

ГЕОМЕТРИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕРХНІ З УРАХУВАННЯ ПОТЕНЦІАЛУ ВЗАЄМОДІЇ ЧАСТОК

Охотська О.В.

*Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»,
м. Харків*

Потенціал взаємодії часток в геометричному моделюванні може відігравати 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, і дозволяє моделювати будь-які фізичні властивості матеріалу, що приведе до спрощення розрахунків під час моделювання.

У попередніх дослідженнях за основу беруться континуальні рівняння суцільного середовища. За своєю суттю ці методи є континуальними, дискретність в них чисто обчислювальна. Метод, що розглядається в даній роботі, відрізняється тим, що в ньому за основу беруться рівняння руху самих, що визначаються балансом кількості руху і потенціалом взаємодії між частками, тобто даний метод є істинно дискретним .

Для спрощення отриманих рівнянь пружної деформації ниті необхідно розглянути та обрати найбільш відповідний до цілей та задач дослідження сплайновий потенціал, що зможе замінити значну кількість використаних коефіцієнтів властивостей матеріалу.

Розглянемо сукупність однакових часток, що взаємодіють за допомогою потенціалу Ленарда-Джонса. Для визначення всіх параметрів моделі достатньо вибрати три основні розмірні величини – базові значення маси, відстані та часу. Решта розмірних величин можуть бути визначені через них та безрозмірні коефіцієнти. Подальше уточнення моделі може бути таким чином виконане вибором потенціалу взаємодії таким чином, щоб безрозмірні параметри, що описують його, дозволяли добитися потрібних значень безрозмірних макроскопічних параметрів моделюемого матеріалу, наприклад, таких як відношення модуля Юнга до межі міцності и др. Вказаний вибір в найбільш простих випадках може виконуватися аналітично, в більш складних він потребує проведення тестових комп'ютерних експериментів.