

В. Д. Чепеленкова^{1,2}, В. В. Лисица³*

Численная оценка влияния дефектов упаковки материалов на их прочностные свойства на основе метода дискретных элементов

¹ Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Российская Федерация

² Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация

³ Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН,
г. Новосибирск, Российская Федерация

* e-mail: v.chepelenkova@g.nsu.ru

Аннотация. Сорбенты на основе оксида кальция используются для улавливания и хранения углекислого газа, однако имеют свойство терять сорбционную емкость при их использовании. Увеличение исходного объема пор для предотвращения этой проблемы влечет потерю прочности материала, что приводит к необходимости определения зависимости прочностных характеристик сорбента от исходного количества пор. В работе приведена программная реализация алгоритма, основанного на методе дискретных элементов, учитывающая результат процесса спекания частиц оксида кальция. Полученная модель использована при исследовании зависимости модуля Юнга заданного материала и его прочности на сжатие от количества дефектов в упаковке образца. Показано, что модуль Юнга является линейной функцией от пористости материала, тогда как прочность имеет от нее логарифмическую зависимость.

Ключевые слова: метод дискретных элементов, одноосное нагружение, пористый материал

V. D. Chepelenkova^{1,2}, V. V. Lisitsa³*

DEM-based numerical estimation of the effect of packing defects on strength properties of the material

¹ Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation

² Sobolev Institute of Mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

³ Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

* e-mail: v.chepelenkova@g.nsu.ru

Abstract. CaO sorbents are used to capture and store carbon dioxide, but tend to lose their sorption capacity when using them. The possible solution of this problem includes an increase in the initial pore volume but leads to the problem of a loss of material strength. Hence there is a need to determine the dependence of strength characteristics of the sorbent on the initial number of pores. This work presents a software implementation of an algorithm based on the discrete element method, taking into account the result of the sintering process of calcium oxide particles. The resulting model was used to study the dependence of the Young's modulus of a given material and its compressive strength on the number of packing defects in a specimen. It is shown that the Young's modulus is a linear function of the porosity of the material, while the strength depends logarithmically on it.

Keywords: discrete element method, uniaxial loading, porous material

Введение

Одним из наиболее значимых факторов влияния человеческой деятельности на глобальное потепление является парниковый эффект, создаваемый выбросом в атмосферу углекислого газа. Негативное воздействие эмиссии CO_2 может быть уменьшено улавливанием и дальнейшим хранением этого газа с помощью сорбентов. Одним из подходящих для этого материалов является оксид кальция, обладающий высокой сорбционной емкостью, но в то же время теряющий ее в ходе циклов сорбции-десорбции за счет уменьшения доступной для реакции площади поверхности в результате спекания частиц [0, 0]. Способ решения этой проблемы предполагает увеличение начального объема порового пространства, что негативно сказывается на прочности получаемого материала, критичной при использовании в условиях высоких температуры и давления. Поэтому существует необходимость в определении оптимального дизайна сорбента с учетом сохранения достаточной прочности этого материала при минимальной потере сорбционной емкости. [0]

В данной работе представлена реализация метода дискретных элементов со связями в двумерной постановке для моделирования одноосного нагружения пористого материала. Кроме того, произведена модификация метода, позволяющая учесть результат спекания сорбентов. Для полученной модели проведена серия численных экспериментов по изучению влияния дефектов упаковки материала на его модуль Юнга и прочность на сжатие.

Методы и материалы

Согласно методу дискретных элементов, материал разбивается на совокупность отдельных частиц, взаимодействующих между собой в соответствии с законами классической механики. Каждая частица характеризуется своим положением в пространстве \vec{r}_i , скоростью \vec{v}_i , радиусом R_i , и массой m_i . Частицы могут попарно пересекаться (рис. 1), при этом область пересечения имеет размер $\delta = R_i + R_j - \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$. В таком случае формируется плоскость контакта, относительно которой можно разложить силу \vec{f}_{ij} , действующую между частицами i и j , на нормальную и касательную компоненты, т.е. $\vec{f}_{ij} = f_{ij}^n \vec{n}_{ij} + f_{ij}^t \vec{t}_{ij}$, где $\vec{n}_{ij} = (\vec{r}_i - \vec{r}_j) / \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$ — вектор единичной нормали к плоскости контакта, \vec{t}_{ij} — касательный вектор, лежащий в этой плоскости.

