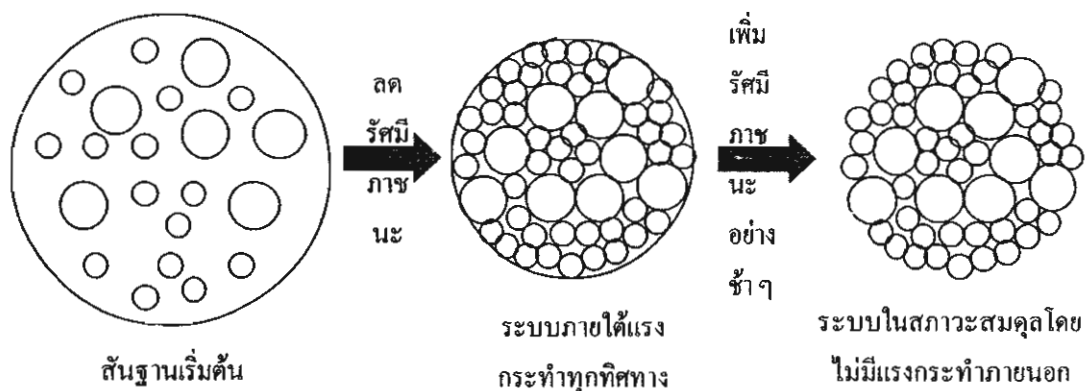


มีแรงกระทำภายนอกต่ออนุภาคเหล่านั้น ในทิศทางทำให้อนุภาคเคลื่อนที่เข้าหากัน ดังนั้นจึงเป็นที่มาของขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างของระบบวัสดุเมค โดยจะมีขั้นตอนย่อย 3 ขั้นตอน (1. อนุภาคอยู่ในภาชนะภายใต้แรงกดทุกทิศทาง 2. นำเอาภาชนะออกช้า ๆ และ 3. รอให้ระบบเข้าสู่สภาวะสมดุลเอง) เพื่อให้ได้วัสดุเมคในสภาวะสมดุล โดยไม่มีแรงภายนอกมากระทำ

เพื่อให้ได้ตัวอย่างวัสดุเมคกลมที่อัดแน่นภายใต้แรงกดทุกทิศทาง เราสามารถใช้ 1 ใน 2 เทคนิคต่อไปนี้คือ 1. เริ่มต้นจากอนุภาคเล็ก ๆ วางตัวแบบกระจายสุ่มในพื้นที่ว่างในภาชนะปิดวงกลม และทำการขยายอนุภาคเหล่านั้น (เพิ่มรัศมี) จนกระทั่งพื้นที่ในภาชนะปิดกลมนั้นถูกแทนที่หมดด้วยอนุภาค และ 2. เริ่มต้นจากอนุภาคที่มีขนาดคงที่และวางตัวแบบกระจายสุ่มเช่นกันในพื้นที่ว่างในภาชนะปิดวงกลม และทำการลดขนาดของภาชนะกลม จนกระทั่งพื้นที่ของภาชนะน้อยกว่าหรือเท่ากับพื้นที่ทั้งหมดของอนุภาคกลม ตัวอย่างวัสดุเมคทางตัวเลขในงานวิจัยนี้ได้ถูกเตรียมด้วยทั้งสองวิธีข้างต้น แต่ในที่นี้จะขออธิบายโดยละเอียดสำหรับวิธีที่สอง เนื่องจากการเตรียมตัวอย่างด้วยวิธีการขยายขนาดอนุภาคจนได้ขนาดสุดท้ายของอนุภาคเท่ากันในวิธีแรกนั้น ได้ทำการศึกษาและวิเคราะห์แล้ว[1] อีกทั้งจากการวิเคราะห์เปรียบเทียบผลการทดสอบจากการเตรียมการทั้งสองวิธีได้ผลเหมือนกัน

ตัวอย่างทางตัวเลขนี้เป็นตัวอย่าง 2 มิติที่ประกอบด้วยอนุภาคกลม (ทรงกระบอก หรือจาน) 8000 อนุภาค ในส่วนของขนาดของอนุภาคนั้น ได้ทำการแบ่งออกเป็นสองระบบคือ ระบบที่มีอนุภาคขนาดเดียว รัศมี 3 มม. เท่ากันหมด และระบบที่ขนาดของอนุภาคกระจายอยู่ระหว่าง 2 – 4 มม. การกระทำเช่นนี้ก็เพื่อศึกษาผลของการกระจายตัวของขนาด (Polydisperse) ที่มีต่อการก่อตัวของกลุ่มอนุภาค และการจัดวางเรียงตัวในวัสดุเมค จุดศูนย์กลางของอนุภาคทั้ง 8000 อนุภาคถูกวางเริ่มต้นโดยไม่เกิดการสัมผัสกัน และด้วยโครงข่ายสามเหลี่ยมภายในภาชนะปิดวงกลม ซึ่งเป็นวิธีการที่ง่ายที่สุดเพื่อให้ได้พื้นฐานของระบบที่ไม่เกิดการสัมผัสกันระหว่างอนุภาค หลังจากนั้นอนุภาคทั้งหมดจะเริ่มถึงอัดตัวทุกทิศทาง โดยการลดขนาด (รัศมี) ของภาชนะกลมอย่างช้า ๆ จนกระทั่งพื้นที่รวมของภาชนะกลมมีค่าประมาณ หรือเท่ากับพื้นที่ทั้งหมดของอนุภาครวมกัน รัศมีของภาชนะลดลงด้วยอัตราเร็ว 0.425 เมตร/วินาที แล้วปล่อยให้อนุภาคจัดเรียงตัวจนกระทั่งได้ระบบวัสดุเมคที่สมดุลภายใต้แรงกดทุกทิศทาง เพื่อให้ได้วัสดุเมคในสภาวะสมดุลทางสถิติศาสตร์ที่ปราศจากแรงภายนอกมากระทำ โดยการขยาย (เพิ่มรัศมี) ภาชนะกลมออกอย่างช้า ๆ ด้วยอัตราเร็วในการขยายตัว 0.1375 เมตร/วินาที และรอการคำนวณจนกระทั่งระบบเข้าสู่สมดุลทางสถิติศาสตร์ การตรวจสอบว่าระบบที่ไม่มีแรงภายนอกมากระทำอยู่ในสมดุลทางสถิติศาสตร์แล้วหรือยังนั้น ดูได้จากค่าการเปลี่ยนแปลงการจัดและความเร็วสูงสุดของแต่ละอนุภาค ซึ่งค่าความแตกต่างทั้งสองนี้อยู่ในระดับต่ำกว่า 10^{-7} เมตร และ 10^{-6} เมตร/วินาที ตามลำดับ ขั้นตอนของการเตรียมระบบวัสดุเมคในสภาวะไร้แรงภายนอกกระทำได้ถูกแสดงไว้ในรูป 3.1



รูปที่ 3.1 แผนผังการเตรียมตัวอย่างของวัสดุเม็ดในสภาวะสมดุลทางสถิติศาสตร์โดยไม่มีแรงภายนอกกระทำมากระทำ

3.3 เงื่อนไขขอบและตัวแปร

ในแต่ละขั้นตอนของการเตรียมตัวอย่างของการทดสอบ เราจะกระทำด้วยความระมัดระวังเพื่อให้ได้ตัวอย่างวัสดุเม็ดทางตัวเลขที่ใกล้เคียงกับความเป็นจริงมากที่สุด ตัวแปรและเงื่อนไขขอบจึงถูกเลือกอย่างเหมาะสม และเป็นไปตามคำแนะนำที่ได้กล่าวไว้โดยละเอียดในบทที่ 2 ในการทดสอบแบบจำลองทางตัวเลขนี้ เป็นไปเพื่อศึกษาอิทธิพลของแรงแอคเซชันระหว่างผิวสัมผัส ดังนั้นตัวแปรทางกายภาพ หรือคุณสมบัติของวัสดุ อาทิเช่น ค่า n ของสปริง หรือค่าความแข็งของผิวอนุภาค k และ ค่าสัมประสิทธิ์ของความหนืด α จะถูกเลือกในลักษณะที่ทำให้การคำนวณทางตัวเลขเกิดขึ้นได้ (เมื่ออนุภาคกระทบกัน ระยะเลื่อมต้องมีค่าน้อย ๆ เพื่อให้สมมุติฐานที่ว่าอนุภาคยังคงมีรูปร่างกลมอยู่ทั้งในขณะเกิดการสัมผัส และสิ้นสุดการสัมผัส) และกำหนดให้เป็นค่าคงที่ ซึ่งคุณสมบัติของวัสดุทั้งสองเป็นพื้นฐานสำคัญของวัสดุเม็ดแห้ง จึงเหมาะสมที่จะนำไปใช้ในการเปรียบเทียบกับกรณีของวัสดุเม็ดที่คำนึงถึงแรงแอคเซชัน ค่า k ถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับ $8 \cdot 10^6 \text{ N/m}$ และ $\alpha = 45 \text{ kg/s}$ ซึ่งค่าคงที่ทั้งสองนี้จะทำให้ได้เวลาของการเกิดการสัมผัส (อนุภาคเมื่อกระทบกันแล้วแยกออกจากกัน โดยไม่เกิดการกลืนกินกัน) ประมาณ 10^{-4} s และระยะเลื่อมสูงสุดไม่เกิดขนาด 10^{-6} เมตร (สมการ 2.11) ส่วนค่าพลังงานแอคเซชัน γ จะเปลี่ยนแปลงไปในแต่ละครั้งของการคำนวณทางตัวเลข

ค่าพลังงานแอคเซชัน ณ ผิวสัมผัสจะถูกเลือกมาศึกษาทั้งหมด 9 ค่า คือ $\gamma = 0, k/250, k/200, k/150, k/50, k/20, k/10, k/7$ และ $k/3.5$ ซึ่งค่าพลังงานผิวสัมผัสนี้จะทำให้เกิดระยะเลื่อมมากที่สุดไม่เกิน 5% ของรัศมีเฉลี่ยของอนุภาคในระบบ (เราไม่สามารถจะเพิ่มค่า $\gamma > k/3.5$ เนื่องจากระยะเลื่อมจะมีค่ามากเกินไป และเมื่ออนุภาคเข้ามากระทบกัน อนุภาคหนึ่งจะกลืนกินอีกอนุภาคหนึ่ง) ส่วนเวลาของการเกิดการสัมผัสนั้น ในกรณีของวัสดุเม็ดแบบโคเฮซีฟจะมีระยะเวลาของการสัมผัสนานกว่าในวัสดุเม็ดแห้ง เมื่อค่าความแข็ง k และ α มีค่าเท่ากัน (สมการ 2.8) อีกทั้งเรายังได้ทำการ

คำนวณทางตัวเลขของระบบวัสดุที่มีค่าสัมประสิทธิ์ของความเสียดทานระหว่างอนุภาคต่างกัน 3 ค่า คือ $\mu = 0.2$, $\mu = 0.3$ และ $\mu = 0.5$

ดังที่กล่าวไว้แล้วในบทที่ 2 เกี่ยวกับช่วงเวลาของการคำนวณ Δt (Time Step) จะต้องมิต่ำน้อยกว่าช่วงเวลาของการเกิดการสัมผัส t_c เพื่อให้สามารถศึกษารายละเอียดของการเกิดการสัมผัส และวัสดุเม็ดที่พิจารณาเข้าใกล้เงื่อนไขเสมือนสถิตยศาสตร์ จึงได้เลือกช่วงเวลาของการคำนวณมีค่าเท่ากับ $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$ s ซึ่งมีค่าเทียบเท่าประมาณ 1/70 ของเวลาของการเกิดการสัมผัสของอนุภาคหนึ่ง หรือเทียบเท่าประมาณ 1/120 ของ t_c ในกรณีที่ค่าแอดเฮชันสูงสุด

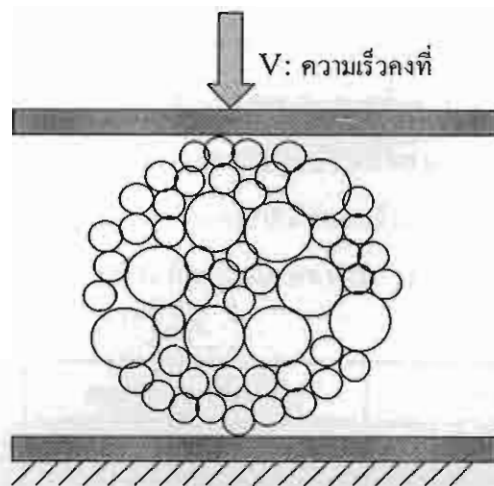
เงื่อนไขของการคำนวณทางตัวเลขของระบบวัสดุเม็ดทั้งหมดนี้ ในแต่ละขั้นตอนค่าพลังงานแอดเฮชันจะแสดงผลตั้งแต่เริ่มต้นการคำนวณ แรงแอดเฮชันระหว่างอนุภาคกับภาชนะกลมถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับศูนย์ ผิวภาชนะกลมถือว่ามีความหยาบและมีความสัมประสิทธิ์ของความเสียดทานเท่ากับผิวสัมผัสระหว่างอนุภาค แบบจำลองแรงแอดเฮชันเป็นแบบย้อนกลับได้ (Reversible) กล่าวคือเมื่ออนุภาคแยกออกจากกันแล้ว หลังจากนั้นกลับเข้ามาสัมผัสกันใหม่ แรงแอดเฮชันก็ยังคงปรากฏเกิดขึ้น และมีค่าเป็นไปตามสมการ 2.3 และ 2.4 สำหรับแรงวิกฤติที่ใช้ในการแยกอนุภาคที่สัมผัสกันออกจากกัน

3.4 การทดสอบแบบ “บราซิลเลียน” (Brazilian Test)

