

## DAUGIADISPERSIO IR VIENDISPERSIO DALELIŲ MIŠINIO ELGSENOS TYRIMAS. I DALIS: STRUKTŪROS CHARAKTERIZAVIMAS

Gvidas Pocius<sup>1</sup>, Robertas Balevičius<sup>2</sup>

Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lietuva

El. paštas: <sup>1</sup>gpocius@gmail.com (corresponding author); <sup>2</sup>robertas.balevicius@vgtu.lt

Įteikta 2011 11 22; priimta 2012 02 22

**Santrauka.** Diskrečiųjų elementų metodu modeliuota viendispersio ir daugiadispersio sferinių dalelių mišinio elgsena. Dėmesys skirtas mišinio mikro- ir makrostruktūros charakterizavimui, pasitelkiant dalelių dinaminio modeliavimo rodiklius. Pirmojoje straipsnio dalyje aptarta modeliavimo metodika ir grindžiamas gautųjų rezultatų korektiškumas, remiantis kontroliuojamaisiais mechaniniais būvio parametrais. Dalelių mišinio struktūrai charakterizuoti makrolygmeniu naudoti šie rodikliai: struktūros užimama tūrio dalis (tankumas), koordinacijos skaičius, dalelių kontaktinės jėgos. Aprašomas dalelių būsenų charakterizavimas taikant Hamiltono mechanikos principus.

**Reikšminiai žodžiai:** diskrečiųjų elementų metodas, daugiadispersis, viendispersis sferinių dalelių mišiniai, makrostruktūra, mikrostruktūra, kvazistatinis dalelių pusiausvyros būvis, Hamiltono mechanika, fazinė erdvė.

### 1. Įvadas

Daugiadispersių, viendispersių dalelių mišinių pagrindu pagamintų medžiagų įvairovė yra labai plati. Tai įvairios keramikos, betonai, gelžbetonio gaminiai, nanostruktūros ir kt.

Betonas – viena pagrindinių šiuolaikinės statybų industrijos medžiaga. Vienas pagrindinių jo komponentų yra cementas, kurio gamyba reikalauja ypač didelių energijos sąnaudų. Tarptautinių aplinkosaugos organizacijų tyrimų duomenimis, vienai tonai cemento pagaminti į atmosferą gali būti išmetama apie 900 kg anglies dioksido ir kitų medžiagų, prisidedančių prie vadinamojo „šiltnamio“ efekto didinimo. Todėl yra ypač aktualu kuo efektyviau ir taupiau naudoti cemento kiekį betono gamybai. Paprasčiau kalbant, cemento tešla negali būti naudojama betono poroms, tuštumoms tarp užpildų užpildyti. Veiksmingas cemento tešlos kiekis turėtų būti naudojamas tik mišiniui surišti. Riebieji betonai, turintys cemento tešlos perteklių, pasižymi ilgainiui didėjančiomis betono susitraukimo ir valkšnumo deformacijomis.

Mišinio dalelių struktūros tankumo tyrimai, technologinių veiksnių paieška tankumui didinti – tai vieni pagrindinių veiksnių efektyviam sudėtinių betono dalių, lemiančių cemento taupymą, parinkimui.

Pradiniam gamybos etape dalelių mišinys gali būti nagrinėjamas kaip tam tikra diskrečiųjų komponentų (dalelių) visuma, tačiau klasikinė kontinuumo teorija yra pritaikyta makrolygmens uždaviniams analizuoti ir menka dalimi aprašo efektus, atsirandančius atskirų mišinio dalelių lygmeniu.

Alternatyva kontinuumo teorijos modeliams gali būti diskrečiųjų elementų metodas (DEM) (Cundall, Strack 1979). Metodas grindžiamas Lagranžo mechanikos požiūriu ir leidžia medžiagą laikyti atskirų dalelių, sąveikaujančių pagal tam tikrus kontakto mechanikos modelius, sistema, kurios elgsenai aprašyti taikomi Niutono dėsniai.

Literatūroje yra nemažai darbų, skirtų dalelių sistemų tyrimams. Paminėtini vieni pirmųjų Bernal, Mason (1960), Mason (1968) ir Scott (1962) darbai, kurie rentgeno spinduliais bandė pažvelgti į trimatę dalelių

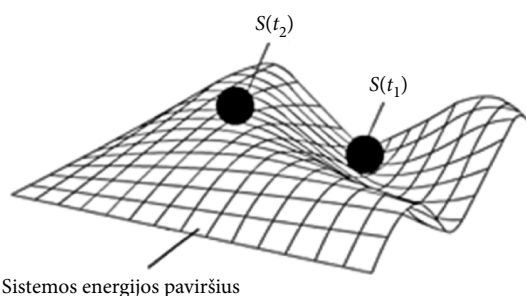
suformuotą struktūrą. Aste, Weaire (2000) šiuolaikiais kompiuterinės tomografijos metodais analizavo mišinių struktūrą, siekdami įvertinti dalelių organizavimo laipsnį. Yu ir Zou (1998), Džiugys ir Peters (2001) bei kitų autorių darbuose daug dėmesio skirta dalelių sąveikos modeliams ir jų taikymui įvairiems uždaviniams spręsti.

Nepaisant gausių tyrimų šiandien dar nėra aiški dalelių mišinio struktūros klasifikacija. Tai dažniausiai lemia ir chaotiška medžiagos prigimtis. Kartais sistemos pavienio elemento pokytis gali sukelti ekstremalų jautrumą sistemos pradinės būsenos atžvilgiu. Tuomet kyla klausimas, kaip sistemos būseną  $S(t_1)$  laiko momentu  $t_1$  transformuojasi į būseną  $S(t_2)$ , laiko momentu  $t_2$ . Problemą galima iliustruoti tarsi energijos paviršių fazinėje erdvėje, kuriuo judėdama, sistema pereina iš vienos būsenos (energijos lygmens) į kitą (1 pav.).

Siekiant visiškai suvokti dalelių mišinio būsenas, būtinas nuodugnus kiekvienos dalelės tikrosios padėties ir ją lėmusių veiksnių tyrimas, apimantis didžiulį kiekį informacijos. Didelė dalis šios informacijos yra perteklinė, nes keletas atskirų skirtingos mikroskopinės realizacijos būsenų dažnai gali turėti tas pačias eksperimente stebimas makrosavybes. Šiuo atveju dalelių mišinio elgsenai tirti gana veiksmingai gali būti taikomas diskrečiųjų elementų metodas (DEM).

Straipsnyje diskrečiųjų elementų metodu modeliuojama viendispersio ir daugiadispersio sferinių dalelių mišinio elgsena, akcentuojant kvazistatinio pusiausvyros būvio ypatumus.

Šioje straipsnio dalyje aptariama modeliavimo metodika ir pagrindžiamas gautųjų rezultatų korektiškumas, remiantis kontroliuojamaisiais mechaniniais būvio parametrais. Dalelių mišinio struktūrai charakterizuoti makrolygmeniu naudojami pagrindiniai



**1 pav.** Sistemos būsenos stabilumas:  $S(t_1)$  – stabilūs būsenos;  $S(t_2)$  – nestabili būsenos

**Fig. 1.** Stability of the system state:  $S(t_1)$  – stable state;  $S(t_2)$  – unstable state

rodikliai yra: kontaktinės dalelių jėgos, struktūros užimama tūrio dalis (tankumas), koordinacijos skaičius. Supažindinama su analitinės Hamiltono mechanikos ypatumais, tiriant mikrolygmens struktūrą.

## 2. Tyrimo metodika ir pradiniai duomenys

Tiriamas mišinys – tai sferinių dalelių rinkinys su pasirinktomis fizikinėmis ir mechaninėmis charakteristikomis. Šios charakteristikos artimos betono užpildų medžiagai (taikytos andezito charakteristikos). Pagrindinės charakteristikos pateiktos 1 lentelėje. DEM nežinomieji – tai dalelių padėtys, greičiai ir pagreičiai, kurie nustatomi sprendžiant antrojo Niutono dėsnio lygtį slenkamajam ir sukamajam judėjimui, žinant daleles veikiančias jėgas.

Taigi  $i$ -tosios dalelės judėjimui aprašyti galima taikyti literatūroje žinomas lygtis:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij} + m_i \mathbf{g}, \quad (1)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{d}_{cij} \times \mathbf{F}_{ij} + M_{ij,roll}, \quad (2)$$

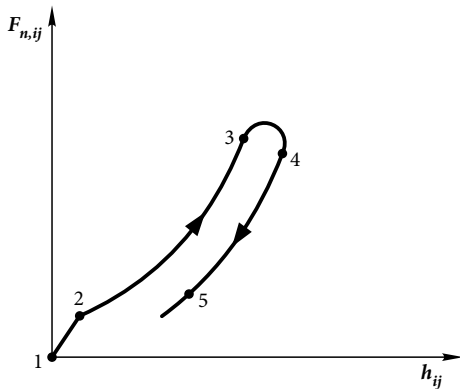
čia  $\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}_{n,ij} + \mathbf{F}_{t,ij}$ ,  $\mathbf{x}_i$ ,  $\boldsymbol{\omega}_i$  – dalelės masės centro padėties ir dalelės kampinio greičio vektoriai;  $m_i$  –  $i$ -tosios dalelės masė ( $i = 1, \dots, n$ );  $I_i$  –  $i$ -tosios dalelės inercijos momentas;  $t$  – nagrinėjamas laikas;  $\mathbf{g}$  – laisvojo kritimo pagreičio vektorius;  $\mathbf{d}_{cij}$  – vektorius, nusakantis kontaktinio taško padėties kontaktuojančių dalelių centrų atžvilgiu;  $\mathbf{F}_{n,ij}$  ir  $\mathbf{F}_{t,ij}$  – Hertz kontakto modelio koncepciją atitinkanti kontakto jėgos normalinė komponentė (statmena kontakto paviršiumi) ir tangentinė dedamoji, nukreipta liestine kontakto paviršiumi;  $M_{ij,roll}$  – sukimo momentas, kurį lemia riedėjimo trintis.

