

บทที่ 2

หลักการและทฤษฎี

ในบทนี้จะเป็นการนำเสนอทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับงานวิจัยสำหรับการศึกษาพฤติกรรมทางกลศาสตร์ของวัสดุเมื่อดำเนินการจำลองทางคอมพิวเตอร์ด้วยวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุล ซึ่งทฤษฎีของวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุลและทฤษฎีที่เกี่ยวข้องนี้จะกล่าวถึงในหัวข้อถัดไป

2.1 หลักการของระเบียบวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุล (Molecular Dynamics)

หลักการของระเบียบวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุลนี้จะใช้ศึกษาคุณสมบัติและพฤติกรรมของวัสดุเมื่อดำเนินการจำลองทางคอมพิวเตอร์ด้วยวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุล วิธีการนี้มีหลักการในการคำนวณค่าของการเคลื่อนที่หรือตำแหน่งของอนุภาคด้วยพื้นฐานสมการการเคลื่อนที่จากกฎของนิวตันที่ทำการกระจายด้วยวิธีผลต่างอันดับ (Finite Difference) ซึ่งการคำนวณค่าตำแหน่ง (r), ความเร็ว (v) และความเร่ง (a) ของอนุภาคนั้นประกอบไปด้วย 3 ขั้นตอนหลักๆคือ ขั้นตอนแรกเป็นการประมาณค่าตำแหน่ง, ความเร็ว, และความเร่งของอนุภาค และในอันดับที่สูงขึ้นไปทีละเวลา $t + \Delta t$ ของแต่ละช่วงเวลานั้นๆ ดังนี้ (M.P. Allen and D.J. Tildesley, 1989)

$$\begin{aligned}r(t + \Delta t) &= r(t) + \Delta t v(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 a(t) + \frac{1}{6} \Delta t^3 b(t) + \dots \\v(t + \Delta t) &= v(t) + \Delta t a(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 b(t) + \dots \\a(t + \Delta t) &= a(t) + \Delta t b(t) + \dots \\b(t + \Delta t) &= b(t) + \dots\end{aligned}\tag{2.1}$$