การทดสอบแบบบราซิลเลียนเป็นทดสอบความสามารถรับแรงดึงมหาศาลทางอ้อมของวัสดุที่รับแรงกดได้ดี อาทิเช่น ดินแบบโคเฮซีฟ คอนกรีต และผลิตภัณฑ์ทางการเกษตรและเภสัชกรรม การทดสอบนี้กระทำโดยนำตัวอย่างในสภาวะสมดุลทางสถิตยศาสตร์ที่ไม่มีแรงภายนอกมากระทำวางระหว่างแผ่นสี่เหลี่ยมแข็งเกร็ง ดังแสดงไว้ในรูปที่ 2.2 แผ่นสี่เหลี่ยมด้านบนถูกกำหนดให้ความเร็วของการขจัดคงที่ 2 มม./วินาที ในทิศทางกดลงมาในแนวดิ่ง (-y) ซึ่งเทียบเท่ากับอัตราการเสียรูปประมาณ 6.92 s^{-1} ส่วนแผ่นสี่เหลี่ยมแข็งเกร็งด้านล่างถูกล็อกการขจัดไว้ไม่ให้มีการเคลื่อนที่ คุณสมบัติของวัสดุต่าง ๆ ของแผ่นสี่เหลี่ยมแข็งเกร็งทั้งสองแผ่น ไม่ว่าจะเป็นค่า k , α และ μ ล้วนมีค่าเดียวกันระหว่างอนุภาคที่ใช้ในการเตรียมตัวอย่างในสภาวะสมดุลทางสถิตยศาสตร์ ยกเว้นค่าพลังงานแอดเฮชัน γ ระหว่างอนุภาค-แผ่นสี่เหลี่ยมเกร็งมีค่าเท่ากับศูนย์ ช่วงเวลาของการคำนวณที่ใช้ช่วงเวลาเดิมคือ $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$ s การคำนวณทางคอมพิวเตอร์ของแต่ละระบบหรือแต่ละค่าของพลังงานแอดเฮชัน γ จะสิ้นสุดลงเมื่อการเสียรูป หรือค่าความเค้นมหาศาลมีค่าประมาณ 20% ในทิศทางแนวดิ่ง ผลจากการคำนวณในแต่ละช่วงเวลาจะถูกเก็บไว้ให้มีจำนวนมากพอที่จะนำมาใช้ในการศึกษา และวิเคราะห์การแตกหัก และการแพร่กระจายของรอยแตกของวัสดุเม็ด

การทดสอบบราซิลเลียนนี้เป็นที่ยุ่ยากที่จะทดสอบความแข็งแรงทางด้านดึงของวัสดุ ที่มีแรงแอดเฮชันระหว่างอนุภาคน้อย ๆ ($\gamma < k/50$) ดังนั้นการทดสอบนี้จะกระทำและผลลัพธ์ของการ

จำนวนจะถูกแสดงเฉพาะตัวอย่างทางตัวเลขที่มีแอดเฮชันระหว่างอนุภาค $\gamma > k/50$ และที่เช่นเดียวกันแอดเฮชันที่พิจารณาในการทดสอบนี้จะยังคงเป็นแบบย้อนกลับได้



รูปที่ 3.2 แผนผังการทดสอบบราซิลเลียน

3.4 ผลการคำนวณและวิเคราะห์

ถึงแม้ว่าในการศึกษานี้จะศึกษาถึงผลของพลังงานแอดเฮชันระหว่างผิวสัมผัส γ ในแต่ละการคำนวณ แต่ผลการคำนวณและการวิเคราะห์ส่วนใหญ่จะถูกแสดงในรูปความสัมพันธ์ของค่า γ/k (ค่าพลังงานแอดเฮชันต่อค่าความแข็งของผิวสัมผัส ซึ่งจะไม่มีหน่วย) และการวิเคราะห์จะแยกวิเคราะห์ระบบวัสดุเม็ดในสถานะสมดุลทางสถิติศาสตร์ที่ไว้แรงภายนอกมากระทำ และวัสดุเม็ดจากการทดสอบด้วย Brazilian Test

3.4.1 คุณสมบัติของสถานะสมดุลทางสถิติศาสตร์

ในหัวข้อนี้ เป็นการศึกษาคุณลักษณะเริ่มต้นของวัสดุเม็ดทั้งที่คิดแรงแอดเฮชันด้วยค่าที่แตกต่างกัน และวัสดุเม็ดทั้งก่อนการทดสอบด้วย Brazilian Test สถานะสมดุลทางสถิติศาสตร์ที่ไม่มีแรงภายนอกมากระทำของระบบวัสดุเม็ด จะถูกตรวจสอบจากการคำนวณด้วยค่าความดันเฉลี่ยโดยรวมของวัสดุเม็ด ความเร็ว และการจัดของแต่ละอนุภาค ซึ่งความดันเฉลี่ยจากภายนอกมีค่าเข้าใกล้ศูนย์มาก ๆ (น้อยกว่า 10^9 N) และการจัดและความเร็วที่เปลี่ยนแปลงของแต่ละอนุภาคมีค่าน้อยกว่า 10^{-6} m และ 10^{-6} m/s ตามลำดับ

จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาค (Coordination Number)

ในสถานะสมดุลพบว่า จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาคมีค่าน้อยกว่า 4 สำหรับค่าพลังงานแอดเฮชันต่ำ ๆ ($\gamma < k/50$) ซึ่งเหมือนกับที่พบในวัสดุเม็ดแห้ง[] และจะมีค่ามากกว่า 4 สำหรับค่า

แอดเซชันสูง ๆ (ดูตาราง 3.1) ซึ่งไม่พบความแตกต่างทั้งในระบบที่อนุภาคมีขนาดเดียว และมีรัศมีต่างกัน (รัศมีต่างกันสูงสุด 2 เท่า) แต่สำหรับระบบที่อนุภาคมีขนาดเท่ากันและค่าแอดเซชันสูง ๆ นั้นจะมีจำนวนการสัมผัสเฉลี่ยที่หนาแน่นกว่า ($z > 5$) แต่ z ไม่ถึง 5 สำหรับระบบของรัศมีอนุภาคแตกต่าง ในทางกลับสำหรับค่าแอดเซชัน γ ต่ำกว่า $k/50$ ระบบที่มีรัศมีของอนุภาคต่างกันนั้นยิ่งค่าพลังงานแอดเซชันยิ่งต่ำ จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาคยิ่งต่ำลงไปด้วย ซึ่ง z จะอยู่ระหว่างค่า 3.2 ถึง 3.7 สำหรับระบบเนื้อเดียวในเชิงขนาดของอนุภาค ผลของความแตกต่างของรัศมีของอนุภาคในวัสดุมีส่วนทำให้ค่าเฉลี่ยของการสัมผัสต่ออนุภาคมีช่วงกว้างขึ้น แต่ทำให้ z มีค่าต่ำลงและมีค่าไม่ถึง 5 จากการสังเกตยังพบอีกว่าค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทาน μ ทั้งสามค่า แทบจะไม่มีผลต่อค่าเฉลี่ยของการสัมผัสเลย

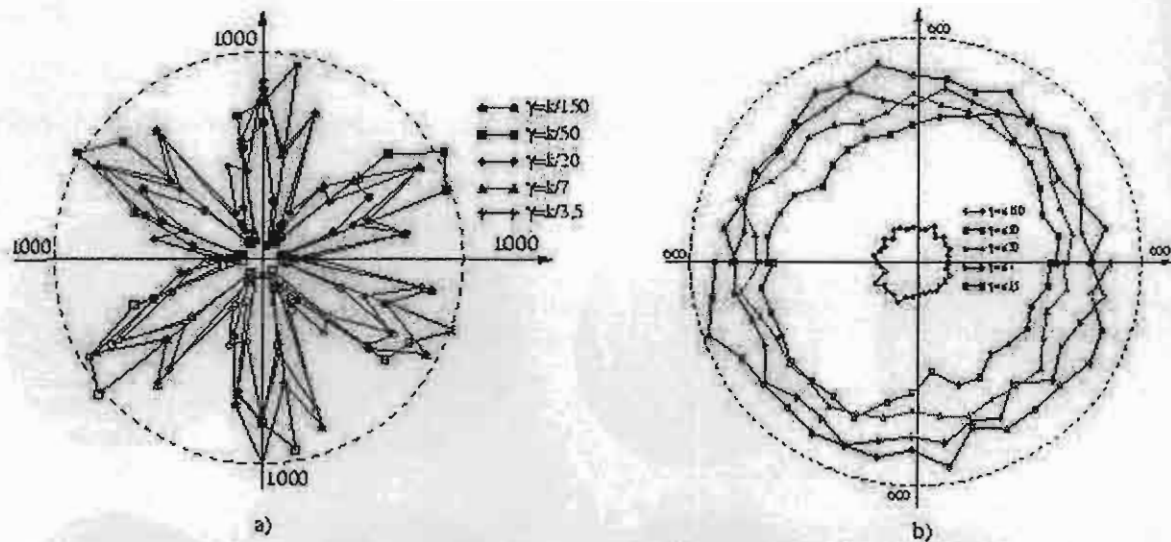
γ	อนุภาคขนาดเท่ากัน		อนุภาครัศมีต่างกัน	
	$\mu = 0.2$	$\mu = 0.5$	$\mu = 0.2$	$\mu = 0.5$
	z	z	z	z
0	0	0	0	0
$k/200$	3.352	3.304	0.385	0.758
$k/150$	3.660	3.583	0.860	0.721
$k/50$	4.465	4.386	3.457	3.470
$k/20$	5.026	4.846	3.864	3.882
$k/10$	5.104	5.074	4.128	4.138
$k/7$	5.204	5.190	4.284	4.281
$k/3.5$	5.316	5.349	4.635	4.653

ตาราง 3.1 จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาค z ของวัสดุในสภาวะสมดุลทางสถิติศาสตร์ที่ไม่มีแรงกระทำภายนอก สำหรับทั้งสองระบบ

ทิศทางการสัมผัส (Contact Directions)

ทิศทางการสัมผัสจะถูกแสดงด้วยแผนผังเชิงมุมของโอกาสที่จะพบการสัมผัส (จำนวนการสัมผัส) ในทิศทางที่กำหนด $N_p(\theta)$ ในฟังก์ชันของพลังงานแอดเซชัน γ สำหรับทั้งระบบอนุภาครัศมีเดียวและหลากหลาย ดังในรูป 3.3 (สัมประสิทธิ์ของความเสียดทานส่งผลต่อทิศทางการสัมผัสน้อยมาก) แต่เนื่องจากจำนวนการสัมผัสของวัสดุที่มีพลังงานแอดเซชันระหว่างผิวสัมผัสน้อย ๆ นั้นมีจำนวนน้อยมาก ดังนั้นแผนผังจะแสดงเฉพาะระบบที่มีค่า γ มากกว่า $k/50$ เราสามารถแยกความแตกต่างระหว่างการสัมผัสกด กล่าวคือการสัมผัสที่แรงดล (Repulsive) แสดงผลหลัก นั่นคือ $N > 0$ หรือ $N^+ > N^-$ และการสัมผัสดึง ซึ่งแรงในส่วนการดึงดูดอนุภาค (Attraction) เป็นตัวแสดงผลบน

ผิวสัมผัสนั้น ($N < 0$ หรือ $N' < N$) การสัมผัสจะถูกแสดงในส่วนบนของแผนผัง $[0, \pi]$ ในขณะที่การสัมผัสแบบดิ่งจะถูกแสดงในส่วนล่างของแผนผัง $[0, -\pi]$



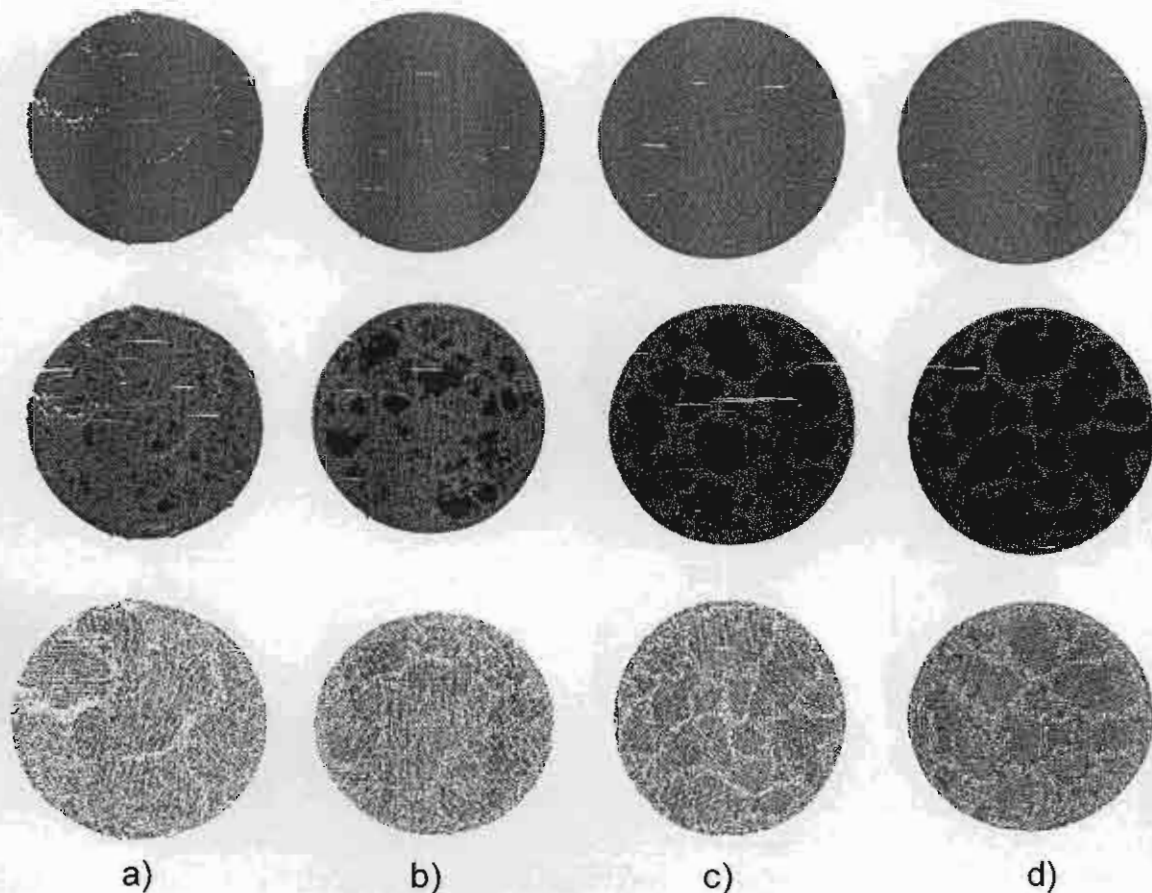
รูปที่ 3.3 แผนผังเชิงขั้วของจำนวนการสัมผัส $N_p(\theta)$ ในฟังก์ชันของทิศทางที่กำหนด θ สำหรับค่าต่าง ๆ ของ $\gamma(a)$ สำหรับวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีขนาดเท่ากัน (b) สำหรับวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีรัศมีต่างกัน 2 เท่า การสัมผัสจะถูกแสดงส่วนบนและส่วนล่างสำหรับการสัมผัสดิ่ง