Darbuose (Džiugys, Peters 2001; Balevičius *et al.* 2004, 2011; Popov 2010 ir kt.) galima rasti į lygtis (1) ir (2) įeinančių dydžių matematinius aprašymus. Toliau glaustai aptarsime kontakto jėgų modelio elgseną.

Kontakto jėgų – poslinkio, kuris lygus kontaktuojančių dalelių persiklojimui, galima grafinė interpretacija parodyta 2 pav.

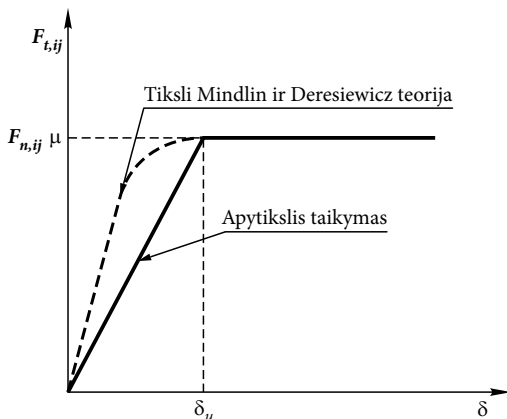
Tangentinės kontakto jėgos modelis (3 pav.) apima Mindlin ir Deresiewicz teorijos taikymą (Džiugys, Peters 2001; Balevičius *et al.* 2004). Modelis pagrįstas apytiksliai kontaktuojančių dalelių mikropraslydimo tangentine linkme vertinimu, kai daleles spaudžia normalinė kontakto jėga, o tangentinė kontakto jėga gali kisti. Modeliuojant laikoma, kad iki tol, kol bus įveikta statinė trinties jėga (t. y. kai kontaktinio dalelių sukibi-

mo paviršiaus spindulys sumažės iki nykstamai mažo dydžio) ir viena dalelė ims slysti kitos atžvilgiu, apytiksliai galioja tiesinė priklausomybė tarp tangentinės jėgos ir poslinkio (3 pav.). Ribinis mikropaslydimo poslinkis  $\delta_u$ , kurį viršijus dalelė pradeda slysti, priešinant mažesnei dinamiškos trinties jėgai, nustatomas pagal Mindlin ir Deresiewicz (1953) teoriją (3 pav.).



**2 pav.** Klampiosios ir Hertz kontakto jėgos – persiklojimo modelis deformavimo kelyje 1–5: 1–2 – lemiantis poveikis priklauso klampaus kontakto traukos jėgai; 2–3 – lemiantis poveikis priklauso Hertz kontakto traukos jėgai; 3–4 – lemiantį poveikį daro klampaus kontakto stūmos jėga; 4–5 – lemiantį poveikį daro Hertz kontakto stūmos jėga (vėliau dalelė gali prarasti kontaktą, veikiant stūmos jėgai)

**Fig. 2.** Viscous force and Hertz contact stress – an overlap model for a deformation path 1–5: 1–2 – decisive effect depends on the tractive force of a viscous contact; 2–3 – decisive effect depends on Hertz contact stress; 3–4 – decisive effect depends on the repulsion force of a viscous contact; 4–5 – decisive effect depends on the repulsive force of Hertz contact (at a later stage, the particle can lose a contact due to repulsive force)



**3 pav.** Tangentinės kontakto jėgos modelis (be klampiosios dedamosios), čia  $\delta_u$  – ribinis mikropaslydimo poslinkis

**Fig. 3.** Model for the tangential force of a contact (with no viscous component) where  $\delta_u$  is limit displacement of a microslip

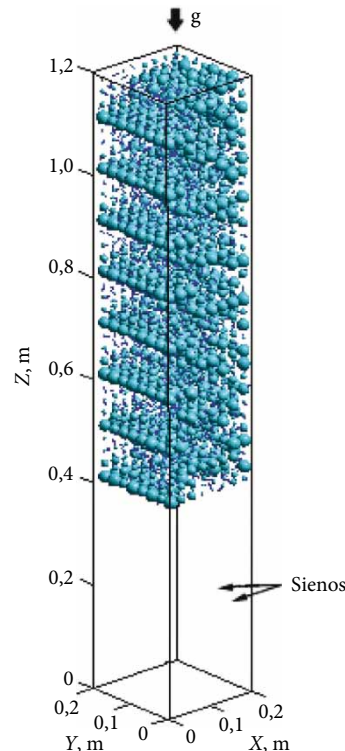
Modeliuojant taip pat atsižvelgta į galimą mišinio dalelių riedėjimo trinties poveikį dėl sukimo momentų. Taikytas modelis aprašytas darbe (Balevičius *et al.* 2011).

Netiesinių diferencialinių judėjimo lygčių skaitinis integravimas kiekvienai dalelei  $i$ -tuoju laiko momentu  $t + \Delta t$  (čia  $\Delta t$  yra laiko žingsnis) atliekamas pagal penktosios eilės *Gear predictor-corrector* schemą ir kaupiant duomenis apie dalelių padėtis bei greičio vektorius kiekvienu laiko momentu (Balevičius *et al.* 2006).

### 3. Modeliavimo kontroliuojamieji duomenys

Dinaminis dalelių mišinio modeliavimas pradedamas tam tikru dalelių išdėstymu trimatėje skaičiuojamojoje erdvėje (4 pav.), suteikiant atsitiktinai parinktą pradinio greičio reikšmę (1 lentelė). Veikiamos sunkio jėgos, dalelės pradeda kristi ir dėl suteikto pradinio greičio prasideda mišinio maišymosi procesas.

Kadangi siekiama tirti dalelių kvazistatinę būseną, t. y. būseną, kai dalelių padėtis ir greičio kitimas yra nykstamai mažas, atsiranda būtinybė pasirinkti parametrus, kuriais būtų galima kontroliuoti dinaminę sistemos elgseną. Sistemos kontroliuojamaisiais parametrais pasirinkti: sistemos kinetinė energija bei jėgų pusiausvyra tarp mišinio svorio jėgos ir pagrindo reakcijos.



**4 pav.** Laisvasis daugiadispersio dalelių mišinio kritimas

**Fig. 4.** Free fall of the polydispersed particle mixture

1 lentelė. Dalelių modeliavimo charakteristikos

Table 1. Characteristics of modelling particles

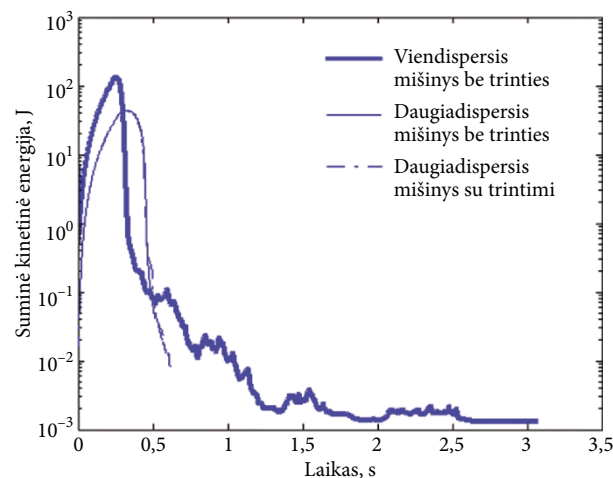
Parametras	Viendispersis mišinys be trinties	Daugiadispersis mišinys be trinties	Daugiadispersis mišinys su trintimi
Dalelių skaičius	2048		
Dalelių skersmuo	0,025 m	0,003–0,025 m	0,003–0,025 m
Tankis	2500 kg/m <sup>3</sup>		
Tamprumo modulis	10 GPa		
Puasono koeficientas	0,2		
Trinties koeficientas	–	–	0,6
Riedėjimo trinties koeficientas	–	–	0,005
Energijos disipacijos koeficientas normalinei dedamajai*	15 400 1/s	85 000 1/s	85 000 1/s
Energijos disipacijos koeficientas tangentinei dedamajai	1540 1/s	8500 1/s	8500 1/s
Laiko žingsnis	2,5·10 <sup>-7</sup> s	1,3·10 <sup>-8</sup> s	1,3·10 <sup>-8</sup> s
Vidutinė pradinio greičio reikšmė	1,0 m/s		
Kontakto modelis	Hertz		

**Pastaba:** \*Disipacijos koeficientas parinktas pagal literatūroje rastą andezito, naudojamo betono užpildu, restitucijos koeficientą, atskirai sprendžiant dviejų dalelių kontakto uždavinį pagal Hertz modelį

Dalelių mišinio kinetinės energijos mažėjimas iki sąlyginio nulio reikšmės (5 pav.) (sąlyginio nulio reikšmė šiuo atveju imama dalelių mišinio kinetinei energijai nuslopus iki 10<sup>-3</sup> J) leidžia nutraukti skaičiavimą, laikant, kad įsivyravo kvazistatinė mišinio būsena.