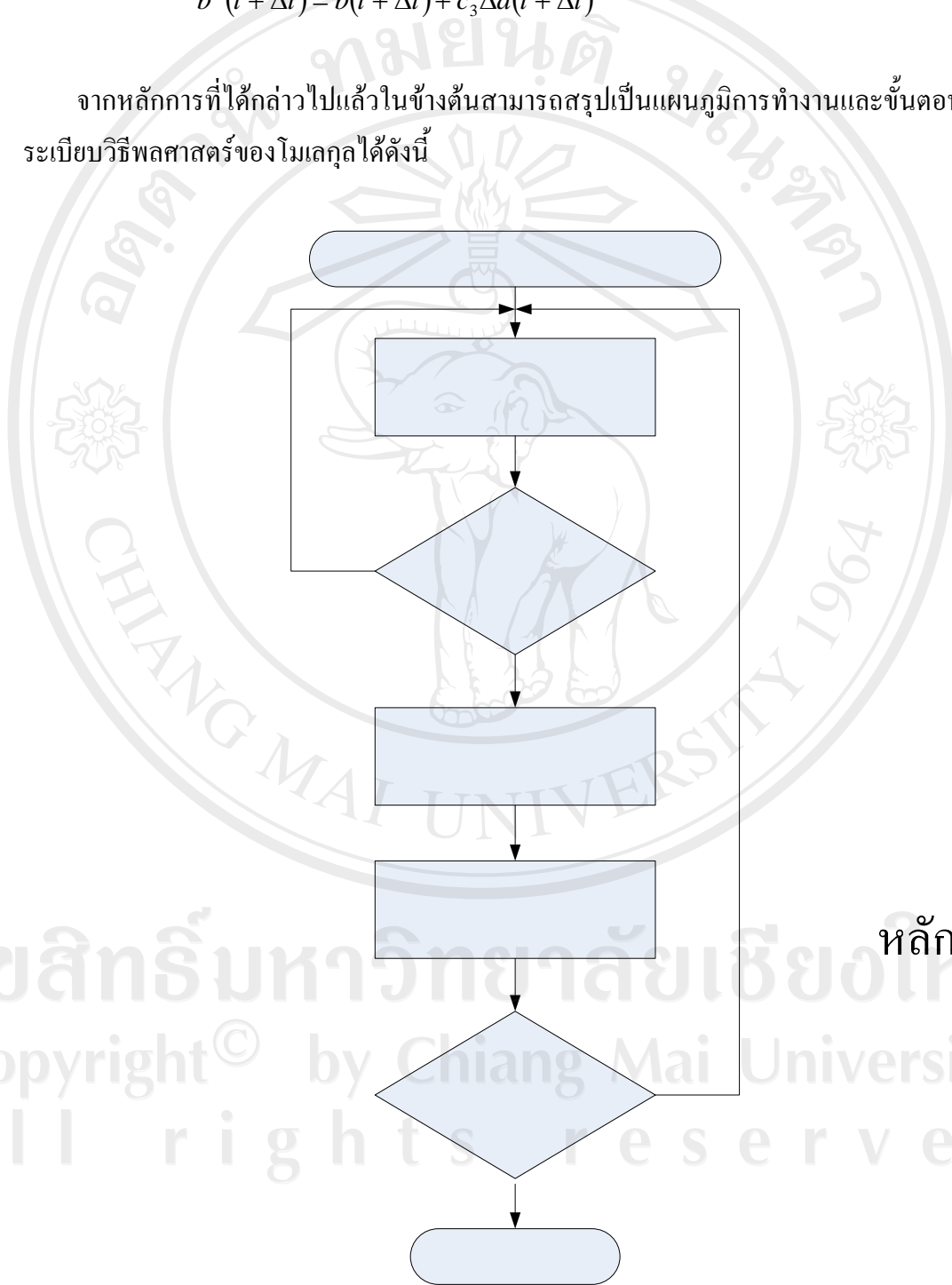
หลังจากได้ค่าที่ประมาณหรือค่าที่คาดการณ์ไว้ ค่าเหล่านี้จะถูกนำไปใช้ในการคำนวณหาค่าแรงสัมผัสระหว่างอนุภาค $f = f(r, v)$ ของแต่ละอนุภาค ค่าแรงสัมผัสระหว่างอนุภาคนั้นจะได้จากแบบจำลองของแรงระหว่างอนุภาคที่สัมผัสกันหรือแรงระยะไกล (Body Force) เพื่อนำไปคำนวณค่าความเร่งของอนุภาคแต่ละอนุภาค ($a_i = f_i / m_i$) ซึ่งเป็นค่าความเร่งจากการคำนวณคือ $a^c(t + \Delta t)$ และขั้นตอนสุดท้ายเป็นการแก้ไขค่าความเร่งที่ได้ประมาณค่าและคำนวณไว้ดังนี้

$$\Delta a(t + \Delta t) = a^c(t + \Delta t) - a(t + \Delta t)\tag{2.2}$$

แล้วนำค่าความเร่งที่ได้รับการแก้ไขนี้ไปแก้ไขค่าตำแหน่ง, ความเร็ว, ความเร่ง และค่าในอันดับที่สูงขึ้นของแต่ละอนุภาคด้วยค่าสัมประสิทธิ์ของเกียร์ โดยใช้สัญลักษณ์ c_0, c_1, c_2, \dots สมการของการแก้ไขเป็นดังนี้

$$\begin{aligned}
 r^c(t + \Delta t) &= r(t + \Delta t) + c_0 \Delta a(t + \Delta t) \\
 v^c(t + \Delta t) &= v(t + \Delta t) + c_1 \Delta a(t + \Delta t) \\
 a^c(t + \Delta t) &= a(t + \Delta t) + c_2 \Delta a(t + \Delta t) \\
 b^c(t + \Delta t) &= b(t + \Delta t) + c_3 \Delta a(t + \Delta t)
 \end{aligned}
 \tag{2.3}$$