เราสังเกตได้ว่าการสัมผัสในวัสดุเม็ดจะกระจายตัวในรูปแบบที่ค่อนข้างไม่ขึ้นกับทิศทาง (Quasi-Isotropy) หรือไม่มีทิศทางเฉพาะ สำหรับระบบที่อนุภาคมีรัศมีหลากหลาย ดังที่พบในวัสดุเม็ดแห้งทั่วไป หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งก็คือ ค่า Eigen-Value ของเทนเซอร์ของโครงสร้าง (F_1 และ F_2) มีค่าเท่ากัน ($a = 0$) แต่ในทางกลับกันสำหรับระบบที่อนุภาคมีขนาดเดียวกัน โครงสร้างโดยรวมจะมีสามทิศทางหลักสำหรับการสัมผัสทั้งแบบกดและดิ่ง

การเกิดกลุ่มอนุภาค (Agglomerates or Grains)

การเกิดกลุ่มอนุภาค (Agglomerate Grains) นี้ เราสามารถศึกษาได้จากภาพรูปพรรณสัณฐานของวัสดุ ที่แสดงให้เห็นเฉพาะอนุภาค โครงข่ายของแรงดึงดูดระหว่างผิวสัมผัส และจำนวนการสัมผัสต่ออนุภาค สำหรับระบบวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีขนาดเท่ากันนั้น การเกิดกลุ่มอนุภาคจะเห็นได้อย่างชัดเจน โครงสร้างจะประกอบไปด้วยกลุ่มของอนุภาคเกาะกลุ่ม (Crystallization) ด้วย 3 ทิศทางหลักสำหรับการสัมผัสดังที่ได้แสดงไว้แล้วในรูปที่ 3.3 ซึ่งขนาดของกลุ่มอนุภาคจะใหญ่ขึ้นเมื่อค่าพลังงานแอดเฮชัน γ มีค่าเพิ่มมากขึ้น ดังรูปที่ 3.4 การก่อตัวของกลุ่มอนุภาคจะยังเห็นได้ชัดเจนขึ้นเมื่อดูจากภาพของโครงข่ายของแรงระหว่างการสัมผัส (ภาพกลาง) และจำนวนการสัมผัสของแต่ละอนุภาค (ภาพล่าง) ในกลุ่มของอนุภาคที่ก่อตัวขึ้นนี้จะสังเกตได้ว่า ผิวสัมผัสจะรับแรงลัพธ์ที่มีจำนวนมากขึ้นตามขนาดของกลุ่มอนุภาค จนกระทั่งมีปริมาณใกล้เคียงกับผิวสัมผัสกด

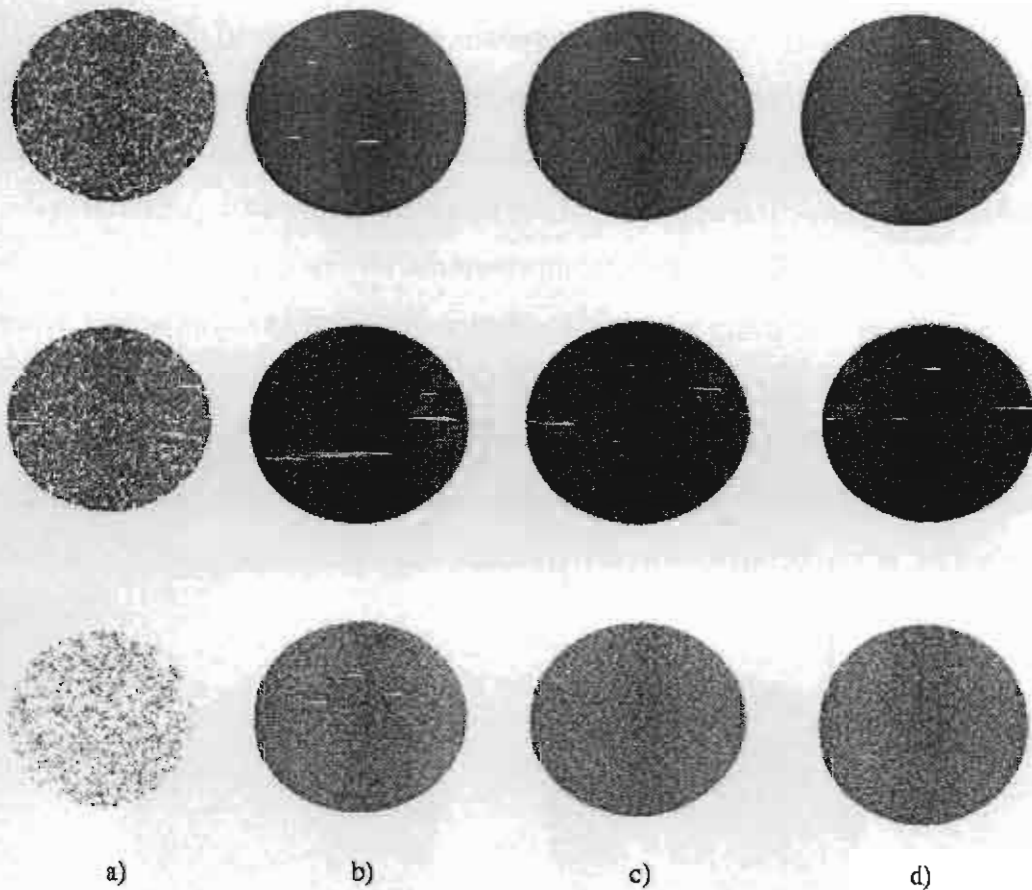
สำหรับ γ สูง ๆ ($z^+ = z$) และมีขนาดเท่า ๆ กับ แรงผิวสัมผัสกด ถึงแม้ว่าระบบจะไม่มีแรงภายนอกกระทำก็ตาม แต่ก็มีแรง หรือความดันเกิดขึ้นภายในวัสดุ ซึ่งผลรวมของความดันเหล่านั้นในระบบมีค่าเท่ากับศูนย์ หรือเรียกสภาพนี้ว่า (Self-Stress) ข้อสังเกตที่น่าสนใจอีกประการหนึ่งนั่นคือการก่อตัวของกลุ่มอนุภาคจะเริ่มเห็นได้ชัดเจนเมื่อจำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาคมีค่ามากกว่า 4 หรืออนุภาคจะเริ่มเกาะกลุ่มและส่งถ่ายแรงดึงเมื่อค่า z มีค่ามากกว่า 4



รูป 3.4 (รูปบน) ภาพรูปพรรณสัณฐานโดยรวมของวัสดุ (รูปกลาง) จำนวนการสัมผัสของแต่ละอนุภาคด้วยรหัสระดับความเข้มสี (Grayscale; 6 การสัมผัสด้วยสีดำ, 5 การสัมผัสด้วยสีเทาเข้ม, 4 การสัมผัสด้วยสีเทา และสีขาวสำหรับจำนวนการสัมผัสน้อยกว่าหรือเท่ากับ 3) (รูปล่าง) ภาพโครงข่ายของแรงดึงฉากระหว่างอนุภาคที่สัมผัสกัน (สีเขียวสำหรับแรงดึง ส่วนสีแดงคือแรงกด) สำหรับวัสดุเม็ดในสถานะสมดุลทางสถิติศาสตร์ที่มี $\mu = 0.5$ และสำหรับค่าพลังงานแอคเซชันที่แตกต่างกัน 4 ค่า (a) $\gamma = k/150$, (b) $\gamma = k/50$, (c) $\gamma = k/20$ และ (d) $\gamma = k/7$ สำหรับระบบบร็คมีเท่ากัน

สำหรับระบบวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีรัศมีต่างกัน ไม่ว่าค่าพลังงานแอคเซชันจะมีค่าน้อยเพียงใด และถึงแม้ว่าจำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาคจะมีค่ามากกว่า 4 รวมทั้งจำนวนการสัมผัสดึงจะมีค่ามากพอและใกล้เคียงกับการสัมผัสกดก็ตาม การก่อตัวของกลุ่มอนุภาคจะไม่ชัดเจน

เหมือนดังในระบบที่อนุภาคมีขนาดเท่ากัน (รูปที่ 3.5) ดูเหมือนว่าการกระจายตัวอย่างต่อเนื่องของขนาดของอนุภาคจะเป็นอุปสรรคต่อการก่อตัวของกลุ่มอนุภาค แต่การกระจายตัวอย่างต่อเนื่องของการสัมผัสจะเป็นไปทุกทิศทุกทาง วัสดุเม็ดจะเป็นวัสดุที่ไม่ขึ้นกับทิศทางและมีเกรนละเอียด



รูป 3.5 (รูปบน) ภาพรูปพรรณสัณฐานโดยรวมของวัสดุ (รูปกลาง) จำนวนการสัมผัสของแต่ละอนุภาคด้วยรหัสระดับความเข้มสี (Grayscale; 6 การสัมผัสด้วยสีดำ, 5 การสัมผัสด้วยสีเทาเข้ม, 4 การสัมผัสด้วยสีเทา และสีขาวสำหรับจำนวนการสัมผัสน้อยกว่าหรือเท่ากับ 3) (รูปล่าง) ภาพโครงข่ายของแรงดึงฉากระหว่างอนุภาคที่สัมผัสกัน (สีเทาสำหรับแรงดึง ส่วนสีดำคือแรงกด) สำหรับวัสดุเม็ดในสภาวะสมดุลทางสถิติศาสตร์ที่มี $\mu = 0.5$ และสำหรับค่าพลังงานแอคเซชันที่แตกต่างกัน 4 ค่า (a) $\gamma = k/150$, (b) $\gamma = k/50$, (c) $\gamma = k/20$ และ (d) $\gamma = k/7$ สำหรับระบบที่อนุภาคมีรัศมีต่างกัน

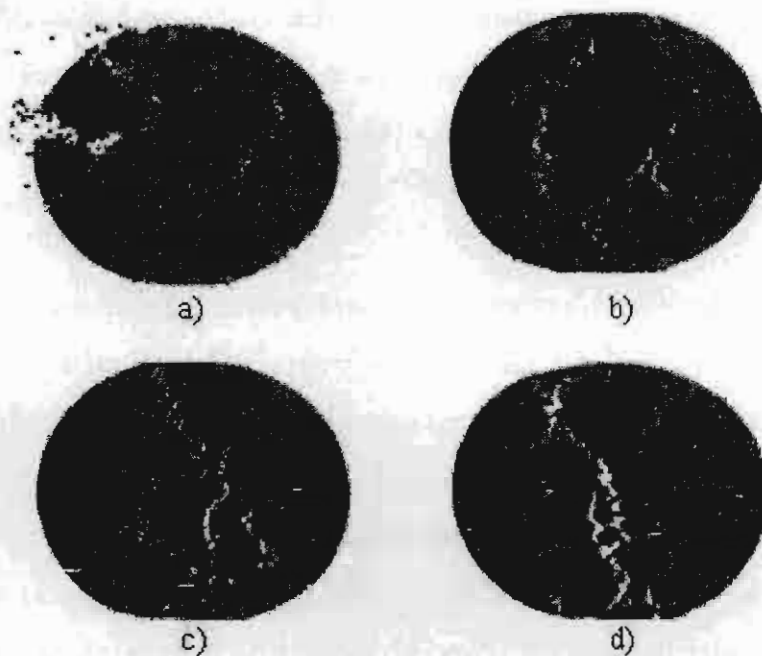
3.4.2 การทดสอบ Brazilian Test

การทดสอบนี้จะยุ่งยากในการคำนวณทั้งทางคอมพิวเตอร์และทางปฏิบัติสำหรับระบบที่มีค่าพลังงานแอคเซชันน้อย ๆ หรือเป็นวัสดุเม็ดโคเฮชันเล็กน้อย เนื่องจากอนุภาคในวัสดุเม็ดใน

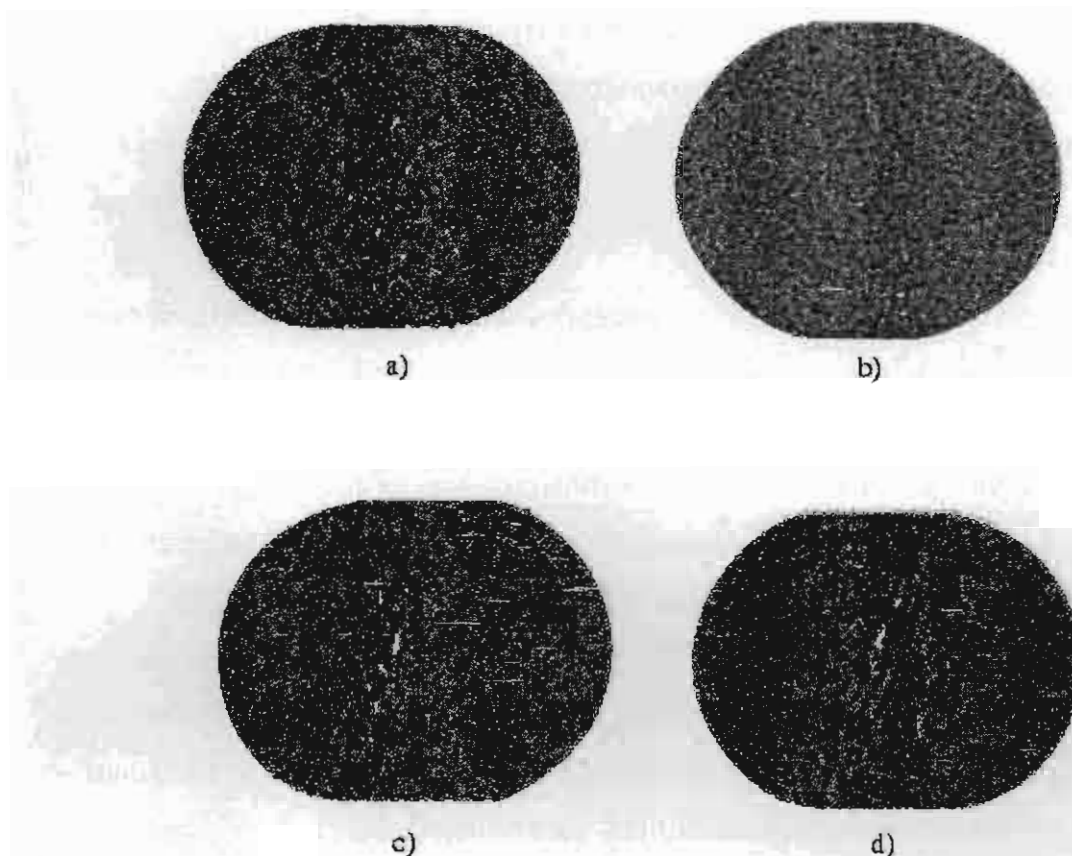
สภาวะสมดุลทางสถิติศาสตร์แทบจะไม่สัมพันธ์กันเลย โครงสร้างของอนุภาคเริ่มต้นค่อนข้างจะกระจัดกระจาย ดังนั้นในหัวข้อนี้การแสดงผลจะเน้นในระบบวัสดุเม็ดที่มีค่าพลังงานแอคเซชันปานกลาง และสูง ($\gamma \geq k/50$)