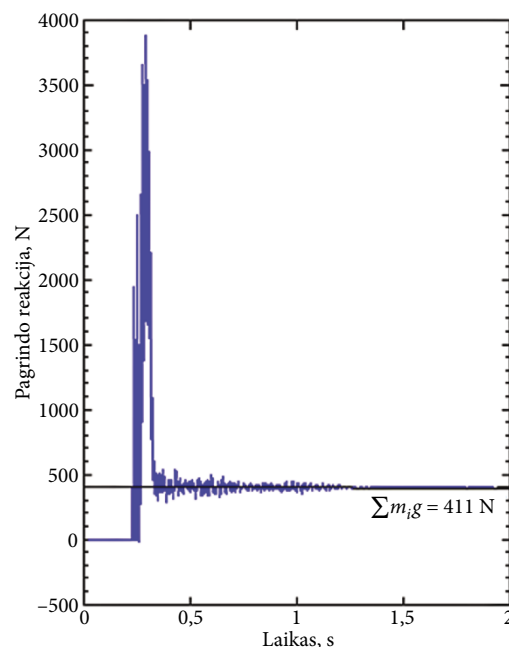
Jėgų pusiausvyrą tarp mišinio svorio ir pagrindo reakcijos – tai kitas parametras, rodantis dinaminės analizės korektiškumą. 6 pav. parodyta viendispersio mišinio dalelių reakcija į dugną ir mišinio svorio jėgų balanso kaita laike. Matyti, kad pradiniam etape dėl

dinaminės dalelių elgsenos balanso nėra. Skaičiavimo pabaigoje dinaminis poveikis gęsta ir įsivyrauja pusiausvyrą. Lokalios atskirų dalelių jėgos, greičiai ir kiti parametrai vidutiniškai suvienodėja lemdami visos medžiagos kvazistatinę makrobūsena.



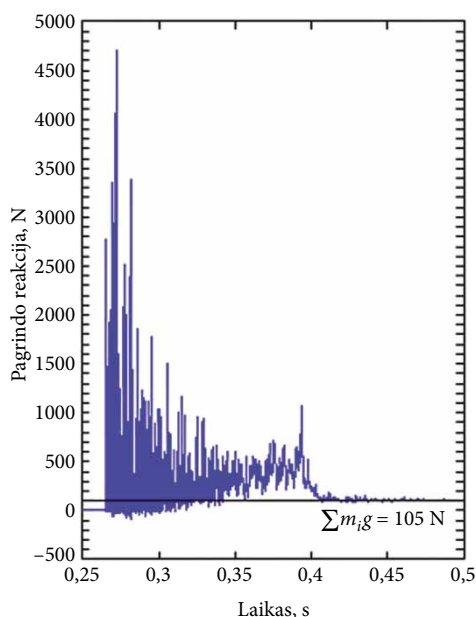
5 pav. Dalelių mišinių suminės kinetinės energijos kitimas laike (daugiadispersių mišinių kreivės persikloja)

Fig. 5. Changes in the total kinetic energy of particle mixtures considering time (curves of the polydispersed mixtures overlap)



6 pav. Viendispersio mišinio skaičiuojamosios erdvės pagrindo reakcijos balansas su suminiu dalelių svoriu

Fig. 6. Reaction balance between the basis of the computational space of the monodispersed mixture and the total weight of particles



7 pav. Daugiadispersių mišinių skaičiuojamosios erdvės pagrindo reakcijos balansas su suminiu dalelių svoriu

Fig. 7. Reaction balance between between the basis of the computational space of polydispersed mixtures and the total weight of particles

7 pav. parodyta daugiadispersio mišinio jėgų balanso elgsena. Čia pastebimas didesnis pagrindo reakcijos svyravimas prieš kvazistatinį būvį.

Taigi kontroliuojamųjų parametrų analizė parodė, jog mišinio dalelių elgsenos modeliavimas išspręstas korektiškai, esant pasirinktam laiko žingsniui (1 lentelė). Pažymėtina, kad didelė tamprumo modulio reikšmė, būdinga andezitui, lemia labai mažą integravimo žingsnį (1 lentelė), todėl skaičiavimo procesas išnaudojo daug kompiuterinio laiko.

## 4. Modeliavimo rezultatai

### 4.1. Struktūros charakterizavimas makrolygmeniu

Dažniausiai literatūroje minimi dalelių mišinio struktūros charakterizavimo makrolygmeniu rodikliai yra: dalelių kontaktinės jėgos, struktūros užimama tūrio dalis (tankumas) ir koordinacijos skaičius. Šis parametras rodo kontaktuojančių dalelių skaičių, vidutiniškai tenkantį vienai dalelei mišinyje. 8 pav. pateiktas nagrinėtų mišinių kontaktinių jėgų pasiskirstymas pagal daleles, esant sistemos kvazistatinės pusiausvyros būviui. Dalelių spalvos rodo kontaktinės jėgos atstojamosios vektoriaus modulio reikšmę.

8 pav. rezultatai rodo, kad dalelių jėgų pasiskirstymas yra skirtingas, priklausantis nuo mišinio kompaktiškumo, dalelių laisvės laipsnio mišinyje. Iš esmės

kontaktinių jėgų pasiskirstymas yra chaotiškas, tačiau akivaizdžiai išvelgiama tendencija: kontaktinės jėgos yra didesnės dalelėse, esančiose arčiau dugno. Tai lemia mišinio svorio jėga, kuri pasiskirsto tarp atskirų dalelių. Pavyzdžiui, 8 pav. matyti, kad randamas tam tikras skaičius neaktyvių dalelių, kurios būdamos sistemos dalimi perima tik savojo svorio sukeltą apkrovą. Taigi šios dalelės turi daugiau laisvės judėti erdvėje nei kitos, todėl vien tik kontaktinės jėgos kaip makrorodiklis struktūros charakterizavimui nėra išsamus.

Likusiems dviem struktūros charakterizavimo makrorodikliams įvertinti pasinaudota dalelių padėties koordinacijų kitimo viso modeliavimo metu rezultatais. Remiantis šiais duomenimis, kiekviename laiko žingsnyje buvo skaičiuotas vidutinis koordinacijos skaičius mišinyje bei formuota kiekvienos dalelės Voronoi celė (Abellanas *et al.* 1995). Voronoi celė yra iškilasis briaunainis, sudarytas iš plokštumų, išvestų statmenai nagrinėjamosios *i*-tosios dalelės ir artimiausių jai dalelių svorio centrų jungiančios atkarpos centre (9 pav.). Daugiadispersiuose dalelių mišiniuose naudojant standartinę Voronoi celę, gaunamos paklaidos dėl nepilno dalelės patekimo į celės vidų, todėl atlikta Lechenault *et al.* (2006) naudota modifikacija.

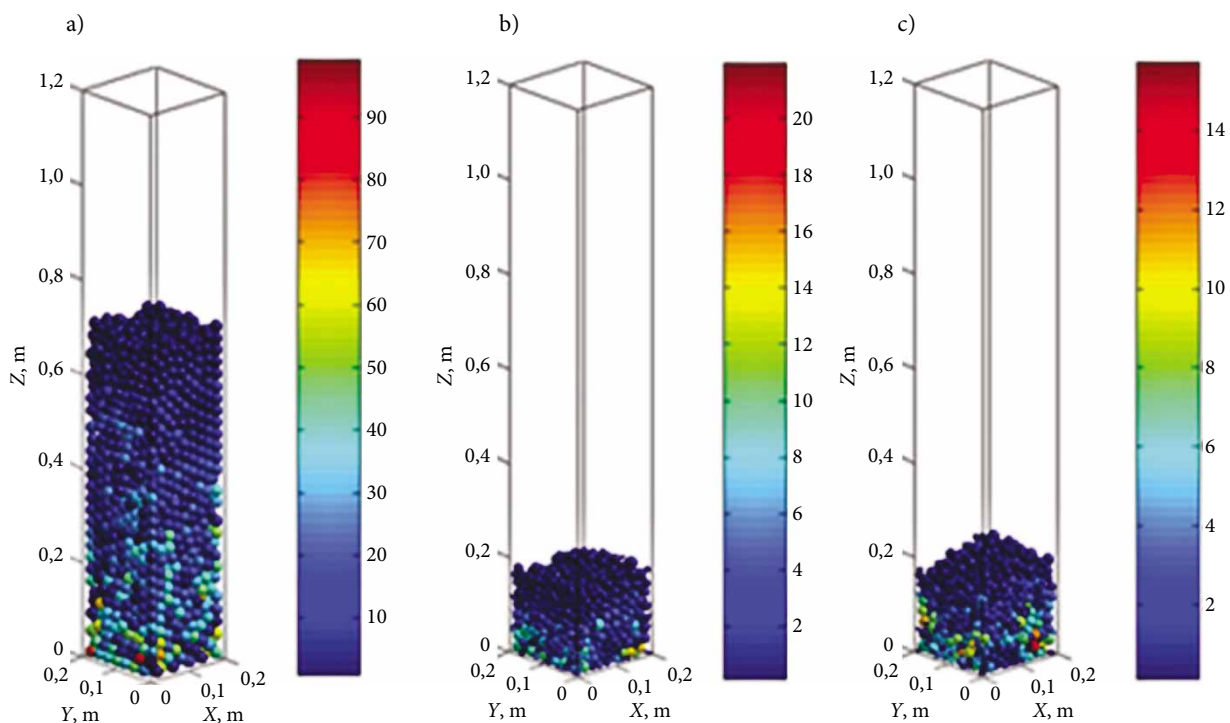
Modifikuotoji celė kuriama įtraukiant į jos viršūnių taškų gaubtinę papildomus gretimų dalelių kontakto taškus ir taip užtikrinant, kad celės plokštumos nekirstų dalelės. Santykis visų mišinio dalelių vidutinio tūrio su jų Voronoi celių vidutiniu tūriu  $V_{m.dal}/V_{m.Vor}$  apskaičiuotas kiekvienu laiko momentu, leido nustatyti mišinio dalelių užimamą tūrio dalį (tankumą) skaičiuojamojoje erdvėje. Rezultatams atvaizduoti sudaryti minėtųjų rodiklių sąryšio grafikai, pateikti 10 pav. Siekiant palyginti rezultatus, viendispersio dalelių mišinio  $V_{m.dal}/V_{m.Vor}$  santykis skaičiuotas naudojant modifikuotus dalelių tūrius, nustatytus pagal (3) formulę, gautą iš daugiadispersio dalelių mišinio kreivės pritaikymo analizės