В таком случае траектория движения i -ой частицы является решением обыкновенного дифференциального уравнения

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = m_i \vec{g} + \sum_{j \in J(i)} (f_{ij}^n \vec{n}_{ij} + f_{ij}^t \vec{t}_{ij}) - \gamma \vec{v}_i,$$

где $J(i)$ — множество всех частиц, взаимодействующих с частицей i , γ — коэффициент вязкости, добавленной в систему искусственно для диссипации энергии

гии. Для упрощения изложения далее индексы ij , относящиеся к паре частиц, будут опущены.

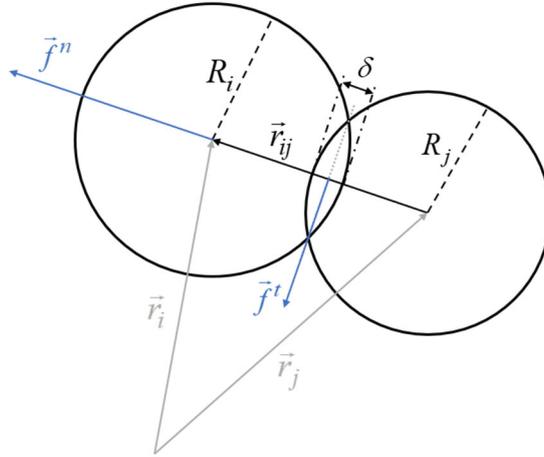


Рис. 1. Разложение сил на компоненты в методе дискретных элементов

В работе используется модификация метода дискретных элементов, позволяющая учитывать зависимость прочности соединения частиц от их начального пересечения δ_0 . Для этого компонента силы, действующая по каждому из направлений, разделена на две части, т.е., где жесткости k^n, k^t отвечают непосредственно за взаимодействие частиц, а \bar{k}^n, \bar{k}^t соответствуют поведению цемента, их связывающего.

В таком случае компоненты силы взаимодействия между частицами описываются формулами

$$f^n = \begin{cases} (k^n + \bar{k}^n)(\delta - \delta_0), & \delta - \delta_0 > 0, \\ -(k^n + \bar{k}^n)|\delta - \delta_0|, & -d_{crit} < \delta - \delta_0 < 0, \\ 0, & \delta - \delta_0 < -d_{crit}, \end{cases}$$

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

где μ — коэффициент трения, $\vec{f}_0^t = -k^t \vec{\xi}$ — тестовая сила, $\vec{\xi}$ — относительное смещение частиц в плоскости контакта, вычисляемое итеративно, т.е. равное

нулю в момент начала контакта и увеличиваемое на величину $\tau \vec{v}^t$ с каждым шагом по времени τ . При нарушении условия

$$\max \left\{ \delta, \left\| \vec{\xi} \right\| \right\} < d_{crit}$$

связь между частицами рвется, после чего устанавливаются значения $d_{crit} = 0$, $\vec{\xi} = -\mu_d f^n / k^t \cdot \vec{f}_0^t / \left\| \vec{f}_0^t \right\|$, и в дальнейшем частицы взаимодействуют с кулоновским трением.

Жесткости, соответствующие цементу между частицами, выражаются из деформации области, выделенной на рис. 2 и имеющей модуль Юнга E и модуль сдвига G , как

$$\bar{k}^n = \frac{EL(\delta_0)}{R_i + R_j - \delta_0}, \quad \bar{k}^t = \frac{GL(\delta_0)}{R_i + R_j - \delta_0},$$