การเกิดรอยแตกและการแพร่กระจายของรอยแตก (Crack Mode and Propagation)

ระบบวัสดุเม็ดในสภาวะสมดุลทางสถิติศาสตร์ถูกทดสอบด้วย Brazilian Test เพื่อศึกษาการเกิดรอยแตก และการแพร่กระจายของรอยแตก เป็นที่แน่นอนที่ว่าภาระแรงสูงสุดที่ทำให้วัสดุเม็ดเริ่มเกิดการแตกหักนั้น จะเพิ่มขึ้นเมื่อค่าพลังงานแอคเซชันระหว่างผิวสัมผัสเพิ่มขึ้น รูปที่ 3.6 แสดงถึงรูปพรรณสัณฐานของตัวอย่างทางคอมพิวเตอร์ที่การเสียรูปถาวรมหภาค 5% ในทิศทางแนวตั้งสำหรับค่าพลังงานแอคเซชันที่ต่างกันของระบบวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีขนาดเท่ากัน และรูปที่ 3.7 สำหรับวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีรัศมีต่างกัน เราจะสังเกตได้จากทั้งสองระบบคือรอยแตกเกิดขึ้น และรวมตัวกันอยู่ที่บริเวณขอบผิวด้านนอกของระบบสำหรับวัสดุเม็ดที่มีค่าพลังงานแอคเซชันต่ำ ๆ ($\gamma \leq k/50$) ในทางกลับกันสำหรับระบบที่มีค่าพลังงานแอคเซชันสูง ๆ นั้น รอยแตกจะเกิดขึ้นที่ตรงกลางในเนื้อของวัสดุเม็ด และแพร่กระจายออกสู่ขอบรอบนอกของระบบ พฤติกรรมนี้ใกล้เคียงกับผลการทดสอบในทฤษฎีของความยืดหยุ่น (Elasticity) ที่ความเค้นดึงมีค่าสูงสุด ณ ตรงกลางของวัสดุ[2]



รูปที่ 3.6 รูปพรรณสัณฐานของวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีขนาดเท่ากันและเสียรูปที่ 5% สำหรับค่าพลังงานแอคเซชัน 4 ค่า (a) $\gamma = k/150$ (b) $\gamma = k/50$ (c) $\gamma = k/20$ (d) $\gamma = k/7$ รหัสความเข้มของสีหมายถึงจำนวนของการสัมผัสต่ออนุภาคโดยสีดำ = 6, สีเทาเข้ม = 5, สีเทาอ่อน = 4 และสีขาวน้อยกว่า 4



รูปที่ 3.7 รูปพรรณสัณฐานของวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีขนาดแตกต่างกันและเสียรูปที่ 10% สำหรับค่าพลังงานแอคเซชัน 4 ค่า (a) $\gamma = k/20$ (b) $\gamma = k/10$ (c) $\gamma = k/7$ (d) $\gamma = k/3.5$ รหัสความเข้มของสี หมายถึงจำนวนของการสัมผัสต่ออนุภาคโดยสีดำ = 6, สีเทาเข้ม = 5, สีเทาอ่อน = 4 และสีขาวน้อยกว่า 4

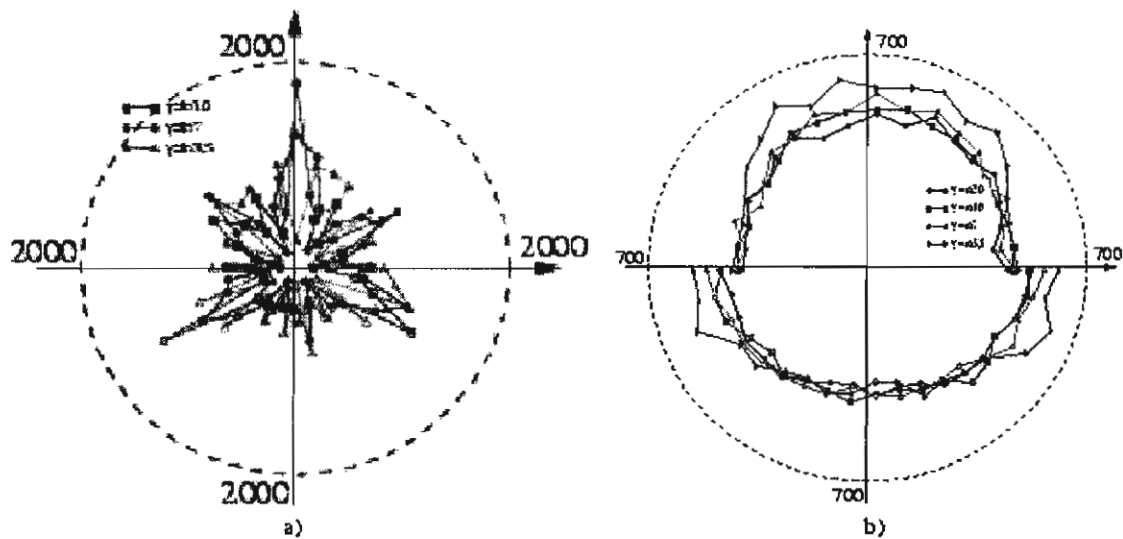
เส้นทางของการแพร่กระจายของรอยแตก โดยเฉพาะระบบที่มีค่าพลังงานแอคเซชันสูงนั้น จะมีเส้นทางโดยรวมในแนวดิ่ง ซึ่งเกี่ยวข้องกับความเค้นกดสูงสุด ในระบบที่ค่า $\gamma = k/7$ นั้น รอยแตกรอง หรือเล็ก ๆ จะมีจำนวนน้อยกว่าในระบบที่มีค่าพลังงานแอคเซชันน้อย กล่าวคือวัสดุเม็ดโคเฮชันสูงจะมีแนวโน้มที่จะแตกออกเป็นสองซีกใหญ่[3] และแตกออกทันทีทันใดเมื่อภาระแรงถึงจุดสูงสุด วัสดุเม็ดมีพฤติกรรมที่เปล่งรังสีขึ้นเมื่อค่าพลังงานแอคเซชันเพิ่มขึ้น พลังงานแอคเซชันที่สูงนี้มีผลทำให้ความสามารถในการเคลื่อนที่ของอนุภาคลดลง ตรงกันข้ามกับกรณีที่พลังงานแอคเซชันต่ำ ๆ โครงสร้างโดยรวมสามารถเคลื่อนตัวได้ง่ายกว่า (แสดงพฤติกรรมแบบวัสดุเหนียว) ซึ่งเหมือนกับพฤติกรรมทางกลศาสตร์ที่ได้จากการทดสอบตัวอย่าง ที่ประกอบไปด้วยเม็ดกลมพลาสติกภายใต้การกด[4] ผลของขอบเขต (อนุภาคจัดเรียงอย่างมีระเบียบ) ทำให้เกิดรอยแตกรองที่ผิวด้านนอกและกลุ่มของอนุภาคที่อยู่ใกล้กับผิวขอบของวัสดุ

รอยแตกและการแพร่กระจายของรอยแตกที่สำคัญและน่าสนใจ โดยเฉพาะในระบบวัสดุ เม็ดที่อนุภาคมีขนาดเท่ากัน เนื่องจากการก่อตัวเป็นกลุ่มของอนุภาคที่ชัดเจน และขนาดขึ้นอยู่กับค่า พลังงานแอคเซชัน ก็คือการเกิดขึ้นของรอยแตกและการแพร่กระจายจะเกิดขึ้นเฉพาะที่รอยต่อ ระหว่างกลุ่มของอนุภาค (Agglomerate Joints) ที่ซึ่งความหนาแน่นหรือจำนวนการสัมผัสเฉลี่ยมีค่าน้อย กลุ่มอนุภาคยังคงเป็นกลุ่มอนุภาคตามเดิม

การเปลี่ยนแปลงของโครงสร้าง (Texture Evolution)

ในระหว่างการทดสอบ พบว่าจำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาคมีค่าเพิ่มขึ้น และมีค่ายิ่งมาก สำหรับวัสดุเม็ดที่มีพลังงานแอคเซชันน้อย ๆ ณ การเกิดขึ้นของรอยแตกที่กำหนดมา การเพิ่มขึ้นของค่า z นี่เป็นการเพิ่มขึ้นของความอัดแน่นในระดับจุลภาค ความเสียดทานส่งผลเฉพาะค่าการสัมผัสเฉลี่ยในสถานะสมดุลทางสถิติศาสตร์เริ่มต้นเท่านั้น

เมื่อแผ่นสี่เหลี่ยมแข็งเกร็งค่อย ๆ เคลื่อนที่ลงในแนวตั้ง วัสดุเม็ดจะค่อย ๆ จัดเรียงตัวใหม่ กล่าวคือ โครงสร้างโดยรวมจะจัดเรียงตัวให้อยู่ในทิศทางที่เหมาะสมสำหรับการรับแรงก่อนที่รอยแตกจะเริ่มต้นขึ้น โดยที่การสัมผัสสถิตินั้นจะเรียงตัวและเพิ่มขึ้นในทิศทางของความเค้นที่มากระทำในแนวแกน y และการสัมผัสตึงจะเพิ่มขึ้นในทิศทางตั้งฉาก ทิศทางของความเค้นดึงโดยตรง แต่ด้วยเหตุของการเปิดของเนื้อวัสดุในทิศทางนี้ การเปลี่ยนแปลงการสัมผัสในทิศทางแนวนอนนี้จึงมีจำนวนไม่มากนัก ซึ่งเห็นความชัดเจนมากในระบบวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีรัศมีต่างกัน (รูปที่ 3.8) ในระบบวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีขนาดเท่ากัน การเปลี่ยนแปลงโครงสร้างอันเนื่องมาจากการเกิดรอยแตกนี้ ไม่สามารถทำลายการจัดเรียงตัวในทิศทางหลักเริ่มต้นของโครงสร้าง (โครงข่ายสามเหลี่ยม) ภายในของกลุ่มอนุภาคลงได้ ซึ่งผลที่ได้นี้ยืนยันการเกิดและการแพร่กระจายของรอยแตกที่รอยต่อระหว่างกลุ่มของอนุภาค



รูป 3.8 แผนผังเชิงขั้วของจำนวนการสัมผัส $N_p(\theta)$ ในฟังก์ชันของทิศทางที่กำหนด θ สำหรับค่าต่าง ๆ ของ γ หลังจากสิ้นสุดการคำนวณที่ 10% ของการเสียรูปมหภาคของวัสดุเม็ด (a) สำหรับระบบที่ประกอบไปด้วยอนุภาคขนาดเท่ากัน และ (b) สำหรับวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีรัศมีต่างกัน

3.5 บทสรุป

ผลการศึกษาทางคอมพิวเตอร์ที่กล่าวถึงในบทนี้ แสดงถึงความเป็นไปได้ในการทดสอบความสามารถในการรับแรงดึงทางอ้อมของวัสดุเม็ดด้วยเทคนิคและวิธีการที่ได้นำมาใช้ เป็นสิ่งที่น่าสนใจอย่างมากที่ว่า การเลือกค่าที่เหมาะสมสำหรับตัวแปรทางกลศาสตร์ อาทิเช่น ค่าพลังงานแอคเซชันระหว่างผิวสัมผัส ทำให้ได้รูปพรรณสัณฐานของระบบสมดุลทางสถิติศาสตร์ด้วยระบบเอง (Self-Equilibrium) ที่ค่อนข้างปกติ (ในที่นี้เป็นวงกลม) นอกเหนือจากนี้ การเลือกระบบที่อนุภาคมีขนาดเดียวกัน (Mono-disperse) อนุญาตให้ตัวอย่างสร้างโครงสร้างที่ไม่เป็นระเบียบ (Disordered) ในลักษณะของรอยต่อของกลุ่มอนุภาค (Joints of Agglomerate) ซึ่งเป็นบริเวณหลักที่มีความหนาแน่นต่ำ มีแรงสัมผัสเบาบาง และที่เกิดรอยแยกหลักของระบบ แต่ได้วัสดุเม็ดที่มีโครงข่ายของการสัมผัสแน่นไปทิศทางใดทิศทางหนึ่ง ในทางกลับกันสำหรับระบบวัสดุเม็ดที่อนุภาคมีรัศมีต่างกัน (Polydisperse) ระบบกลับสร้างโครงข่ายการสัมผัสกระจายไปทุกทิศทุกทางอย่างเป็นระเบียบ ค่าพลังงานแอคเซชันระหว่างผิวสัมผัสเปลี่ยนแปลงพฤติกรรมมหภาคของวัสดุเม็ด โดยเฉพาะอย่างยิ่งการเกิด และการแพร่กระจายของรอยแตก การศึกษาที่แสดงในที่นี้อาจจะนำไปสู่การทดสอบวัสดุเม็ดแบบโคเฮซีฟในช่วงของการเกิดการแตกหักอย่างสมบูรณ์ รวมไปถึงการศึกษาผลของแรงเสียดทานต่อการหมุนที่มีต่อพฤติกรรมมหภาคของวัสดุเม็ดต่อไป

เอกสารอ้างอิง

- [1] I. Preechawuttipong, P. Ingsuwan, R. Peyroux, and S. Jacque. Crack Propagation Mechanism in Rounded Cohesive Granular Media. *11th International Conference on Fracture*, Turin, Italy, 2005.
- [2] S. Timoshenko and J.N. Goodier. *Theory of elasticity*. McGraw-Hill Book Co.Inc., New York, NY, 2nd edition, 1951.
- [13] C. Thornton, M.T. Ciomocos, K.K. Yin and M.J. Adams. Fracture of Particulate solids. In Behringer & Jenkins, editor, *Powders & Grains 97*, pages 131-134, Balkema, Rotterdam, 1997.
- [4] Y. Haddad. Etude du comportement mécanique des milieux granulaires avec adhésion : application au fractionnement des céréales. Technical report, INRA, 2000. Rapport de stage Post Doctoral .