$$V_{dal.mod} = \frac{V_{vor.dal} \cdot VKS}{VKS + 3,464}, \quad (3)$$

čia  $V_{vor.dal}$  – atskiros dalelės Voronoi celės tūris;  $VKS$  – vidutinis koordinacijos skaičius.

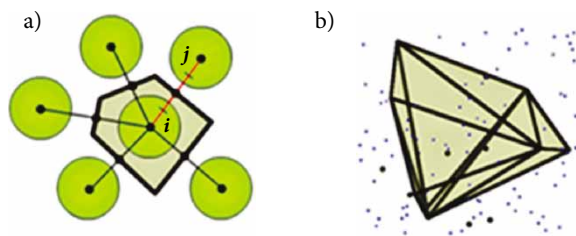
Suprantama, kad norint gauti tankų dalelių mišinį, reikia efektyviai parinkti jo granulimetrinę sudėtį. 10 pav. pastebime akivaizdžiai spartesnį daugiadispersio dalelių mišinio koordinacijos skaičiaus augimą laike, palyginti su viendispersiu mišiniu, neatsižvelgiant į trinties koeficientą. Šis augimas rodo, kad mažesnės dalelės greičiau prasiskverbia į mišinio struktūros gi-





**8 pav.** Dalelių mišinių kontakinių jėgų spalvinės diagramos: a – viendispersis dalelių mišinys be trinties; b – daugiadispersis dalelių mišinys be trinties; c – daugiadispersis dalelių mišinys su trintimi

**Fig. 8.** Colour charts of the contact forces of particle mixtures: a – monodispersed particle mixture with no friction; b – polydispersed particle mixture with no friction; c – polydispersed particle mixture with friction

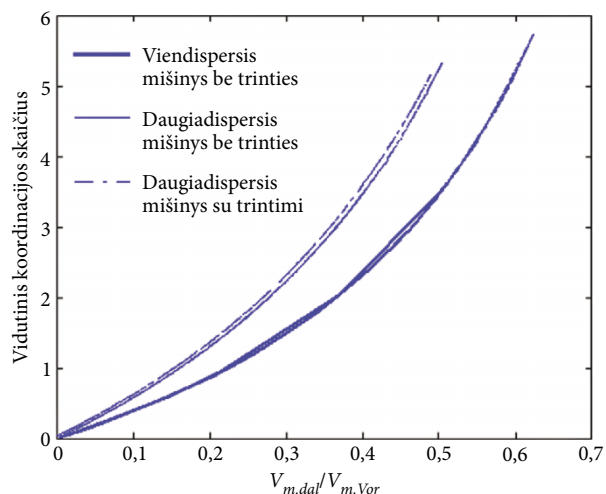


**9 pav.** Voronoi celės formavimas: a – formavimo dvimatė principinė schema; b –  $i$ -tosios dalelės Voronoi celė mišinyje (stambūs juodi taškai vaizduoja daleles, esančias arčiausiai nagrinėjamos  $i$ -tosios dalelės, pagal kurias yra formuojama Voronoi celė, o mėlyni taškai vaizduoja tolimesnes daleles)

**Fig. 9.** Generation of the Voronoi cell: a – two-dimensional principal scheme of generation; b – Voronoi cell of the  $i^{\text{th}}$  particle in the mixture (black points show the neighbours of the  $i^{\text{th}}$  particle used for Voronoi cell generation, blue points indicate other particles in the mixture)

lumą. Kita vertus, iš 10 pav. matome, kad atvirkščiai nei koordinacijos skaičius, dalelių mišinio užimama tūrio dalis (tankumas) lėčiau auga daugiadispersiame mišinyje. Tai susiję su daugiadispersio dalelių mišinio neaktyvių dalelių zonų susiformavimu (11 pav.). Šie dariniai trukdo tolesniam mišinio tankėjimui be papildomo išorinio poveikio (pvz., mišinio vibravimo).

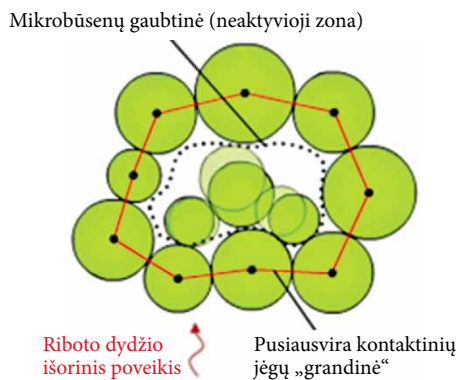
Analizuojant gautus tyrimo rezultatus, matyti, kad šie duomenys perteikia nepakankamą informaciją apie



**10 pav.** Priklausomybė tarp vidutinio koordinacijos skaičiaus ir mišinio dalelių užimamos tūrio dalies (tankumo) (viendispersio mišinio kreivė yra dviguba dėl pradinės kristalinio pavidalo struktūros)

**Fig. 10.** Dependence between the mean coordination number and the volume fraction of the particle mixture (curve of the monodispersed mixture is duplicate due to initial crystalline structure)

vidines struktūros ypatybes. Minėtieji rodikliai apibūdina tam tikrą sistemos makrobūseną, kurios egzistavimą gali tenkinti keletas ar keliolika mikrobūsenų (11 pav.), todėl būtina papildoma analizė.



11 pav. Neaktyvioji zona kvazistatinio pusiausvyros būvio dalelių mišinyje

Fig. 11. Inactive zone of the particle mixture in the quasistatic equilibrium state

#### 4.2. Struktūros mikrobūsenos

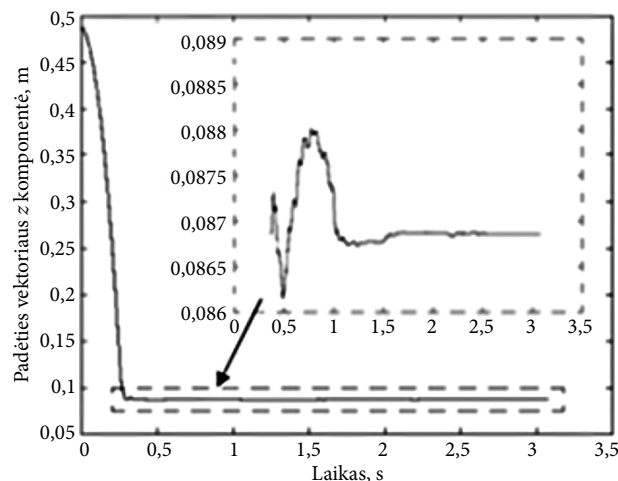
Esant tam tikroms pastovioms kraštinėms sąlygoms, bet kitoms pradinėms dalelių konfigūracijoms galutinė pusiausvyros mišinio struktūra gali būti kitokia. Tai galima paaiškinti antruoju termodinamikos dėsniu, kuris teigia, kad izoliuotosios pusiausvyros sistemos entropija yra didžiausia (Edwards, Oakeshott 1989). Šiuo atveju entropija gali būti informacijos apie sistemą stokos matas. Jei tik žinoma, kad taškas, reprezentuojantis sistemą fazinėje erdvėje, yra viduje tam tikro tūrio, kuris gali būti vadinamas reprezentatyviuoju tūriniu elementu, bet nežinoma tiksliai jo padėtis šiame tūryje, tuomet taškas gali būti bet kuris vienas iš didžiulės daugybės taškų, kurie yra nagrinėjamame tūryje.

Jau minėta, kad kvazistatinė pusiausvyra yra sąlyginė pusiausvyra, nes ji reiškia dalelių makrobūsenos stabilizavimąsi, tačiau mikrolygiu judėjimas vis dar gali vykti. Tai matyti iš dalelių mišinio tam tikros  $i$ -tosios dalelės padėties vektoriaus  $z$  komponentės kitimo laike grafiko (12 pav.).

Iš 12 pav. matyti, kad dalelių mišiniui pasiekus kvazistatinės pusiausvyros būvį, atskira dalelė yra suvaržoma susiformavusioje padidėjusių kontaktinių jėgų zonoje (13 pav., a) ir prasideda jos mikrobūsenų kitimas (13 pav., b).