где длина этой области задается формулой

$$L(\delta_0) = 2\sqrt{R_i^2 - \left(R_i - \frac{\delta_0}{2}\right)^2}.$$

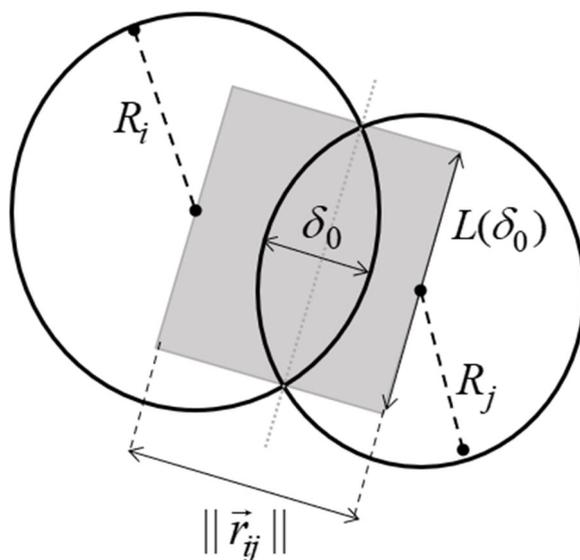


Рис. 2. Деформируемая область.

Процесс моделирования состоит из генерации упаковки частиц с помощью алгоритма Любачевского-Стиллинджера [0, 0], удаления из образца заданного количества случайно выбранных элементов и последующего этапа одноосного

нагружения полученного материала, в ходе которого компоненты тензора напряжений согласно формуле [0]

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{2\sum_{p=1}^N V^p} \sum_{p=1}^N \sum_{q \in J(p)} (r_i^{c,pq} f_j^{pq} + r_j^{c,pq} f_i^{pq}),$$

где $r_i^{c,pq}$ — положение точки контакта частиц p и q , V^p — объем частицы p , N — количество частиц в материале. Соответствующие деформации вычисляются как $\varepsilon = \Delta y / y_{max}$, где y_{max} соответствует наиболее высокой точке на образце.

Измеряемые в работе модуль Юнга E и прочность на сжатие σ_{lim} вычисляются по получаемым диаграммам напряжения-деформации как угол наклона линейной части и максимальное напряжение на данной диаграмме соответственно.

Результаты

Для проведения численных экспериментов были подготовлены образцы с одинаковыми свойствами, содержащие около 5.5 тысяч частиц каждый и имеющие от 0 до 15% дефектов в упаковке. Для каждого из таких образцов вычислена итоговая пористость материала. Вид полученных образцов приведен на рис. 3.