สรุปภาพรวมของโครงการ

คุณสมบัติและพฤติกรรมทางกลศาสตร์ของวัสดุเมดที่คิดพลังงานแอคเซชันระหว่างผิวสัมผัสถูกศึกษาภายใต้กรอบของการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ และอยู่บนพื้นฐานของระเบียบวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุล (Molecular Dynamics) พฤติกรรมมหภาคทางกลศาสตร์ของวัสดุเมดได้จากการวิเคราะห์ตัวแปรจุลภาค ด้วยเทคนิคการแก้ปัญหา “กลศาสตร์จุลภาค” (Micro-mechanics) ที่ใช้หลักการพื้นฐานทางสถิติศาสตร์เป็นหลัก ตัวแปรจุลภาคที่ใช้วิธีกลศาสตร์จุลภาคได้แก่ จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่อการสัมผัส (Coordination Number) ความเค้นเฉลี่ยในระบบที่คำนวณจากแรงกระทำต่ออนุภาค ทิศทางของการเกิดการสัมผัส รวมไปถึงตัวแปรของโครงสร้างตาข่าย (Texture)

อิทธิพลของแรงแอคเซชันระหว่างผิวสัมผัสที่มีต่อคุณสมบัติของวัสดุเมดได้ถูกแสดงออกให้เห็นอย่างเป็นระบบจากแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ของชิ้นงานของวัสดุเมด โดยรูปร่างรวมเป็นวงกลม ที่ประกอบด้วยอนุภาคกลมจำนวน 8000 อนุภาค ระบบวัสดุเมดที่ศึกษาเป็นระบบสองมิติภายใต้แรงกดทุกทิศทางสำหรับขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง และถูกทดสอบด้วยการทดสอบแบบ Brazilian เพื่อหาลักษณะการเกิดและการแพร่กระจายของรอยแตกของวัสดุเมด ความแตกต่างของรัศมีของอนุภาคมีผลต่อการก่อตัวเป็นกลุ่มอนุภาค (Agglomerate) ที่มีขนาดเล็กหรือใหญ่ต่างกัน ขึ้นอยู่กับค่าพลังงานแอคเซชัน และมีผลต่อความเป็นวัสดุที่ขึ้นกับทิศทาง (Isotropy) ที่ต่างกัน ในขั้นตอนของการทดสอบของ Brazilian รอยแตกจะเกิดขึ้นระหว่างขอบของกลุ่มอนุภาคในเนื้อของวัสดุ และจะแพร่กระจายไปตามทิศทางของความเค้นกดที่มากระทำ โดยเฉพาะสำหรับวัสดุเมดที่มีค่าโคเฮชันสูง และรัศมีของอนุภาคในระบบมีค่าเท่ากันหมด (Monodisperse) วัสดุเมดมีแนวโน้มที่จะแตกออกเป็นส่วน ๆ สำหรับระบบโคเฮชันสูง ในขณะที่จะแตกออกเป็นชิ้นเล็ก ๆ สำหรับระบบโคเฮชันต่ำ ๆ

จำนวนของอนุภาคที่ได้ทำการศึกษาในงานวิจัยนี้ยังคงมีจำนวนน้อย หรือตัวอย่างทางคอมพิวเตอร์ของวัสดุเมดมีขนาดเล็กเมื่อเทียบกับตัวอย่างโครงสร้างจริงที่ใช้ในงานวิศวกรรม การพัฒนาโปรแกรมเพื่อลดเวลาของการคำนวณ เช่นการคำนวณขนาน (Parallel Computation) ในกรณีที่จำนวนของอนุภาคเพิ่มขึ้นมาก ๆ เป็นสิ่งจำเป็น โดยเฉพาะการศึกษาวัสดุในระบบสามมิติ เช่นเดียวกันกับการศึกษาและพัฒนาแบบจำลองทั้งในระดับการสัมผัส และระดับมหภาค รวมเป็นถึงภาระงานกระทำทางกลศาสตร์ที่ซับซ้อน ที่เข้าใจลึกความเป็นจริงในทางปฏิบัติมากที่สุด ยังคงเปิดกว้างให้พัฒนาสืบต่อไป

ภาคผนวก ก.

ผลงานที่นำเสนอในการประชุมวิชาการในระดับ
นานาชาติ 11th International Conference on Fracture,
Turin, Italy, 2005

CRACK PROPAGATION MECHANISM IN ROUNDED COHESIVE GRANULAR MEDIA

I. PREECHAWUTTIPONG¹, P. INGSUWAN¹, R. PEYROUX², S. JACQUE¹

¹Department of Mechanical Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200, Thailand.

²Laboratoire de Mécanique et Génie Civil, CNRS-Université Montpellier II, Montpellier 34095, France

ABSTRACT

This work investigates the influence of cohesion on the aspect of fracture and crack propagation in 2D rounded cohesive granular packing simulated by the molecular dynamics method involving simple contact laws with adhesion. 2D numerical “Brazilian” test with samples of 8000 identical radius circular particles suggest that the formation of crystallized agglomerates within samples depends on the value of the cohesive energy between particles. *The agglomerate size is increased when the surface energy increases. In the testing phase and for the high values of surface energy, the fissures appear at the agglomerate interfaces in the center of sample and propagate toward to the periphery in parallel to the compressive direction.*

1 INTRODUCTION

Granular materials are defined as collections of solid particles for which the macroscopic behavior is governed by some contact forces. There are many examples of granular media, notably in the civil engineering domain: soil, concrete and all of the fragmentation process. In the agro-product, pharmaceutical and chemical industry, many products are constituted from grains or powders. *The macroscopic and microscopic properties of granular media are generally complex. Many experimental and numerical studies on the mechanical behavior of granular packing have been undertaken over the last twenty years, with the aim of predicting the macroscopic behavior of granular medium and to investigate the grain scale or the contact scale. These studies indicate that if the whole medium is dense, it is then very strongly structured. This conclusion was first made from the contact force network analysis, of inhomogeneous nature (Radjai et al. [1]), and secondly from the study of the contact directions which characterize the non isotropy of the contact network (Oda and Sudoo [2], Calvetti and al. [3], Cambou [4]). These investigations concern especially the noncohesive granular media.*

While cohesion is often taken into account when dealing with macroscopic behavior of granular materials, the microscopic aspects remain only little explored. The aim of this work is to study, by numerical simulation, the influence of cohesion on the aspect of fracture and the crack propagation of the systems by progressively increasing the surface energy (adhesion) between particles, starting with a noncohesive medium. In cohesive granular packing, the cohesion arises from attraction forces of various physico-chemical origins that prevent the loss of contact, together with hard core repulsive force allows a pair of particles in contact to support compressive forces (up to particle cracking).

In this paper, we first present a simple model of adhesion between two circular particles. After a short description of the numerical sample and of the boundary conditions, we present our main results regarding the agglomerate size in the equilibrium state and the crack propagation in the testing phase as a function of surface energy between contacts.

2 ADHESION MODEL

The numerical simulations were carried out on 2D samples using the Molecular Dynamics method (MD) based on the predictor-corrector scheme with Gear's set of corrector coefficients for the integration of Newton's equations of motion (Allen and Tildesley [5]). Principally, the effort of contact between two particles is defined as a function of the relative displacements and relative velocities of particles. Without considering any distance forces and in the first approximation, the effort of contact

is only a function of the overlap depth δ between two particles, (Figure 1). This dependence is generally non-linear, in Hertz's model for example.

In our work, we consider firstly the normal effort of adhesive particles in contact. The adhesion is introduced as a contact resistance to separation effort. With an idea similar to the adhesion model on solid surface of JKR (Johnson and al. [6], Roux [7]), we established a normal interaction model between two particles in which the effort of contact is the sum of a repulsive force and an adhesive force. We select the simple elastic linear law for the repulsive part that is given by $k\delta$ (Schäfer and al. [8]), where k is the contact stiffness, and the adhesive force proportional to the contact surface $2a$ given by $\gamma\sqrt{r\delta}$, where γ represents the surface energy of particles in contact and r the effective radius of the curvature of the interface at $\delta=0$. The dynamic effects are taken in account with a viscous damping term, given by $\alpha\dot{\delta}$, where α is a normal damping coefficient. So the expression of the normal effort f_n as a function of δ is given by (Preechawuttipong and al. [9], Radjai and al. [10]):

$$f_n = k\delta + \alpha\dot{\delta} - \gamma\sqrt{r\delta} \quad (1)$$

This model will be referred to as the “geometrical adhesion model” (GA). It is easy to show that the threshold of the tensile force F_c (necessary force to separate two particles in contact) is $F_c = r\gamma^2 / 4k$. Note that in contrast with the JKR model, F_c depends here on the elastic modulus k .

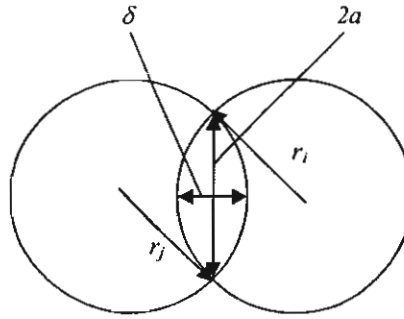


Figure 1: Geometry of the contact between two disks.

The implementation of Coulomb's law in the MD method poses a basic technical problem, i.e. different coefficient of dynamic and static friction (Schäfer and al. [8] and Radjai [11]). In fact, the integration of the equation of motion requires a “smooth” force law such that the friction force f_t is a function of relative sliding velocity v_t . According to Coulomb's law of friction, the set of permissible pairs between f_t and v_t can not be represented as a single-value function, “nonsmooth”. The simple way to avoid this difficulty is to adopt a “regularized” form of Coulomb's law and in this case we adopt the simplest regularized Coulomb's law with adhesion defined by:

$$f_t = \min\{\beta|v_t|, \mu(f_n + F_c)\}\text{sign}(v_t) \quad (2)$$

where μ represent a coefficient of friction and β is a tangential viscosity.

A force law with adhesion in a broad sense involves a pair of adjacent particles that resist not only normal separation, but also relative sliding and rolling. When these conditions are fulfilled, the interparticle contact is “cemented”, i.e. the relative degree of freedom of particles in contact are frozen within the range of supportable forces and moments. However, we will not consider here the rolling

friction and stiffness so that contiguous particles may freely roll on one another with no bending moment acting between them.

3 NUMERICAL SAMPLES

For preparing a circular simple well compact, we utilized an original technique which consists of small dispersed particles in a space and expand the radius of particles until the available space is occupied. Our numerical 2D samples are composed of 8000 circular particles with the final radius of 3 mm. The particles with initial radius of 1.5 mm are randomly distributed (triangular network) without contact at the beginning, and no effect of gravity, in a rounded box. The particle radius grows with a constant velocity until reaching their final size. We wait for the particles to fill up the space and then rearrange them until a static equilibrium is reached. The adhesion between the rounded box and the particles is zero. The surface energy γ is prescribed at contact level for each simulation. The stiffness and the coefficient of damping are the same values for the particle-particle and particle-box contacts. Notice that our samples in this step are really under compression in all directions. As the particle radii are identical, the system presents a global triangular contact network with a coordination number (the average number of contacts per particle) nearly to 6. The next step concerns the release of the sample by slowly increasing the rounded box radius to allow the system to relax to a static equilibrium again. The final state of this preparation step is used as the initial equilibrium state for our analysis and for the Brazilian test. The Brazilian test is realized by placing the system in initial state between two flat plates, (Figure 2). There is no adhesion between the particles and the flat plates but all other parameters of contact are the same values for particle-particle and particle-flat plate contact. The lower flat plate is fixed while the upper plate is pushed down (direction $-y$) with a constant velocity of displacement. The numerical simulations are stopped when the macroscopic strain in the y direction reaches approximately 5%.

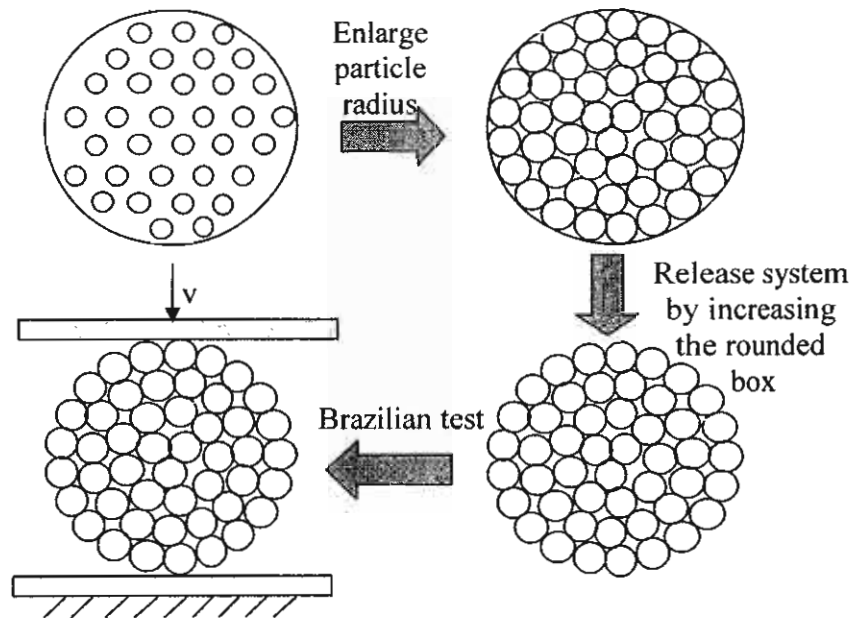


Figure 2: Sample preparation under stress by enlargement of the particle radius and the Brazilian test scheme.