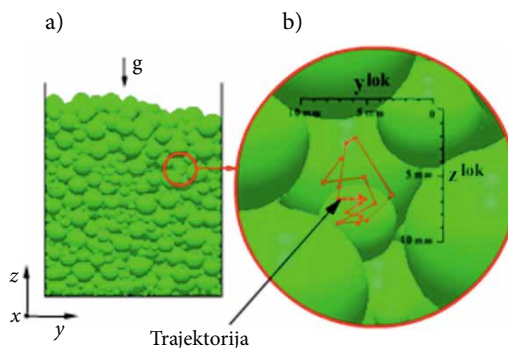
Taigi gali egzistuoti nemažas kiekis galimų sistemos būsenų, ir nežinoma, kuri iš jų yra tikroji. Šiai padėčiai įvertinti makrolygmeniu galimas tik statistinis problemos sprendimo būdas.

Dalelių kontaktinės jėgos yra nepakankamas struktūros charakterizavimo rodiklis. Siekiant turėti charakteristiką, kuri būdinga kiekvienam mišinio



12 pav. Dalelių mišinio  $i$ -tosios dalelės padėties vektoriaus  $z$  komponentės kitimas laike

Fig. 12. Changes in the vector  $z$  component of the position of the  $i^{\text{th}}$  particle considering time



13 pav. Kvazistatinio pusiausvyros būvio daugiadispersio dalelių mišinio vidinė struktūra: a – neaktyvioji zona mišinyje; b –  $i$ -tosios dalelės svorio centro padėties kitimo laike trajektorija, pavaizduota lokalioje koordinatinių sistemoje

Fig. 13. Internal structure of the particle mixture in the quasistatic equilibrium state: a – inactive zone in the mixture; b – trajectory of changes in the position of the mass centre of the  $i^{\text{th}}$  particle centre is displayed in the local coordinate system

struktūros elementui ir kuria remiantis būtų galima sudaryti statistinį modelį, paprastai taikomos ne klasikinės Niutono mechanikos formuluotės, nagrinėjančios jėgų vektorius, o Hamiltono mechanikos principai (Gekle 2005). Čia analizuojamas judėjimas, remiantis dviem skaliarinėmis judesio charakteristikomis: kinetine ir potencine energija.

Mišinio dalelių mikrobūsenoms charakterizuoti pasitelksime fazinės erdvės sąvoką (Hilborn 2008). Fazinė erdvė – tai abstrakti daugiamatė erdvė, kurios koordinatėmis yra sistemos laisvės laipsniai, t. y. skaičius nepriklausomų kintamųjų, reikalingų sistemos dinaminei būsenai apibūdinti. Pagrindinis skirtumas

tarp fazinės ir koordinacių erdvės tas, kad fazinė erdvė yra būsenos erdvė, tai reiškia, jog kiekvienas taškas joje atitinka unikalią sistemos būseną, kur taškas koordinacių erdvėje nustato tik fizinę sistemos konfigūraciją. Rinkinys galimų mikrobūsenų gali būti išreikštas rinkiniu taškų fazinės erdvės trajektorijoje, kuri vaizduoja sistemos mikroskopinės būsenos kitimą laike.

Konservatyvios sistemos fazinės erdvės trajektoriją aprašo Hamiltono mechanikos lygtys (Lichtenberg, Lieberman 1992):

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad (4)$$

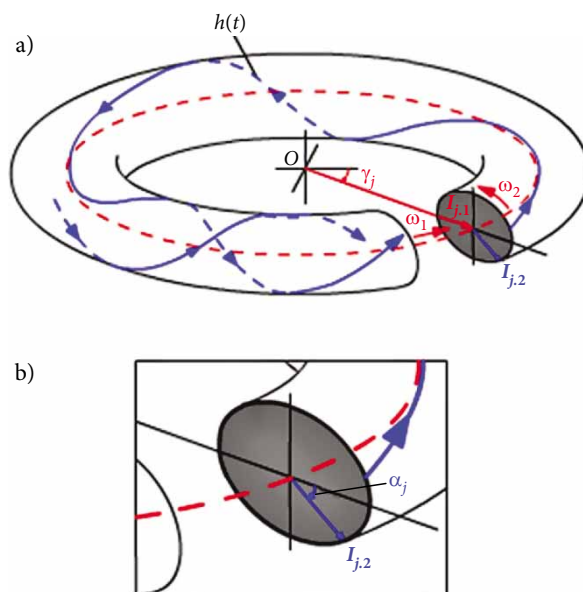
$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad (j = 1, \dots, l), \quad (5)$$

čia  $q_j$  –  $j$ -ojo laisvės laipsnio apibendrintoji koordinatė;  $p_j$  –  $j$ -ojo laisvės laipsnio apibendrintasis judesio kiekis, išreiškiamas masės ir greičio sandauga;  $H$  – Hamiltono funkcija, išreiškianti sistemos mechaninę energiją (kinetinės ir potencinės energijos suma);  $H$  priklauso nuo visų  $q_j$  ir  $p_j$ ;  $l$  – mechaninių laisvės laipsnių skaičius;  $\dot{q}_j$ ,  $\dot{p}_j$  reiškia dydžių  $q_j$  ir  $p_j$  išvestines pagal laiką. Sistemos mikroskopinę būseną visiškai nusako  $2l$  dydžių –  $l$  apibendrintųjų koordinacių  $q_j$  ir  $l$  apibendrintųjų judesio kiekių  $p_j$ , priklausančių nuo pradinių sąlygų ir laiko.

Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) teorema (Broer 2004), judėjimo diferencialinių lygčių (4–5) geometrinę interpretaciją pateikia kaip trajektorijų rinkinį fazinėje erdvėje, dengiantį  $l$ -mačio toro paviršių. 14 pav. pateikta konservatyvios (nedisipatyvios) sistemos dvimačio toro, charakterizuojamo kampiniais dažniais  $\omega_1$  ir  $\omega_2$ , schema.

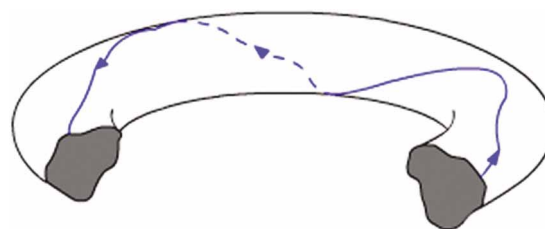
14 pav. pavaizduoto toro paviršių dengiančios fazinės trajektorijos  $h(t)$  kiekvienas taškas atitinka vieną sistemos mikrobūseną, apibūdinamą fazinės trajektorijos elgsenos kintamaisiais.

Analitinė Hamiltono mechanika tinka tik konservatyvios (nedisipatyvios) sistemos elgsenai tirti, tačiau Kolmogorov teorema (Broer 2004) teigia, kad esant gana mažam Hamiltono sutrikdymui, didžioji dalis energijos toro neišnyksta, o tik šiek tiek deformuojasi (15 pav.), kartu įvykstant ir fazinės trajektorijos globaliai bifurkacijai, t. y. kokybiniam fazinės trajektorijos pobūdžio pokyčiui. Siekiant parodyti disipacijos įtaką fazinės trajektorijos elgsenai, 16 pav. pateiktas vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės fazinių trajektorijų pokytis normalinio kontakto metu, skaičiavimuose keičiant normalinio slopinimo koeficientą  $\zeta_n$ .



14 pav. Konservatyvios (nedisipatyvios) sistemos dvimatis energijos paviršius (toras) fazinėje erdvėje, aprašytas elgsenos kintamaisiais  $I_{j,1}$ ,  $I_{j,2}$ ,  $\gamma_j$ ,  $\alpha_j$ ; a – fazinė trajektorija  $h(t)$  toro paviršiuje; b – toro skerspjūvis ir elgsenos kintamieji  $I_{j,2}$  ir  $\alpha_j$

Fig. 14. Two-dimensional energy surface (torus) of the conservative (non-dissipative) system in phase space expressed in behaviour variables  $I_{j,1}$ ,  $I_{j,2}$ ,  $\gamma_j$ ,  $\alpha_j$ ; a – phase trajectory  $h(t)$  on torus surface; b – the torus section and behaviour variables  $I_{j,2}$  and  $\alpha_j$

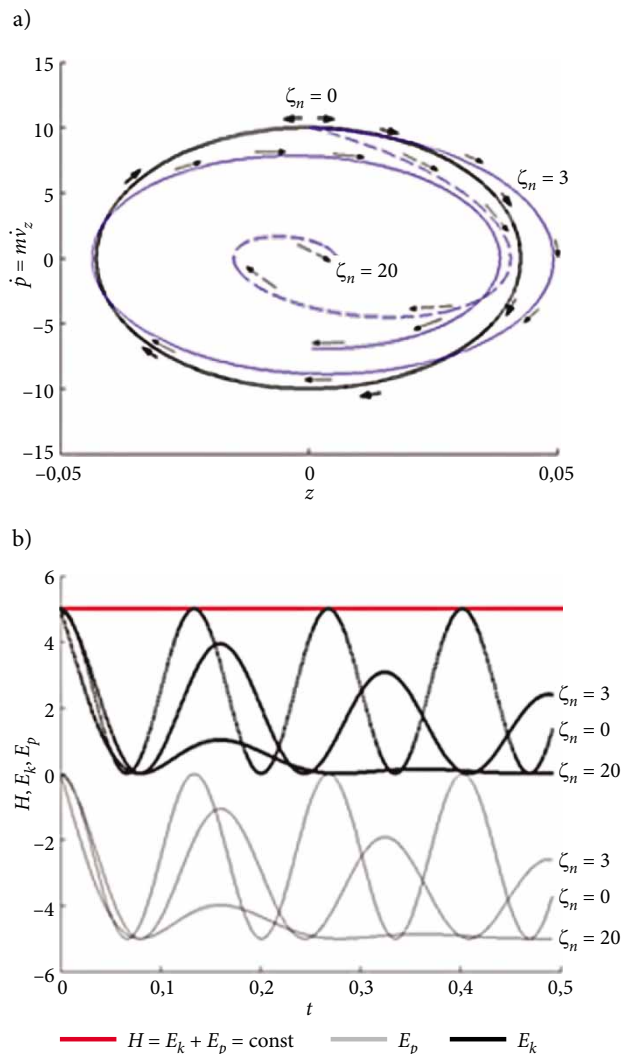


15 pav. Sutrikdytas dvimatis energijos toras  
Fig. 15. Disturbed two-dimensional energy torus