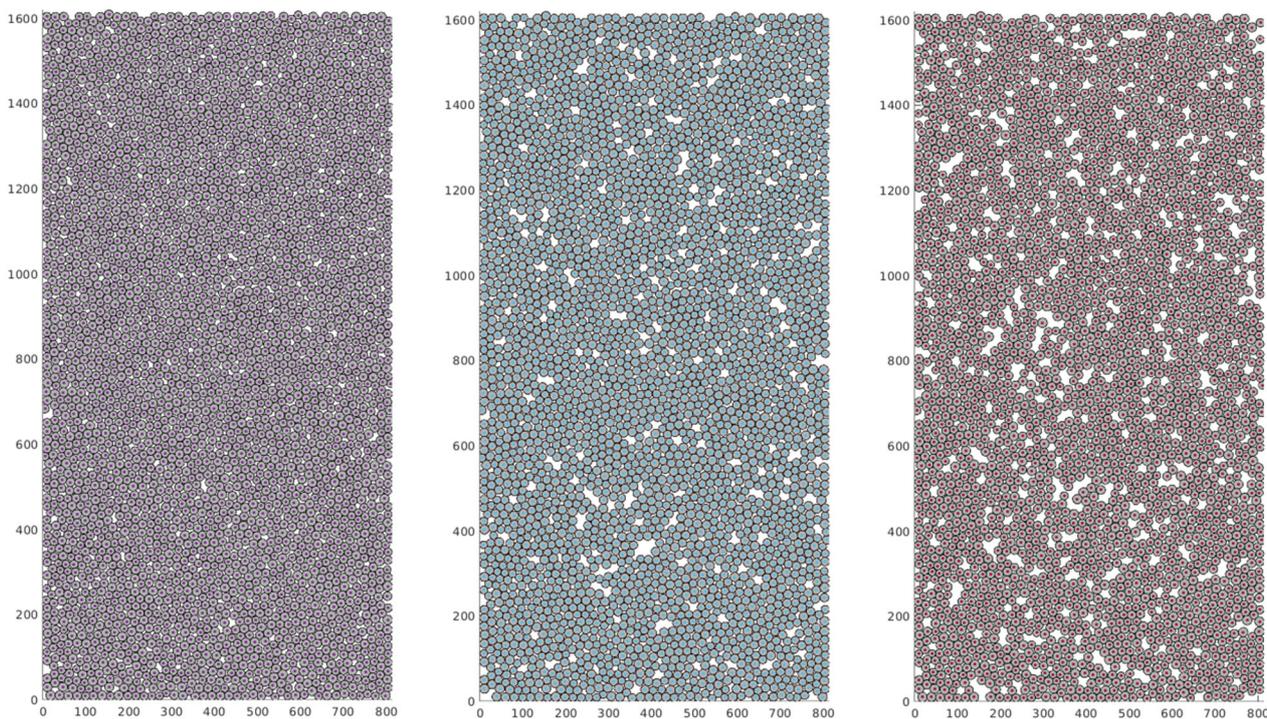


Рис. 3. Образцы, содержащие 0%, 5% и 10% дефектов (слева направо)

Метод дискретных элементов использует случайные величины в качестве радиусов частиц и потому требует проведения набора численных экспериментов для каждой отдельной комбинации входных параметров. В данной работе проводилось по десять экспериментов, для которых вычислялась средняя диаграмма напряжения-деформации, и по ней определялись интересные характеристики. Диаграммы, полученные по проведенным расчетам, показаны на рис. 4.

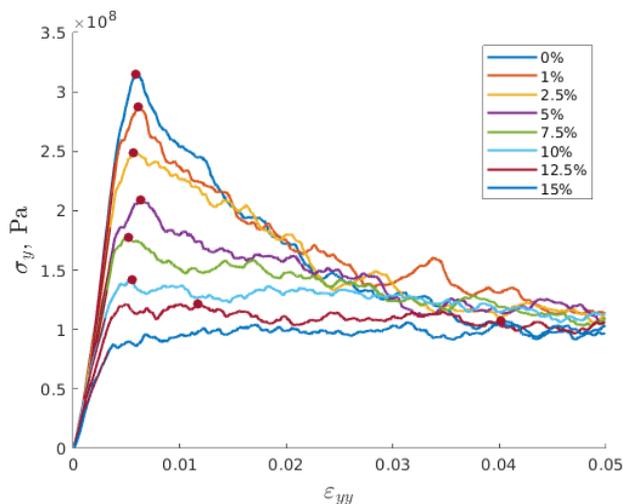


Рис. 4. Диаграммы напряжения-деформации для различных процентных соотношений дефектов упаковки (красным маркером отмечены предельные нагрузки)

Обсуждение

Рис 5 и 6 иллюстрируют значения модуля Юнга и прочности на сжатие в зависимости от пористости и полученные для них аппроксимации. При исследовании модуля Юнга выявлена линейная зависимость от количества дефектов в упаковке с относительной ошибкой в 4.7%. Результаты для прочности позволяют сделать вывод о логарифмической зависимости, ошибка при этом составила 2.1%.

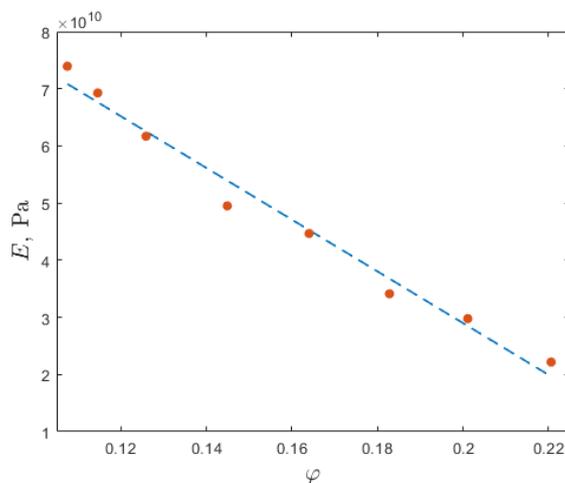


Рис. 5. Зависимость модуля Юнга от пористости (красным маркером отмечены полученные значения, синим пунктиром проведена аппроксимирующая функция).

