flow, *Granular Matter* 6: 75–86.
- Tomas, J. 2007. Adhesion of ultrafine particles. A micromechanical approach, *Chemical Engineering Science* 62: 1997–2010.
- Tomas, J. 2007. Adhesion of ultrafine particles. Energy absorption at contact, *Chemical Engineering Science* 62: 5925–5939.
- Tomas, J. 2008. *Mechanics of Particle Adhesion*, Manuscript, Magdeburg, 100.
- Tomas, J. 2009. Energy absorption at particle contact, compression and shear flow of dry ultrafine powder, *Particulate Science and Technology* 27(4): 337–351.
- Tsuji, Y.; Tanaka, T.; Ishida, T. 1992. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe, *Powder Technol.* 71: 239–250.
- Vu, Q. L.; Zhang, X.; Lesburg, L. 2000. A normal force–displacement model for contacting sphere accounting for plastic deformation: force–driven formulation, *J. Applied Mechanics* 67: 363–371.
- Walton, O. R.; Braun, R. L. 1986. Viscosity, granular–temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks, *Journal of Rheology* 30(5): 949–980.
- Wypych, P. W. 2008. Dense–phase pneumatic conveying technology for highly explosive metal powders, *Particulate Science and Technology* 26(1): 15–22.
- Wu, C. Y.; Li, L. Y.; Thornton, C. 2003. Rebound behaviour of spheres for plastic impacts, *International Journal of Impact Engineering* 28: 929–946.
- Wu, C. Y.; Li, L. Y.; Thornton, C. 2005. Energy dissipation during normal impact of elastic and elastic–plastic spheres, *International Journal of Impact Engineering* 32: 593–604.
- Zhou, H.; Peukert, W. 2008. Modelling adhesion forces between deformable bodies by FEM and Hamaker summation, *Langmuir* 24: 1459–1486.
- Zhu, H. P.; Zhou, Z. Y.; Yang, R. Y.; Yu, A. B. 2008. Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings, *Chemical Engineering Science* 63: 5728–5770.

Autoriaus mokslinių publikacijų disertacijos tema sąrašas

Straipsniai recenzuojamuose mokslo žurnaluose

Jasevičius, R.; Kačianauskas, R. 2007. Modeling deformable boundary by spherical particle for normal contact, *Mechanika* 6(68): 5–10. ISSN 1392-1207 (Thomson ISI Web of Science).

Jasevičius, R.; Kačianauskas, R.; Tomas, J. 2009. Simulation of sticking of adhesive particles under normal impact, *JVE Journal of Vibroengineering* 11(1): 6–17. 1392-8716 (Thomson ISI Web of Science).

Jasevičius, R.; Tomas, J.; Kačianauskas, R. 2010. Simulation of normal impact of micron-sized particle with elastic-plastic contact, *Mechanika* 2(82): 26–30. ISSN 1392-1207 (Thomson ISI Web of Science).

Straipsniai kituose leidiniuose

Jasevičius, R.; Tomas, J.; Kačianauskas, R. 2008. Simulation of microscopic compression-tension behavior of cohesive dry powder by applying DEM, in *Advanced Problems in Mechanics*, proceedings of the XXXVI summer school. St. Petersburg (Repino), Russian Academy of Sciences, Institute for Problems in Mechanical Engineering. St. Petersburg: RAS, 318–331.

Jasevičius, R.; Tomas, J.; Kačianauskas, R. 2009. Simulation of normal impact of ultrafine silica particle, in *The 6th International Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids CHoPs-VI*, Brisbane, Australia, 796–802. CD.

Jasevičius, R.; Tomas, J.; Kačianauskas, R. 2010. DEM simulation of ultrafine silica particles, in *World Congress on particle technology WCPT6*, Nuremberg, Germany, 1–4. CD.

Jasevičius, R.; Sidaravičius, D. J.; Staroselskis, M. 2006. Daugkartinis elektrografinio dažiklio susidūrimas su virpančia plokšte, *Mechanika, medžiagų inžinerija, pramonės inžinerija ir vadyba*: iš 9-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas – Lietuvos ateitis“, pranešimų medžiaga. Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Vilnius: Technika, 143–150.

Raimondas JASEVIČIUS

ULTRASMULKIŲ DALELIŲ
NORMALINĖS SĄVEIKOS
SKAITINIS MODELIAVIMAS

Daktaro disertacija

Technologijos mokslai,
mechanikos inžinerija (09T)

THE NUMERICAL MODELLING
OF NORMAL INTERACTION
OF ULTRAFINE PARTICLES

Doctoral Dissertation

Technological Sciences,
Mechanical Engineering (09T)

2010 12 20. 10,0 sp. l. Tiražas 20 egz.
Vilniaus Gedimino technikos universiteto
leidykla „Technika“,
Saulėtekio al. 11, 10223 Vilnius,
<http://leidykla.vgtu.lt>
Spausdino UAB „Ciklonas“,
J. Jasinskio g. 15, 01111 Vilnius
<http://www.ciklonas.lt>