16 pav., a, matoma, kai normalinio slopinimo koeficientas  $\zeta_n = 0$ , fazinė trajektorija turi elipsės pavidalą. Didinant normalinio slopinimo koeficientą, fazinė trajektorija įgauna spiralės formą. Kinetinės ir potencinės energijos pokyčiai, esant skirtingiems normalinio slopinimo koeficientams, pateikti 16 pav., b. Matoma, kad padidėjusio disipacijos poveikis pasireiškia kinetinės ir potencinės energijos kreivių slopinimu laike.

Disipacija labiausiai priklauso nuo dalelių klampumo ir trinties charakteristikų. Literatūroje randama nemažai atliktų tyrimų (Edwards, Oakeshott 1989), įrodančių, kad egzistuoja tiesioginis ryšys tarp energijos toro sutrikdymo laipsnio fazinėje erdvėje ir kiekvienos dalelės mechaninio laisvės laipsnio fizinėje mišinio





**16 pav.** Normalinio slopinimo koeficiento  $\zeta_n$  įtaka vieno mechaninio laisvės laipsnio dalelės fazinės trajektorijos elgsenai: a – dalelės fazinė trajektorija, kai  $\zeta_n = 0$ ,  $\zeta_n = 3$ ,  $\zeta_n = 20$ ; b – dalelės Hamiltonas ir kinetinės bei potencinės energijos pokyčiai esant normalinio slopinimo koeficientams

**Fig. 16.** The influence of normal dissipation coefficient  $\zeta_n$  on the behaviour of the phase trajectory of the particle with one mechanical degree of freedom: a – phase trajectory of a particle, when  $\zeta_n = 0$ ,  $\zeta_n = 3$ ,  $\zeta_n = 20$ ; b – Hamiltonian particles and changes in the kinetic and potential energy of the particle under normal coefficients of dissipation

struktūroje: kuo mažesnis dalelės mechaninis laisvės laipsnis, tuo ji labiau atitinka Hamiltono mechanikos formuluotę. Galima manyti, kad kiekvienos mišinio dalelės svorio centro koordinatinių vektorius siejasi su vektoriumi  $I_{j,1}$  (čia  $I_{j,1}$  dėl sistemos disipatyvumo yra funkcija, priklausanti nuo kampo  $\gamma_j$ ), o dalelės judesio kiekį reprezentuojantis greičio vektorius yra susijęs su vektoriumi  $I_{j,2}$ , kuris priklauso nuo kampo  $\alpha_j$  (14 pav., b). Tuomet kvazistatinio pusiausvyros būvio sistemos, nepatiriančios didelio disipacijos poveikio, bet kurios mikrobūsenos charakterizavimui pakanka

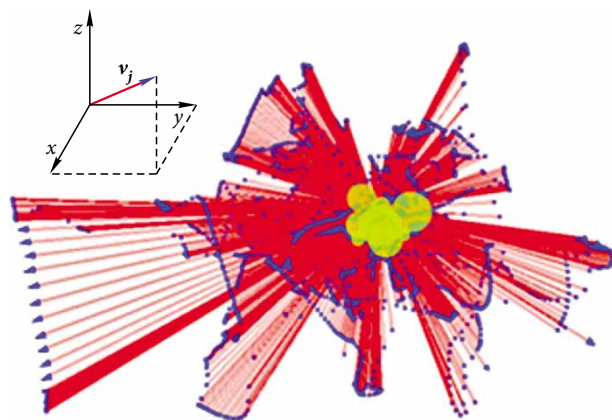
žinoti tik fazinės trajektorijos kitimo dėsningumus toro paviršiuje, nusakomus kampais  $\gamma_j$  ir  $\alpha_j$  (14 pav., a).

Taigi Kolmogorov teorema (Broer 2004) leidžia Hamiltono mechanikos principus pritaikyti suvaržytuose dalelių mišiniuose, pasižyminčiuose riboto dydžio disipacija.

Anksčiau buvo minėta, kad nagrinėjama kvazistatinės pusiausvyros būvio sistema. Kadangi esant šios būsenos dalelių masės centro koordinatės kinta tik mikrolygiu (energiją reprezentuojantis toro paviršius yra mažai iškreiptas), tad galima teigti, jog dalelės mikroskopinę būseną visiškai nusako trys judesio kiekiai:  $p_{x,j}$ ,  $p_{y,j}$  ir  $p_{z,j}$ , išreiškiami atitinkamomis dalelės greičio vektorių komponentėmis:  $v_{x,j}$ ,  $v_{y,j}$  ir  $v_{z,j}$ . Tuomet erdveje atidėję visus vienos dalelės greičio vektorius kvazistatinės pusiausvyros būvio metu, gausime vektorių lauką, tam tikru būdu atspindintį konkrečios dalelės fazinę erdvę (17 pav.).

17 pav. pavaizduoti vienos dalelės greičio vektoriai teikia mažai naudos, nes visi jie yra Euklidinėje erdveje  $\mathbb{R}^3$ . Šiuos greičio vektorius išreiškus 14 pav. parodytais fazinės trajektorijos elgsenos kintamaisiais  $\alpha_j$  ir  $\gamma_j$ , esančiais polinėje koordinatinių sistemoje, būtų galima nustatyti fazinės erdvės trajektorijos pobūdį, t. y. globalią bifurkaciją, padėsiančią įvertinti kiekvienos mikrobūsenos pasireiškimo tikimybę dalelių mišinyje. Nustatytoji tikimybė leistų charakterizuoti ir viso dalelių mišinio makrobūseną, nes labiausiai tikėtina yra toji makrobūseną, kurios mikrobūsenų skaičius yra didžiausias.

Geometrinės charakteristikos, leidžiančios dalelės greičio vektorius atvaizduoti polinėje koordinatinių sistemoje, yra  $i$ -tosios dalelės  $j$ -ojo greičio vektoriaus

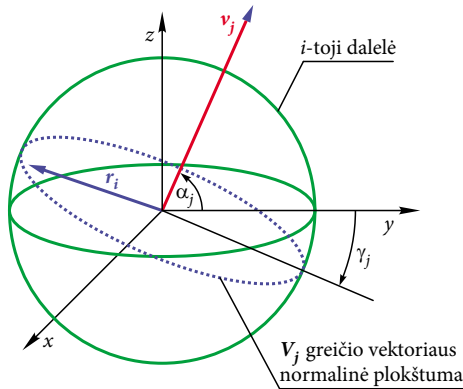


**17 pav.**  $i$ -tosios dalelės greičio vektoriaus kryptys erdveje esant kvazistatiniam pusiausvyros būviui

**Fig. 17.** Directions of the velocity vector of the  $i$ th particle in the quasistatic equilibrium state

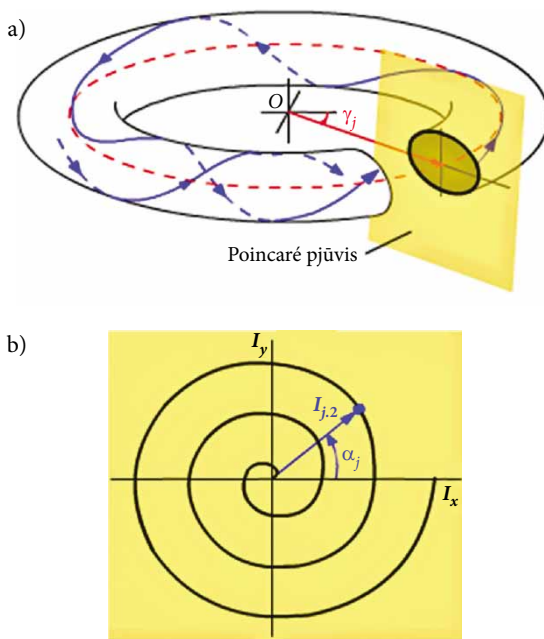
kampas su horizontu ir normalinės plokštumos posūčio horizonto atžvilgiu kampas (18 pav.). Šie kampai sutapatinami su fazinės trajektorijos elgsenos kintamaisiais  $\alpha_j$  ir  $\gamma_j$ .

Disipatyvios dinaminės sistemos energijos toro skerspjūvis nebėra suskaidytas atskirais energijos lygmenimis (Gekle 2005), o atrodo kaip spiralė (19 pav., b).