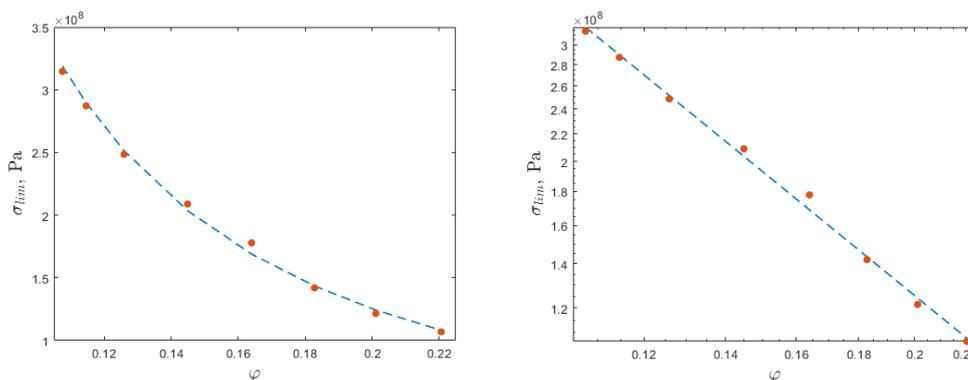


Рис. 6. Зависимость прочности на сжатие от пористости (красным маркером отмечены полученные значения, синим пунктиром проведена аппроксимирующая функция)

Заключение

В данной работе приведены результаты исследования влияния количества дефектов в упаковке Любачевского-Стиллингера для метода дискретных элементов на модуль Юнга моделируемого материала и его прочность в тестах на одноосное сжатие. Получена линейная зависимость от пористости упакованного образца от модуля Юнга и логарифмическая для прочности на сжатие.

Данные результаты позволяют оценивать прочность темплатных сорбентов на основе СаО в зависимости от процентного содержания темплата, что дает возможность перейти к предсказательному моделированию и определению оптимального дизайна сорбента.

Благодарности

В. Чепеленкова реализовала алгоритм моделирования и провела численные эксперименты с использованием кластера Суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета в рамках проекта РНФ 21-71-20003. В. Лисица провел анализ результатов в рамках работ по гос. заданию FWZZ-2022-0022.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Liu W., Low N. W., Fen B., Wan G., Diniz da Costa J. C. Calcium precursors for the production of CaO sorbents for multicycle CO₂ capture // Environmental science & technology. – 2010. – Vol. 44. – №. 2. – P. 841-847.
2. Derevschikov V., Semeykina V., Bitar J., Parkhomchuk E., Okunev, A. Template technique for synthesis of CaO-based sorbents with designed macroporous structure // Microporous and Mesoporous Materials. – 2017. – Vol. 238. – P. 56-61.
3. Bazaikin Y. V., Malkovich E. G., Prokhorov D. I., Derevschikov V. S. // Separation and Purification Technology. – 2021. – Vol. 255. – Article 117746.
4. Lubachevsky B. D., Stillinger F. H. Geometric properties of random disk packings // Journal of statistical Physics. – 1990. – Vol. 60. – P. 561-583.
5. Lubachevsky B. D. How to simulate billiards and similar systems // Journal of Computational Physics. – 1991. – Vol. 94. – №. 2. – P. 255-283.
6. Potyondy D. O., Cundall P. A. A bonded-particle model for rock // International journal of rock mechanics and mining sciences. – 2004. – Vol. 41. – №. 8. – P. 1329-1364.

© В. Д. Чепеленкова, В. В. Лисица, 2023