

ГЕОМЕТРИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕРХНІ ПІСЛЯ ДЕФОРМАЦІЇ З УРАХУВАННЯМ ПОТЕНЦІАЛУ ВЗАЄМОДІЇ ЧАСТОК

Охотська О.В

Національний технічний університет

«Харківський політехнічний інститут», м. Харків

В роботі розглядаються різновиди потенціалів взаємодії часток в геометричному моделюванні з ціллю визначення найбільш практично використовуваного в розрахункових роботах. Потенціал взаємодії в геометричному моделюванні відіграє таку ж роль, що і визначальні рівняння у механіці суцільного середовища. Проте структура потенціалу є значно простішою, ніж у визначальних рівнянь, тому що він представляє собою скалярну функцію відстані, в той час як визначальні рівняння представляють собою оператори, до яких входять тензорні характеристики напруженого стану та деформування, а також термодинамічні величини. Конкретний вид потенціалу взаємодії часток визначається з порівняння механічних властивостей комп'ютерного та реального матеріалів. Для найпростіших характеристик, таких як, наприклад, пружні модулі, це порівняння може бути проведено аналітично. В інших же випадках відповідність встановлюється на основі комп'ютерних експериментів. Для усіх найпростіших потенціалів взаємодії, таких як потенціал Ленарда-Джонса, Мі, Морзе и др., основна властивість полягає в тому, що при наближенні ($r < a$) частки відштовхуються, при віддаленні ($r > a$) – притягуються, причому при значному віддаленні ($r > 2a$) потенціал та сила взаємодії наближуються до нуля. Часто виникає необхідність змінити ступінь дальності потенціалу, зберігши при цьому його основні властивості. Для цього може використовуватися наступний модифікований потенціал. Модифікований потенціал, що отриманий з потенціала Морзе, є потенціалом Морзе зі зміненим значенням $k = \alpha k_0$. Модифікований потенціал, що отриманий з потенціала Ленарда-Джонса при $k = \alpha/6$, еквівалентний щодо потенціала Морзе, який визначається параметром α . Таким чином, використання модифікованого потенціала дозволяє узагальнити взаємодію Ленарда-Джонса, зробивши його трипараметричним, по аналогії з потенціалом Морзе. Для прискорення чисельних розрахунків доводиться обмежувати взаємодію часток деяким радіусом обрізання потенціала.