18 pav.  $i$ -tosios dalelės  $v_j$  greičio vektoriaus 26 taškų normalinės plokštumos orientacija (čia  $r_j$  –  $i$ -tosios dalelės spindulio vektorius)

Fig. 18. Orientation of the 26 points normal plane of the velocity vector of the  $i^{\text{th}}$  particle  $v_j$  (here,  $r_j$  is the radius vector of the  $i^{\text{th}}$  particle)



19 pav.  $i$ -tosios dalelės energijos toro skerspjūvio vizualizacija: a – Poincaré pjūvis; b – disipatyvios sistemos energijos toro skerspjūvis elgsenos kintamųjų koordinatėse, apibūdinamas vektoriumi  $I_{j,2}$  ir kampu  $\alpha_j$

Fig. 19. Visualization of the section of the energy torus of the  $i^{\text{th}}$  particle: a – Poincaré section; b – the section of the energy torus of the dissipative system is defined using vector  $I_{j,2}$  and angle  $\alpha_j$

Tai patvirtina 16 pav., a, pateiktos apskaičiuotos dalelės fazinės trajektorijos.

Siekiant gauti 19 pav., b, parodytą toro skerspjūvį charakterizuojančių dydžių  $I_{j,2}$  ir  $\alpha_j$  ryšį, šis skerspjūvis aproksimuojamas Archimedo spirale:

$$I_{j,2} = m \cdot \alpha_j, \text{ kai } \alpha_j > 0, \quad (6)$$

čia  $m$  išreiškia atstumą tarp spiralės apsisukimų. Kadangi būsenai charakterizuoti pakanka žinoti tik kokybinius fazinės trajektorijos elgsenos dėsningumus, tad tikrasis  $m$  dydis nėra svarbus.

Elgsenos kintamieji  $\alpha_j$  ir  $\gamma_j$  parametriniame paviršiuje  $H = H(\alpha, \gamma)$  (20 pav., a) yra laiko funkcijos, t. y.  $\alpha = \alpha(t)$ ,  $\gamma = \gamma(t)$ . Tuomet  $h(t) = h(\alpha(t), \gamma(t))$  yra parametrinė kreivė paviršiuje  $H = H(\alpha, \gamma)$ .

Paviršiuje  $H = H(\alpha, \gamma)$  laisvai pasirinktame taške  $P$  išvedama tangentinė plokštuma (20 pav., a). Šioje plokštumoje tangentinis vektorius  $\dot{h}(t)$  susideda iš dviejų komponentų  $h_\alpha$  ir  $h_\gamma$ .

Tangentinis vektorius kreivei ant paviršiaus (20 pav., b) gaunamas diferencijuojant  $h(t)$  laiko  $t$  atžvilgiu:

$$\dot{h}(t) = \frac{dh}{dt} = \frac{\partial h}{\partial \alpha} \cdot \frac{d\alpha}{dt} + \frac{\partial h}{\partial \gamma} \cdot \frac{d\gamma}{dt}. \quad (7)$$

Paviršiaus normalės vektorius  $n$ , statmenas tangentinei plokštumai, išreiškiamas šia formule:

$$n = \frac{h_\alpha \times h_\gamma}{|h_\alpha \times h_\gamma|}. \quad (8)$$

Pažymėtina, kad *įprastasis taškas*  $P$  ant parametrinio paviršiaus  $H = H(\alpha, \gamma)$  yra taškas, atitinkantis (9) sąlygą:

$$h_\alpha \times h_\gamma \neq 0. \quad (9)$$

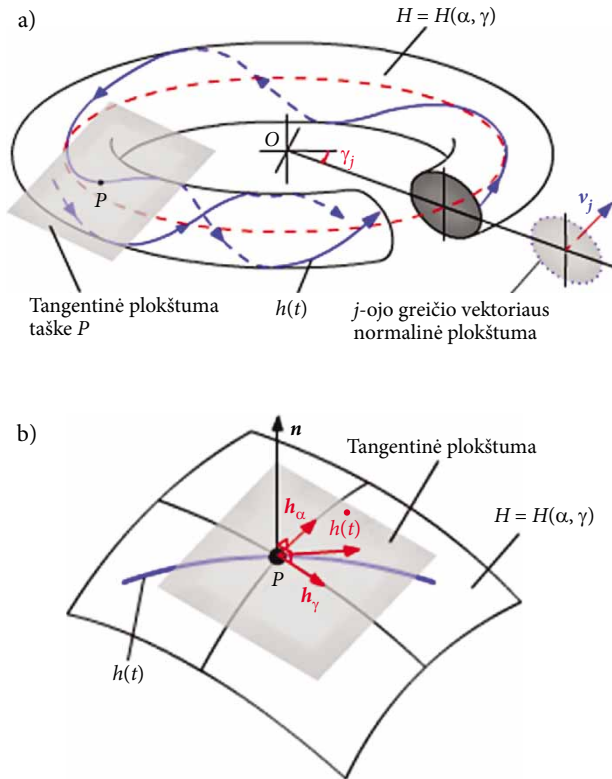
Sąlyga (9) reikalauja, kad taške  $P$  (20 pav.) vektoriai  $h_\alpha$  ir  $h_\gamma$  neišnyktų ir turėtų skirtingas kryptis, t. y. kad būtų tiesiškai nepriklausomi. Jei (9) sąlyga netenkinama, taškas  $P$  vadinamas *ypatinguoju*.

Galima perrašyti (6) išraišką, dydį  $m$  pakeičiant normalinio vektoriaus (8) moduliu  $|n|$ , gaunant priklausomybę:

$$|I_{j,2}| = |n| \times \alpha_j, \text{ čia } |n| = 1. \quad (10)$$

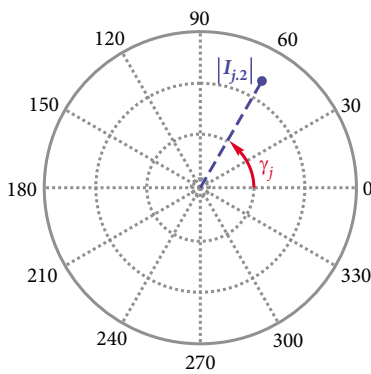
Polinėje koordinatinių sistemoje (21 pav.) atvaizdavę visus modeliuojant DEM kvazistatinio pusiausvyros būvio mišinys gautus  $i$ -tosios dalelės greičio vektorius atitinkančius dydžius  $|I_{j,2}|$  ir  $\gamma_j$ , sudarytume minėtosios dalelės fazinės erdvės globaliosios bifurkacijos plokštuminę diagramą (gaubtinę).

Pažymėtina, kad gautoji diagrama nėra tikroji, tai tik fazinių trajektorijų sankirta su plokštuma, tačiau to visiškai pakanka dalelės fazinių trajektorijų elgsenos



**20 pav.** Fazinė trajektorija  $h(t) = h(\alpha(t), \gamma(t))$  parametriniame paviršiuje  $H = H(\alpha, \gamma)$  (energijos toras): a – tangentinė plokštuma toro paviršiaus taške P; b – fazinės trajektorijos  $h(t)$  tangentinis vektorius  $\dot{h}(t)$  ir normalinis vektorius  $n$  toro paviršiaus taške P

**Fig. 20.** Phase trajectory  $h(t) = h(\alpha(t), \gamma(t))$  on parametric surface  $H = H(\alpha, \gamma)$  (energy torus): a – tangent plane at torus surface point P; b – tangent vector  $\dot{h}(t)$  and normal vector  $n$  of phase trajectory  $h(t)$  at point P



**21 pav.** Kintamieji  $|I_{j,2}|$  ir  $\gamma_j$  polinėje koordinatinių sistemoje  
**Fig. 21.** Variables  $|I_{j,2}|$  and  $\gamma_j$  in the polar coordinate system

dėsningumams nustatyti. Diagramoje atsispindėtų ne tik mikrobūsenų pasirodymo statistika, bet ir informacija, susijusi su dalelės stabilumu.

Fazinės trajektorijos gaubtinės formavimosi esminiems principams paaiškinti naudojamosi 22 pav., kuriame parodytas disipatyvios dinaminės sistemos

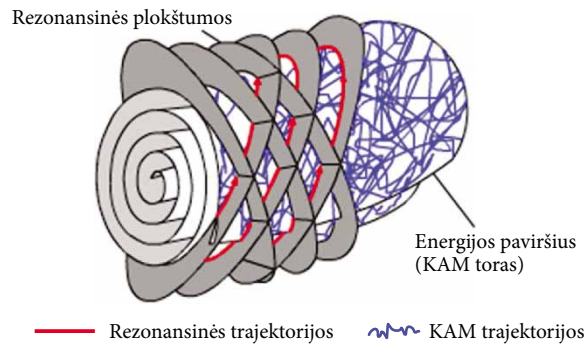
energijos toro paviršiaus fragmentas, kertamas trikdžių sudaromų rezonansinių plokštumų (Gekle 2005).

22 pav. parodytos KAM trajektorijos sudaromos *įprastųjų* fazinių taškų, t. y. taškų, kuriuose vektoriai  $h_\alpha$  ir  $h_\gamma$  (20 pav., b) yra tiesiškai nepriklausomi. Rezonansinių plokštumų kraštais eina kitokios trajektorijos, charakterizuojamos *ypatingaisiais* faziniais taškais, neatitinkančiais (9) sąlygos.

Jeigu polinėje koordinatinių sistemoje atidėsime elgsenos kintamuosius  $|I_{j,2}|$  ir  $\gamma_j$ , dydis  $|I_{j,2}|$ , aprašomas (10) formule, sudarys fazinės trajektorijos „filtrą“ (23 pav.).