4 NUMERICAL RESULTS

4.1 Initial equilibrium state properties

An interesting result of our investigation is the formation of agglomerate regions in the sample. Figure 3 upper show four initial states of configuration for different surface energy values γ . We observe that the structure forms some crystallized zone or some agglomerates the size of which increases with the adhesion γ . The formation of agglomerates is clearer when we see the images of local coordination number, (Figure 4 middle). The structure is also clarified if we trace the effort between particles in the weak effort zones which form the interfaces of the agglomerates, (Figure 5 lower). Moreover, we found that the coordination number is lower than 4 for the low values of adhesion ($\gamma < k/50$), similar to noncohesive granular media, but exceeds 4 for higher adhesion values.

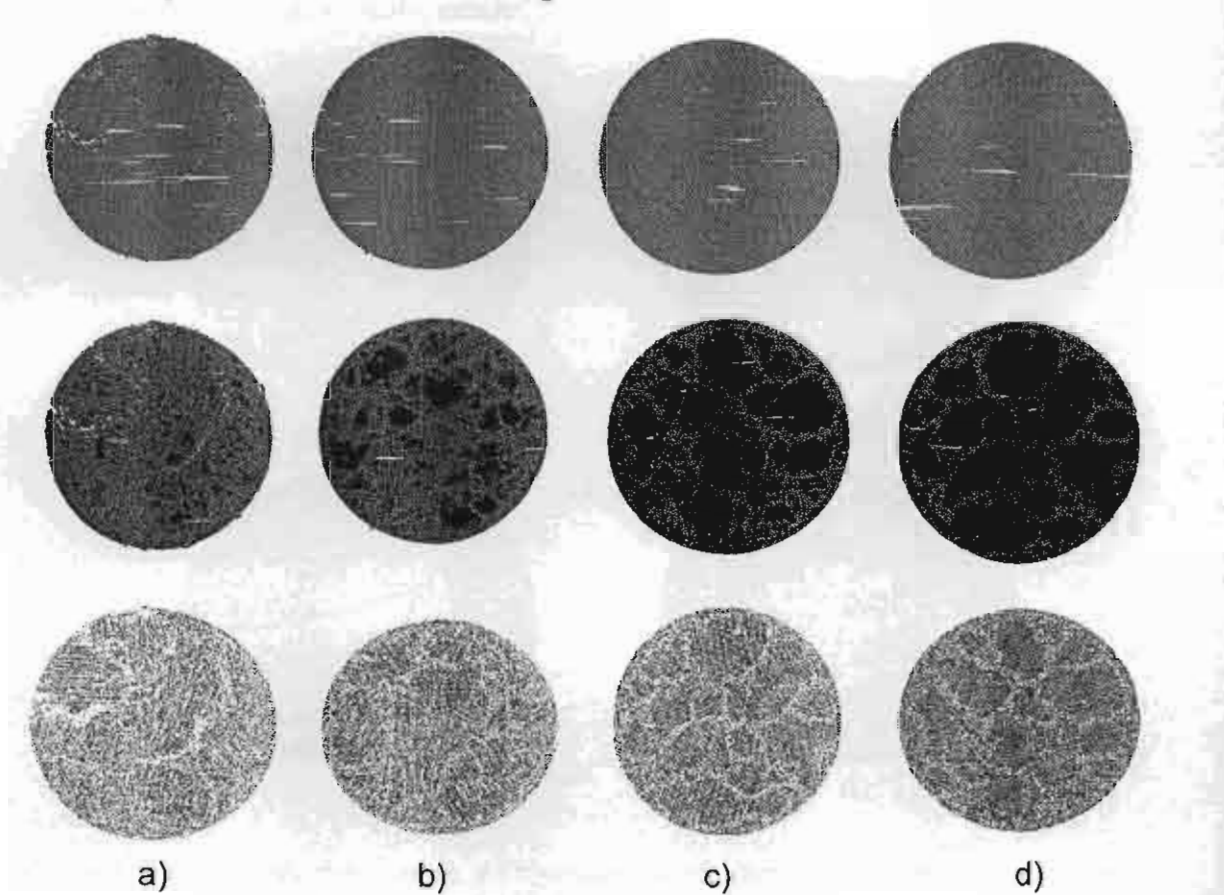


Figure 3: (upper) Initial configuration; (middle) local coordination number coded in greyscale (6 contacts in black, 5 in dark grey, 4 in bright grey and white for less than 4); normal contact force network of initial equilibrium state of sample with $\mu = 0.5$ for four different values of adhesion: $\gamma = k/150$ a), $\gamma = k/50$ b), $\gamma = k/20$ c) and $\gamma = k/7$ d). The compressive forces in contact are traced in red and the tensile forces in green.

4.2 Crack mode and propagation

The sample in initial equilibrium state is effectuated by the Brazilian test for studying the crack mode and propagation. Of course, the ultimate failure load of the system increases when the local surface energy between particles increases. We observe that faults appear and are manifested near the circumference for low values of adhesion. In contrast, for high values of adhesion, the first fissure occurs at the centre of the sample and propagates throughout the periphery. This high cohesive behaviour reconciles the results of elasticity theory in which the tensile stress is maximum at the centre of the sample (Timoshenko and Goodier [12]). A spectacular aspect of the fissures is their initiation and their propagation in the agglomerate joints where the structure is less compact. The initial agglomerate remains intact, (Figure 6) and the crack is oriented along the axis of compression. Moreover, we found that the fissures are more diffuse in the system with low adhesion but they are more localized for the highly cohesive sample.

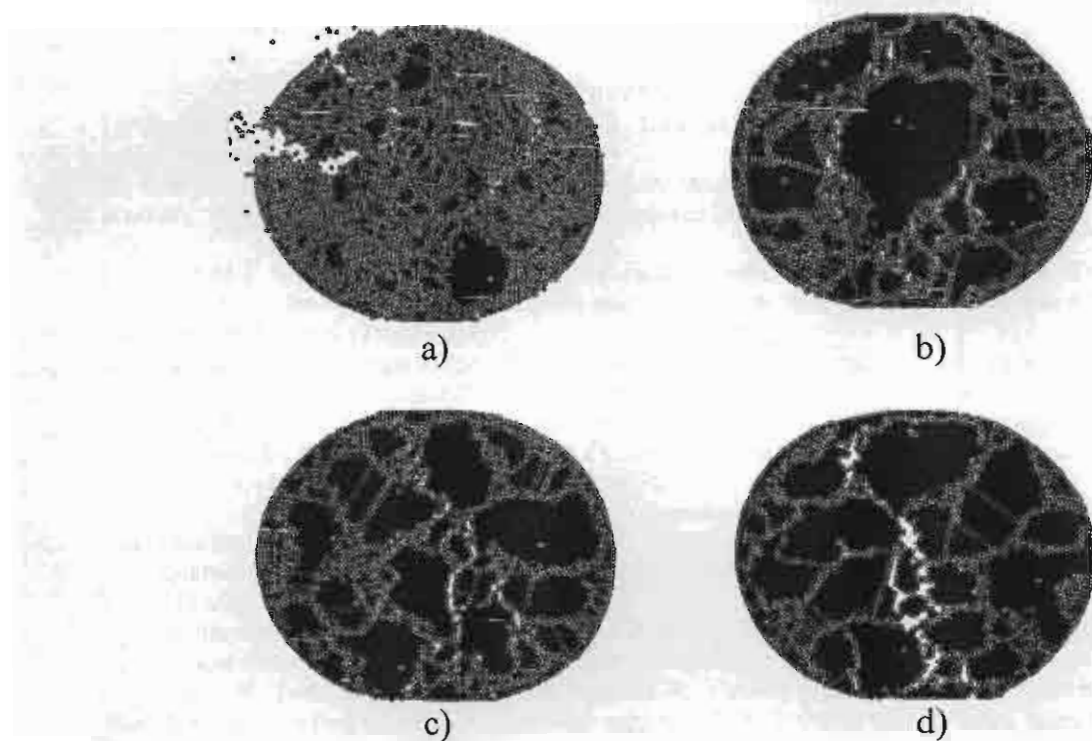


Figure 4: Configuration of the sample at 5% of macroscopic stress for four values of adhesive energy: (a) $\gamma = k/150$, (b) $\gamma = k/50$, (c) $\gamma = k/20$ and (d) $\gamma = k/7$. The greyscale represents the coordination number: black for 6, dark grey for 5, bright grey for 4 and white for less than 4.

5 CONCLUSION

The result of the numerical investigations described demonstrate the feasibility of the indirect tensile test using the suggested method. We can obtain the auto-equilibrium geometry of enough regular form. The choice of a homogeneous system allowed samples to be generated that present a disorderly type "joints of agglomerate" and to observe that the weak effort or contact zones which guide essentially the fissure and the fracture of the medium. The values of adhesive energy between particles changes the macroscopic behaviour, in particular the crack mode and propagation. The investigation presented here could be extended for characterizing an evolution of stress in the ruin phase of a structure.

ACKNOWLEDGEMENT

This work is supported by Chiang Mai University and The Thailand Research Fund under grant number MRG4608185.

REFERENCE

- [1] Radjai F., Wolf D., Jean M., and Moreau J.J., Bimodal character of stress transmission in granular media, *Phys.Rev.Lett.*, vol.90, pages 61, 1998.
- [2] Oda M., and Sudoo T., Fabric tensor showing anisotropy of granular soil and its application to soil plasticity. *Powders and Grains 89*, Biarez and Gourvès (eds), Rotterdam, Balkema, pages 155-161, 1989.
- [3] Calvetti F., Combe G., and Lanier J., Experimental micromechanical analysis of a 2D granular material: relation between structure evolution and loading path, *Mechanics of Cohesive and Frictional Materials*, vol.2, pages 121-163, 1997.
- [4] Cambou B., From global to local variables in granular media. *Powder and Grains 93*, C. Thornton (ed), Rotterdam, Balkema, pages 73-86, 1993.
- [5] Allen M. and Tildesley D., *Computer Simulation of Liquid*. Oxford Science Publications, 1987.
- [6] Johnson K.L., Kendall K., and Roberts A.D., Surface energy and the contact of elastic solids, *Proc. Royal Soc. London A*, vol. 324, pages 301-313, 1971.
- [7] Roux S., Quasi-static contacts. *Physics of Dry Granular Media*, H.J. Herrmann et al. (eds), Kluwer Academic Publisher, pages 267-284, 1998.
- [8] Schäfer J., Dippel S., and Wolf D.E., Force Schemes in Simulations of Granular Materials, *J. Phys. I France*, vol. 6, pages 5-20, 1996.
- [9] Preechawuttipong I., Peyroux R., and Radjai F., Microscopic features of cohesive granular media. *Powders and Grains 2001*, Y. Kishino (ed), pages 43-46, 2001.
- [10] Radjai F., Preechawuttipong I., and Peyroux R., Cohesive granular texture. Continuous and discontinuous modeling of cohesive-frictional materials. P.A. Vermeer and al. (eds), pages 149-162, Springer, 2000.
- [11] Radjai F., Multicontact dynamics. *Physics of Dry Granular Media*, H.J. Herrmann et al. (eds), Kluwer Academic Publisher, pages 305-312, 1998.
- [12] Timoshenko S., and Goodier J.N., *Theory of elasticity*. McGraw-Hill Book CO.Inc., New York, NY, 2nd edition, 1951.

ภาคผนวก ข.

ผลงานที่นำเสนอเพื่อตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติ (ได้ทำ
การแก้ไขและส่งกลับ และรอการตอบรับ ตั้งแต่เดือน
มกราคม 2549) ชื่อวารสาร Strength, Fracture and
Complexity: An International Journal

Crack nucleation and propagation in rounded cohesive granular media

I. PREECHAWUTTIPONG ^{a,*}, P. INGSUWAN ^a, and R. PEYROUX ^b

^aDepartment of Mechanical Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200, Thailand.

^bLaboratoire de Mécanique et Génie Civil, CNRS-Université Montpellier II, Montpellier 34095, France

* Corresponding author. Tel.: (66-53) 94.41.46; Fax: (66-53) 94.41.45; E-mail:

ittichai@dome.eng.cmu.ac.th

Abstract: This work investigates the influence of cohesion on aspects of fracture mode and propagation in 2D rounded cohesive granular packing. Simulations are undertaken using the molecular dynamics method involving simple contact laws with adhesion. The numerical “Brazilian” test with samples of 8000 circular particles suggests that the formation of crystallized agglomerates within mono-disperse samples depends on the value of the cohesive energy between particles. The agglomerate size is increased when the surface energy increases. In the testing phase and for high values of surface energy, the fissures appear at the agglomerate interfaces in the center of sample and propagate toward the periphery in parallel to the compressive direction.

Keywords: Granular material, adhesion, Molecular Dynamics, crack, agglomerate

1. Introduction

Granular materials may be considered as an assembly of particles of differing size, the macroscopic behavior of which is governed by interactions between particles. In civil engineering work, natural or reshaped soil can intervene in the construction of foundations, dams or underground structures, Granular substances are used in the

fabrication of concrete and also occur in fragmentation processes. In the agro-product, pharmaceutical and chemical industry, many products are constituted from grains or powders. The prediction of the stability of structures in geo-materials, and the collapse, transportation and stocking of granular materials are problems involving the mechanic behavior of granular materials. The macroscopic and microscopic properties of granular media are complex. Many experimental and numerical studies on the mechanical behavior of granular packing have been undertaken over the last twenty years, with the aim of predicting the macroscopic behavior of granular media and investigating the grain scale or the contact scale. These studies indicate that if the whole medium is dense, it is then very strongly structured. This conclusion was first made from the contact force network analysis of inhomogeneous nature [7], and secondly from the study of the contact directions which characterize the non isotropy of the contact network [2,3,5]. However, these investigations concern only the non-cohesive granular media.