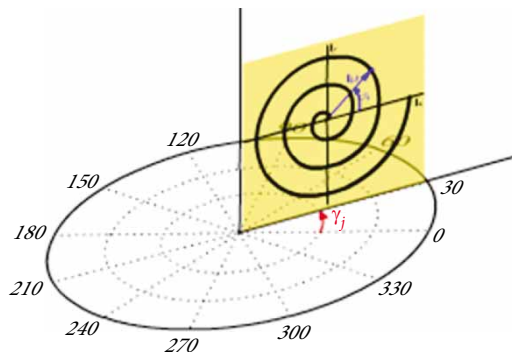
Kai bus netenkinama (9) sąlyga ir vektoriai  $h_\alpha$  bei  $h_\gamma$  taps tiesiškai priklausomi, polinėje koordinatinių sistemoje bus formuojamas *Archimedo spiralės* vaizdas, nes šiuo atveju fazinės trajektorijos polinės diagramos plokštumos nekerta, o priklauso jai.

Aprašyto mikrolygmens struktūros charakterizavimo metodo taikymas ir gautųjų rezultatų analizė pateikiami antrojoje straipsnio dalyje.



**22 pav.** Fazinės trajektorijos energijos toro, kertamo rezonansinių plokštumų, paviršiuje (fragmentas)

**Fig. 22.** Phase trajectories on the surface of energy torus crossed by resonant planes (fragment)



**23 pav.** Fazinės erdvės globaliosios bifurkacijos plokštuminės diagramos formavimo principas

**Fig. 23.** The principle of forming a planar diagram of the global bifurcation of phase space

## 5. Išvados

Šioje pirmojoje straipsnio dalyje pateiktas viendispersio ir daugiadispersio dalelių mišinio elgsenos skaitinio modeliavimo rezultatų apibendrinimas. Elgsena tirta mišinio kvazistatinio pusiausvyros būvio ribose. Aptarta modeliavimo metodika ir pagrįstas gautųjų rezultatų korektiškumas, remiantis kontroliuojamaisiais mechaniniais būvio parametrais. Gauta dalelių mišinių svorio jėgos pusiausvyra su skaičiuojamosios erdvės pagrindu patvirtino, kad pasiektas mišinio makrobūsenos kvazistatinis pusiausvyros būvis. Rezultatai yra pakankamo tikslumo.

Pagrindinis dėmesys straipsnyje skirtas mišinio mikro- ir makrostruktūros charakterizavimui, todėl pasirinkti trys struktūros charakterizavimo makrolygmeniu rodikliai: dalelių kontaktinės jėgos, mišinio užimama tūrio dalis (tankumas) ir koordinacijos skaičius. Atlikta šių dydžių analizė trimis mišiniais. Lyginant viendispersio ir daugiadispersio mišinio dalelių užimamos tūrio dalies (tankumo) kitimą laike, pastebėtas lėtesnis tankumo augimas daugiadispersiuose mišiniuose, neatsižvelgiant į trintį. Tai paaiškinama padidėjusių kontaktinių jėgų zonų, „užblokuojančių“ mažesnes daleles, atsiradimu daugiadispersiuose mišiniuose.

Minėtųjų zonų atsiradimas paskatino mišinius tirti mikrolygiu. Pažymėtina, kad daugiadispersių dalelių mišinių mikrobūsenų tyrimas yra svarbus klausimas betono gamyboje, nes dalelių pasiskirstymas cemento tešloje turi tiesioginį ryšį su ilgalaikėmis konstrukcijų deformacijomis.

Dalelių mišinių mikrobūsenų charakterizavimo metodui sudaryti pasitelkti Hamiltono mechanikos principai. Taria, kad suvaržytame ir riboto dydžio trikdžių veikiamame mišinyje kiekvienos dalelės elgsena (mikrobūsenos), esant kvazistatiniam pusiausvyros būviui, apibūdinama kaip trajektorija fazinėje erdvėje, dengianti tam tikrą energijos paviršių (torą), kurio forma priklauso nuo dalelės mechaninio laisvės laipsnio. Aprašyto metodo praktinei realizacijai sukurtas kompiuterinis algoritmas, kuriame iš modeliuojant DEM gautų duomenų formuojama kiekvienos dalelės fazinės trajektorijos gaubtinė. Ši gaubtinė parodo fazinės erdvės globaliosios bifurkacijos dėsninumus ir naudotina mikrobūsenų pasireiškimo statistiniam įvertinimui bei atskiros mišinio dalelės stabilumui charakterizuoti.

Antrojoje straipsnio dalyje bus pateiktas šioje dalyje aprašyto mikrolygmens struktūros charakterizavimo metodo taikymas ir gautųjų rezultatų analizė.

## Literatūra

- Abellanas, M.; Hernandez, G.; Klein, R.; Neumann-Lara, V.; Urrutia, J. 1995. Voronoi diagrams and containment of families of convex sets on the plane, in *Proc. 11th Annu ACM Sympos. Comput. Geom.*, 71–78.
- Aste, T.; Weaire, D. 2000. *The Pursuit of Perfect Packing*. Institute of Physics Publishing, Bristol.  
<http://dx.doi.org/10.1887/0750306483>
- 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. <http://dx.doi.org/10.1080/13923730.2004.9636280>
- Balevičius, R.; Kačianauskas, R.; Džiugys, A.; Maknickas, A.; Vislavičius, K. 2006. Investigation of performance of programming approaches and languages used for numerical simulation of granular material by the discrete element method, *Computer Physics Communications* 175(6): 404. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2006.05.006>
- Balevičius, R.; Kačianauskas, R.; Mroz, Z.; Sielamowicz, I. 2011. Analysis and DEM simulation of granular material flow patterns in hopper models of different shapes, *Advanced Powder Technology* 22: 235.
- Bernal, J. D.; Mason, J. 1960. Packing of spheres: co-ordination of randomly packed spheres, *Nature* 188: 910. <http://dx.doi.org/10.1038/188910a0>
- Broer, H. W. 2004. KAM theory: the legacy of Kolmogorov's 1954 paper, *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* 41(4): 507–521.
- Cundall, P. A.; Strack, O. D. L. 1979. A Discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique* 29: 47. <http://dx.doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>
- 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. <http://dx.doi.org/10.1007/PL00010918>
- Edwards, S. F.; Oakeshott, R. B. S. 1989. Theory of powders, *Physica* 157: 1080–1090. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V. [http://dx.doi.org/10.1016/0378-4371\(89\)90034-4](http://dx.doi.org/10.1016/0378-4371(89)90034-4)
- Gekle, S. 2005. PhD: *Construction of Invariant Tori in Near-Integrable Hamiltonian systems with Three Degrees of Freedom*. Stuttgart. 83 p.
- Hilborn, C. R. 2008. *Chaos and Nonlinear Dynamics. An introduction for Scientists and Engineers*. Second edition. Oxford: Oxford University Press. 654 p.
- Yu, A. B.; Zou, R. P. 1998. Prediction of the porosity of particle mixtures: a review, *KONA Powder Part.* 16: 68.
- Lechenault, F.; da Cruz, F.; Dauchot, O.; Bertin, E. 2006. Free volume distributions and compactivity measurement in a bidimensional granular packing, *J. Stat. Mech.* P0700.
- Lichtenberg, A. J.; Leiberman, M. A. 1992. *Regular and Chaotic Dynamics*. Second edition. Applied Mathematical Sciences 38. New York: Springer-Verlag. 716 p.
- Mason, G. 1968. Radial distribution functions from small packings of spheres, *Nature* 217: 733. <http://dx.doi.org/10.1038/217733a0>
- Mindlin, R. D.; Deresiewicz, H. 1953. Elastic spheres in contact under varying oblique forces, *Journal of Applied Mechanics* 20: 327.
- Popov, V. L. 2010. *Contact Mechanics and Friction: Physical Principles and Applications*. Berlin: Springer-Verlag. 362 p. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-10803-7>
- Scott, G. D. 1962. Packing of spheres: packing of equal spheres, *Nature* 194: 956. <http://dx.doi.org/10.1038/194956a0>

## **SIMULATION OF POLY- AND MONODISPERSED GRANULAR MATERIAL. PART I: STRUCTURE CHARACTERISTICS**

**G. Pocius, R. Balevičius**

**Abstract.** The paper presents two part investigation into the behaviour of poly- and monodispersed granular material applying the discrete element method (DEM). Granular aggregates involve the compaction of spherical particles within the wall-bounded domain under gravity force and randomly induced small velocities of the grains.

Part I discusses the modelling technique and correctness of the obtained results and analyzes the characteristics of granular material structure after the compaction process relying on the coordination number, particle contacting forces and volume fraction distribution. Referring to the stressed arches, the locked clusters of granular material containing small particles were detected. For the purpose of providing the characterization of micro and macrostates of these clusters, Hamiltonian mechanics was introduced.

**Keywords:** discrete element method, polydispersed, monodispersed granular material, microstructure, quasistatic state, Hamiltonian mechanics, phase space.

**Gvidas POCIUS.** BSc (CE) at the Department of Reinforced Concrete and Masonry Structures, Vilnius Gediminas Technical University, Lithuania. Research interests: influence of concrete composition on the mechanical behaviour of structures, computer-aided modelling of structures.

**Robertas BALEVIČIUS.** MSc (CE), PhD at the Department of Reinforced Concrete and Masonry Structures, Vilnius Gediminas Technical University, Lithuania. Research interests: mechanics of time-dependent materials, finite and discrete element methods.