While cohesion is often taken into account when dealing with macroscopic behavior of granular materials, the microscopic aspects remain little explored. The aim of this work is to quantified, by numerical simulation, the influence of cohesion on the aspect of fracture and the crack propagation of the systems by progressively increasing the surface energy (adhesion) between particles, starting with a non-cohesive medium. In this paper, we first present a simple model of adhesion between two circular particles. After a short description of the numerical sample and of the boundary conditions, we present our main results regarding the agglomerate size, the average coordination number and the contact directions in the equilibrium state and

the crack propagation in the testing phase as a function of surface energy between contacts.

2. Adhesion in Molecular Dynamics simulations

The simulations were carried out on 2D numerical samples using the Molecular Dynamics (MD) method based on the predictor-corrector scheme with Gear's set of corrector coefficient for the integration of Newton's equation of motion [1]. In molecular dynamics or most popular discrete element simulation methods, the particles are handled as rigid bodies. Classically, the interaction between particles is defined as the function of the particle positions and velocities. In our numerical algorithm, we introduced a model of adhesion between two particles in contact characterized by the relative displacement of the particles centers from the "just at contact" position (an overlap δ) and a contact surface $2a$; (Fig.1). To a first order approximation in δ/r , the radius of the contact zone is given by $a = \sqrt{r\delta}$.

In our work, we consider firstly the normal effect of adhesion on contact. The adhesion is introduced as a contact resistance to a separation effort. With an idea similar to the adhesion model on solid surface of JKR [4], we established an interaction model between two particles in which the contact force is the sum of a repulsive force proportional to an overlap δ , and an attractive force proportional to a contact surface $2a$. In the retained model and in a quasi-static approximation, the repulsive force depends on a contact stiffness k , given by $k\delta$, and the attraction force on an adhesive energy γ , given by $\gamma\sqrt{r\delta}$. The dynamic effects are taken into account by viscous damping term $\alpha\dot{\delta}$, where α represents the normal damping coefficient and

$\dot{\delta}$ the relative velocity. So the expression for normal force of contact F_n is a function of δ given by [6,8]

$$F_n = k\delta + \alpha\dot{\delta} - \gamma\sqrt{r\delta} \quad (1)$$

With regard to the tangent force, we choose a Coulomb's type friction law but with a modification to account for the fact that the contact can support tensile force (Fig.2). Since the integration of movement equations requires a regular friction force, we implemented the regularized Coulomb's law with adhesion given by this expression [6,8]

$$F_t = \min\{\gamma_s v_s, F_c\} \cdot \text{sign}(v_s) \quad (2)$$

where γ_s represent the tangential viscosity and v_s relative sliding velocity. Note that in the present model, the overlap is permitted. This overlap can be interpreted in term of the interaction zone or of the particle deformation. A force law with adhesion in a broad sense involves a pair of adjacent particles that resist not only normal separation, but also relative sliding and rolling. When these conditions are fulfilled, the interparticle contact is "cemented", i.e. the relative degree of freedom of particles in contact are frozen within the range of supportable forces and moments. However, we will not consider here the rolling friction and stiffness so that contiguous particles may freely roll on one another with no bending moment acting between them.

3. Numerical samples

Numerical 2D samples are considered, composed of 8000 circular particles. Two granular systems were simulated. One consists of disperse particles with the radius of 3 mm (mono-disperse system) and in the other system the particle radii are uniformly distributed between 2 and 4 mm (poly-disperse systems). For preparing a well compacted circular sample, we utilized a simple technique in which the particles

are distributed randomly in a triangular network without contact in a circular box. The radius of the circular box is then reduced until the available space is fully occupied, and the system is under compression in all directions. Gravitational effects are neglected. When the particles fill the space and these are then rearranged until a static equilibrium is reached. The adhesion between the rounded box and the particles is zero. The surface energy γ is prescribed at contact level for each simulation. The stiffness and the coefficient of damping are the same for all particle-particle and particle-box contacts. The next step involves the release of the sample by slowly increasing the rounded box radius to allow the system to relax to a static equilibrium again. The final state of this preparation step is used as the initial equilibrium state for the analysis and for the Brazilian test. This test is often used to determine the resistance to tensile force of materials which do not support tensile loads well, such as concrete. The Brazilian test is realized by placing the sample between two flat plates, (Fig.3). In the simulation, there is no adhesion between the particles and the flat plates but all other parameters of particle-flat plate contact are the same values for particle-particle contact. The lower flat plate is fixed while the upper plate is pushed down (direction $-y$) with a constant velocity of displacement. The numerical simulations are stopped when the macroscopic strain in the y direction reaches approximately 10%.

4. Numerical results

Initial equilibrium state

A significant feature of our simulation results is the formation of agglomerate regions in the sample. For the mono-disperse system, we observe that the structure forms crystallized zones and agglomerates, the sizes of which increase with the adhesion γ . The formation of agglomerates is clearest from the images showing local

coordination number, (Fig. 4 upper). In this figure, the coordination number is coded in greyscale: 6 contacts in black, 5 in dark grey, 4 in bright grey and white for less than 4. The structure is also clarified in the image that reflect interaction forces and we can see the low stress joins which form the interfaces of the agglomerates, (Fig. 4 lower). In contrast for the poly-disperse system, the formation is not clear for all values of adhesion γ (Fig. 5). Moreover, for two granular systems, we found that the coordinate number or the average number of contacts per particle is lower than 4 for low values of adhesion ($\gamma < k/50$), similar to non-cohesive granular media, but exceeds 4 for high values of adhesion. The contacts which support tensile force increase and have the same number as the compressive contact for high values of adhesion, as we see in the agglomerates of mono-disperse sample.

In the mono-disperse systems which are composed of some agglomerates, the structure arranges the contacts in 3 principle directions as we can see from the histogram of the contact direction (Fig. 6a). Contrary to the poly-disperse sample, we observe that the contacts are distributed in a quasi-isotropic way for all adhesion values, without any dominant directions.

Crack mode and propagation

The investigation of crack mode and propagation is carried out by the Brazilian test, starting from samples in the initial equilibrium state. Of course, the ultimate failure load of the system increases when the local surface energy between particles increases. We observe that faults appear and are manifested near the circumference for low values of adhesion for both systems. In contrast, for high values of adhesion of both granular samples, the first fissure occurs at the centre of the sample and propagates throughout the periphery (Fig.7 and Fig.8). This high

cohesive behaviour reconciles the results of elasticity theory in which the tensile stress is maximum at the centre of the sample [9]. Otherwise, the fissure is oriented in a vertical direction, corresponding to the maximum stress direction in compression. These figures show also that the medium tend to form a lump structure for high cohesive systems. This behaviour results a mobility reduction of particles in presence of strong adhesions, whereas in the less cohesive cases the medium was found to break into a crumble-like structure.

A particular aspect of the fissures, in the mono-disperse systems, is their initiation and propagation in the agglomerate joints where the structure is less compact. It is also seen that the initial agglomerate remains intact. This result is confirmed by the evolution of contact directions (Fig.9). The compression contacts are oriented and increased in the applied stress direction, whilst the traction contacts are rearranged in the orthogonal direction. Nevertheless, this evolution doesn't damage the favored orientation which is dominated by the structures connecting the triangular network inside the agglomerates.

5. Conclusion

The result of the numerical investigations described demonstrate the feasibility of the indirect tensile test as a simulation tool. We can obtain the auto-equilibrium geometry of enough regular form. The choice of a homogeneous system allows samples to be generated that present a disorderly type "joints of agglomerate" and to observe that the weak effort or contact zones which guide the fissure and fracture of the medium. A uniform distribution particle radii helps to create a quasi-isotropy material. The values of adhesive energy between particles change the macroscopic behaviour, in particular the crack mode and propagation. The

investigation presented here could be extended for characterizing an evolution of stress in the ruin phase of a structure.

Acknowledgements

This work is supported by Chiang Mai University and The Thailand Research Fund under grant number MRG4608185.

Reference

- [1] M. Allen and D. Tildesley, Computer Simulation of Liquid. Oxford Science Publications, 1987.
- [2] F. Calvetti, G. Combe, and J. Lanier, Experimental micromechanical analysis of a 2D granular material: relation between structure evolution and loading path, *Mechanics of Cohesive and Frictional Materials*, vol.2, pages 121-163, 1997.
- [3] B. Cambou, From global to local variables in granular media. *Powder and Grains 93*, C. Thornton (ed), Rotterdam, Balkema, pages 73-86, 1993.
- [4] K.L. Johnson, K. Kendell, and A.D. Roberts, Surface energy and the contact of elastic solids, *Proc. Royal Soc. London A*, vol. 324, pages 301-313, 1971.
- [5] M. Oda, and T. Sudoo, Fabric tensor showing anisotropy of granular soil and its application to soil plasticity. *Powders and Grains 89*, Biarez and Gourvès (eds), Rotterdam, Balkema, pages 155-161, 1989.
- [6] I. Preechawuttipong, R. Peyroux and F. Radjai, Microscopic features of cohesive granular media. In Y. Kishino, editor, *Powders and Grains 2001*, pages 43-46. Swet&Zeitlinger B.V., Lisse, 2001.
- [7] F. Radjai, D. Wolf, M. Jean, and J.J. Moreau, Bimodal character of stress transmission in granular media, *Phys.Rev.Lett.*, vol.90, pages 61, 1998.
- [8] Radjai F., Preechawuttipong I., and Peyroux R., Cohesive granular texture. Continuous and discontinuous modeling of cohesive-frictional materials. P.A. Vermeer and al. (eds), pages 149-162, Springer, 2000.
- [9] Timoshenko S., and Goodier J.N., *Theory of elasticity*. McGraw-Hill Book CO.Inc., New York, NY, 2nd edition, 1951.

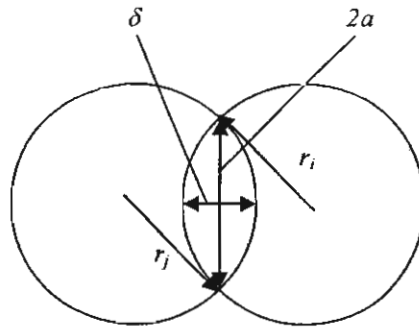


Fig.1. Geometry of the contact between two disks.

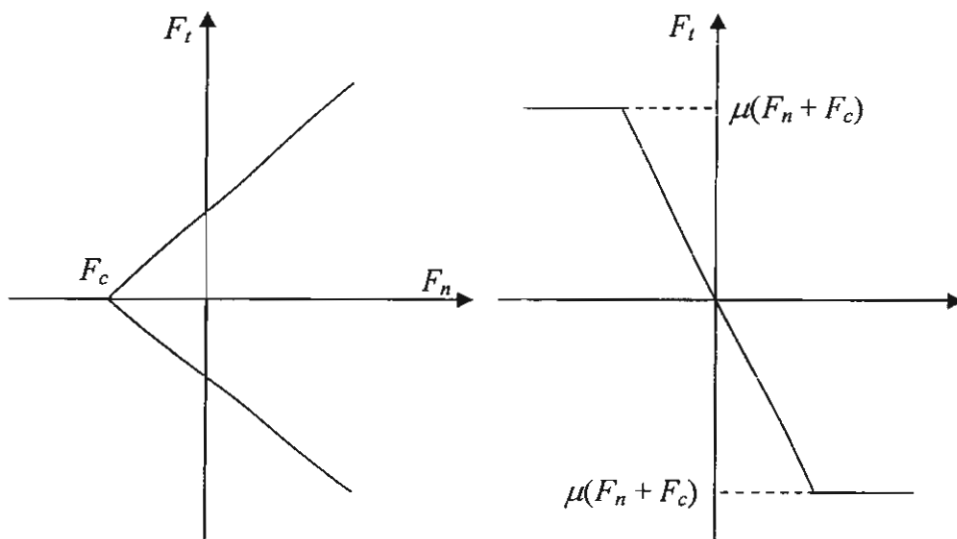


Fig.2. Regularized Coulomb's law of friction with adhesion.

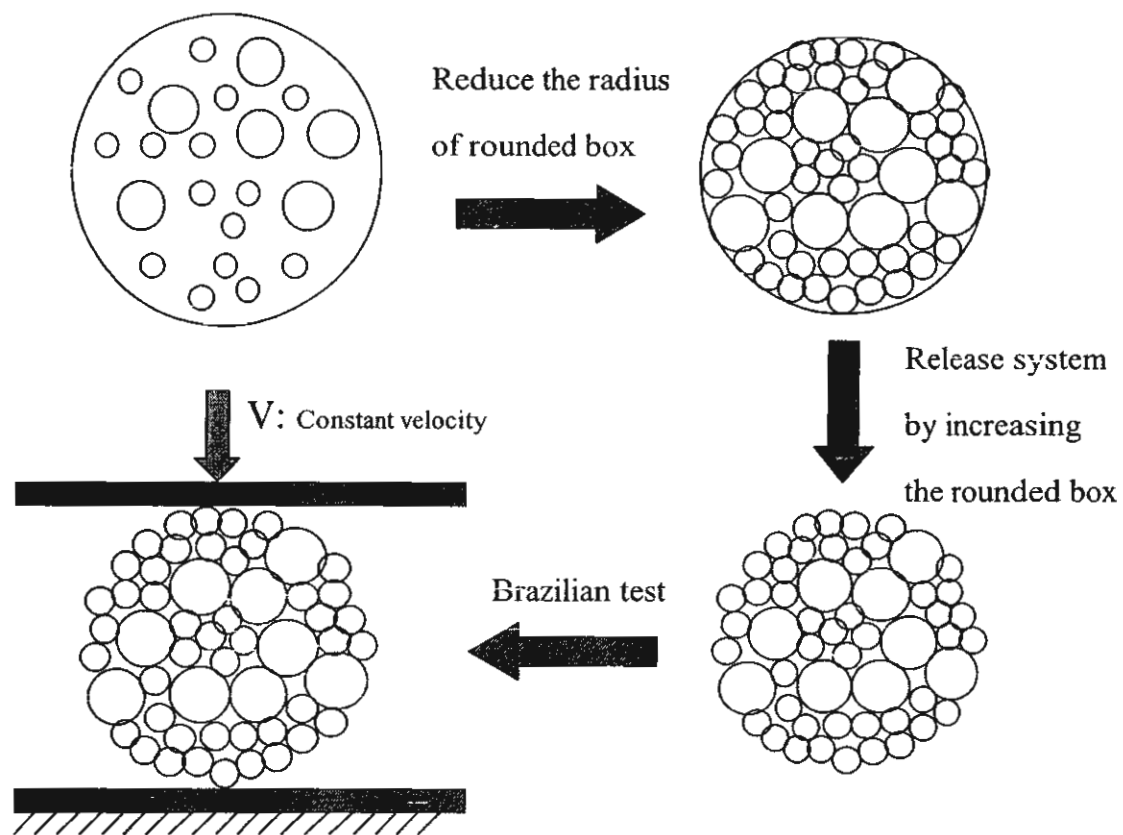


Fig.3. Sample preparation under stress by reduction of the rounded box radius and the Brazilian test scheme.

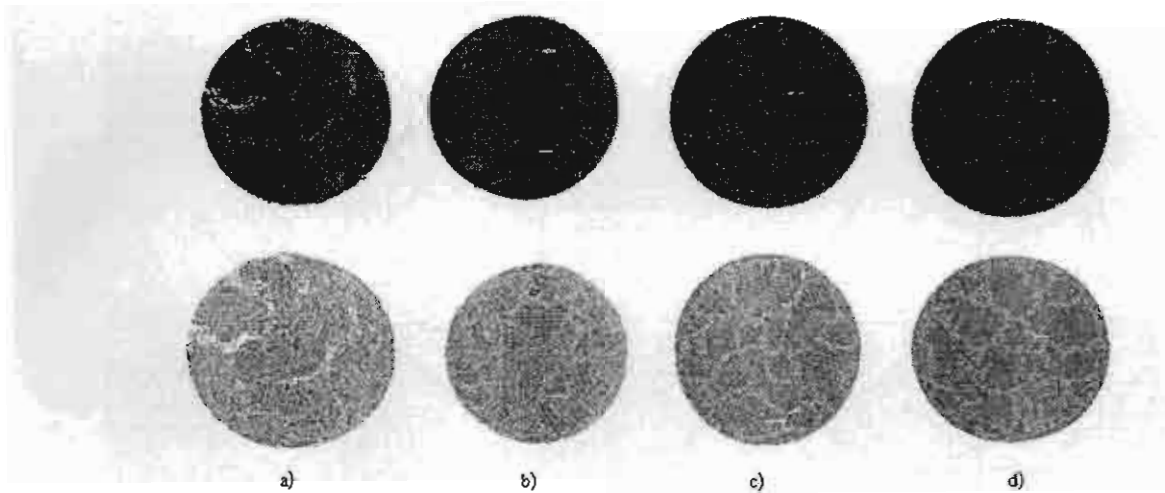


Fig. 4. In mono-disperse systems, (upper) local coordination number coded in greyscale (6 contacts in black, 5 in dark grey, 4 in bright grey and white for less than 4); (lower) normal contact force network of initial equilibrium state of sample with $\mu = 0.5$ for four different values of adhesion: $\gamma = k/150$ a), $\gamma = k/50$ b), $\gamma = k/20$ c) and $\gamma = k/7$ d). The compressive forces in contact are traced in black and the tensile forces in grey.

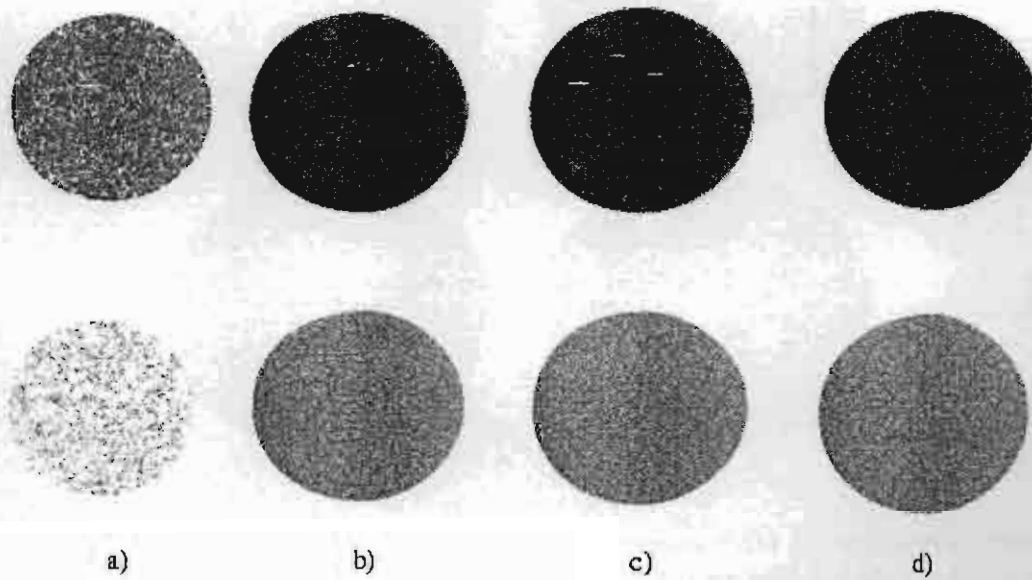


Fig. 5. In poly-disperse systems, (upper) local coordination number coded in greyscale (6 contacts in black, 5 in dark grey, 4 in bright grey and white for less than 4); (lower) normal contact force network of initial equilibrium state of sample with $\mu = 0.5$ for four different values of adhesion: $\gamma = k/150$ a), $\gamma = k/50$ b), $\gamma = k/20$ c) and $\gamma = k/7$ d). The compressive forces in contact are traced in black and the tensile forces in grey.

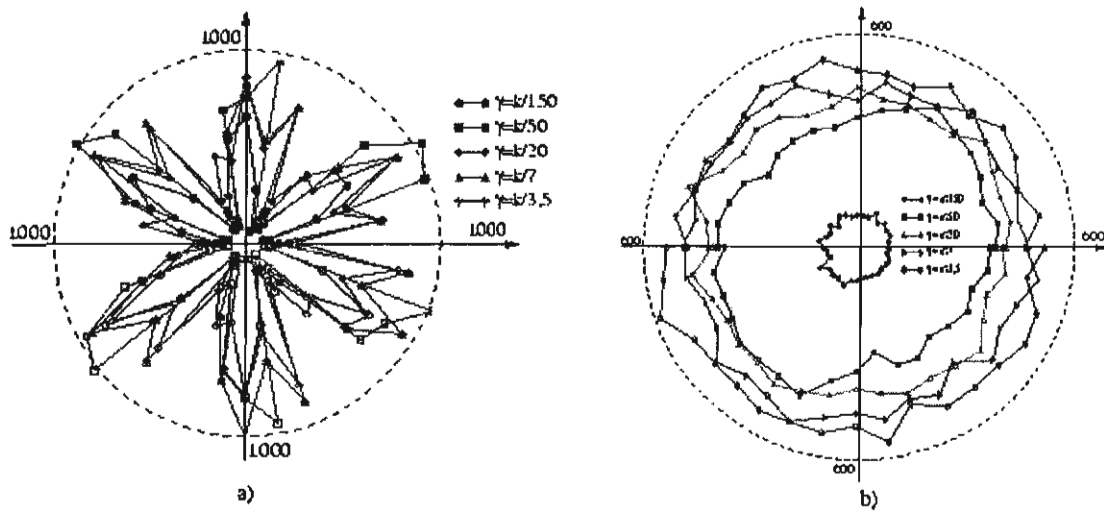


Fig.6. Polar diagram of the distribution of the number of contacts for repulsive (upper) and tensile (lower) contacts for (a) mono-disperse systems and (b) poly-disperse systems.

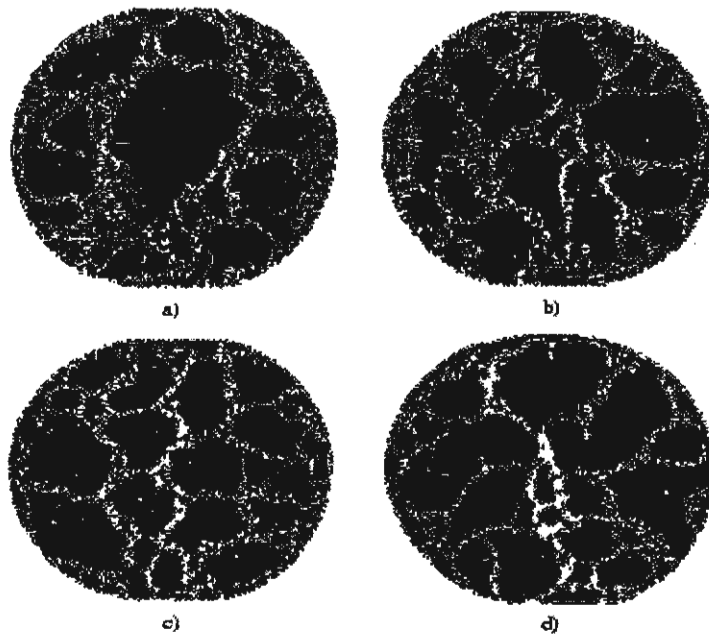


Fig.7. Configuration of the sample for mono-disperse systems at 5% of macroscopic stain for four values of adhesive energy: (a) $\gamma = k/150$, (b) $\gamma = k/50$, (c) $\gamma = k/20$ and (d) $\gamma = k/7$. The greyscale represents the coordination number: black for 6, dark grey for 5, bright grey for 4 and white for less than 4.

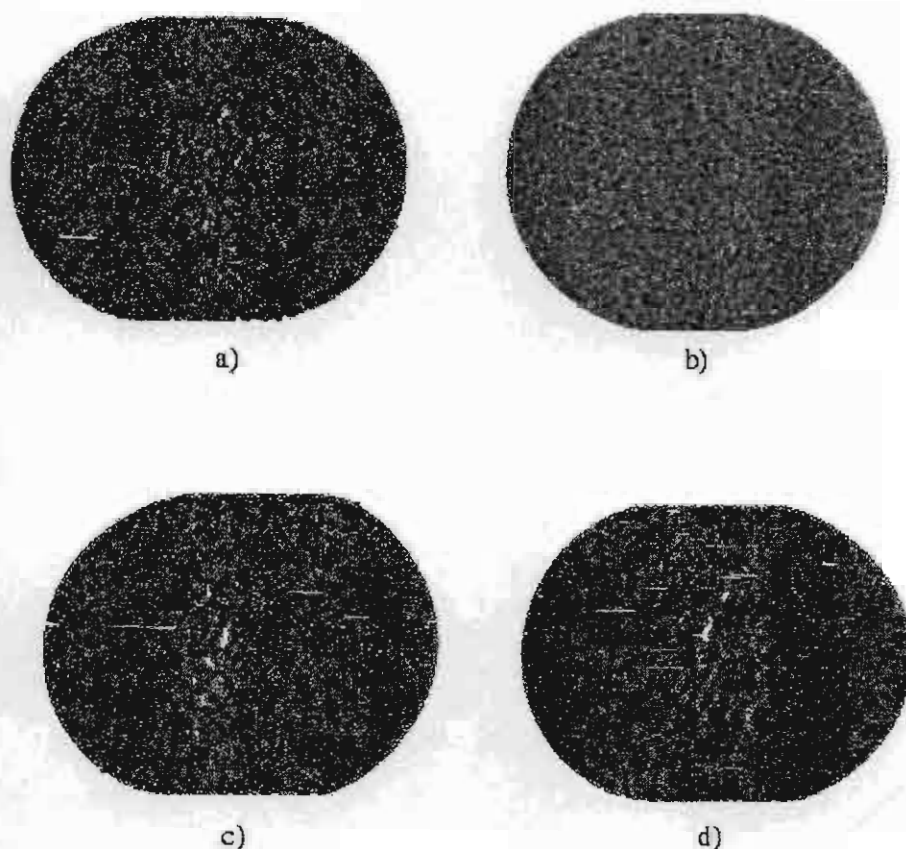


Fig.8. Configuration of the sample for poly-disperse systems at 10% of macroscopic strain for four values of adhesive energy: (a) $\gamma = k/20$, (b) $\gamma = k/10$, (c) $\gamma = k/7$ and (d) $\gamma = k/3.5$. The greyscale represents the coordination number: black for 6, dark grey for 5, bright grey for 4 and white for less than 4.

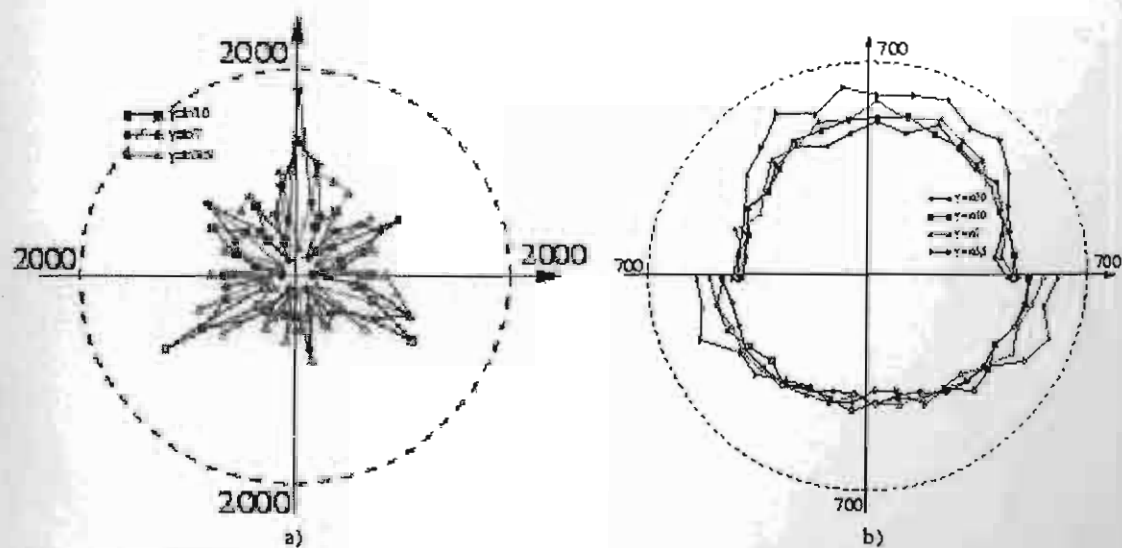


Fig.9. Polar diagram of the distribution of the number of contacts at 10% of macroscopic strain for repulsive (upper) and tensile (lower) contacts for (a) mono-disperse systems and (b) poly-disperse systems.