จากหลักการที่ได้กล่าวไปแล้วในข้างต้นสามารถสรุปเป็นแผนภูมิการทำงานและขั้นตอนของระเบียบวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุลได้ดังนี้



หลักการของระเบียบวิธี

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
 Copyright © by Chiang Mai University
 All rights reserved
 คาดการณ์
 และคว

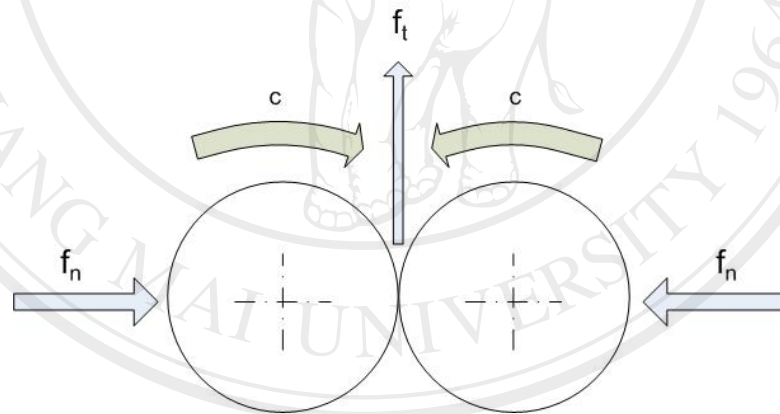
รูป 2.1 แผนภูมิการทำงานของระเบียบวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุล

จากหลักการและแผนภูมิที่ได้กล่าวไปแล้วข้างต้นสามารถสรุปเป็นขั้นตอนได้ดังนี้

1. คำนวณตำแหน่ง ความเร็ว และความเร่ง ของแต่ละอนุภาคที่เวลา $t + \Delta t$ โดยใช้ค่าต่างๆที่เวลา t
2. คำนวณหาแรงที่สัมผัสกันระหว่างอนุภาคและทำการเปลี่ยนเป็นค่าความเร่งของแต่ละอนุภาคเป็นค่าความเร่งที่ได้จากการคำนวณ ($a_i = f_i / m_i$)
3. ทำการแก้ไขตำแหน่ง ความเร็ว และความเร่งของแต่ละอนุภาคที่ได้จากการคำนวณไว้จากข้อ 1 ด้วยค่าความเร่งใหม่ที่ได้จากการคำนวณ

2.2 แบบจำลองของแรงระหว่างอนุภาค (Contact Force Model)

พิจารณาอนุภาคกลม 2 อนุภาคกลมที่สัมผัสกัน แรงสัมผัสที่เกิดขึ้นระหว่างอนุภาคทั้งสองโดยทั่วไปจะประกอบด้วยแรงใน 3 องค์ประกอบคือ แรงสัมผัสตั้งฉากระหว่างอนุภาค, แรงเสียดทานระหว่างอนุภาค และแรงคู่ควบ (Couple) ดังรูป 2.2



รูป 2.2 แรงต่าง ๆ ในการกระทบกันระหว่างอนุภาคทรงกลมทั้งสอง

เมื่อ f_n คือแรงสัมผัสตั้งฉากระหว่างอนุภาค, f_t คือแรงเสียดทานระหว่างอนุภาค และ c คือแรงต้านทานการหมุน (คู่ควบ)

ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงแบบจำลองของแรงสัมผัสตั้งฉากสัมผัสระหว่างอนุภาคที่นำมาประยุกต์ใช้ทั้งวัสดุเม็ดแบบแข็ง (Non - Cohesion) และวัสดุเม็ดแบบเปียกหรือโคเฮชัน (Cohesion) ซึ่งแบบจำลองของแรงสัมผัสตั้งฉากที่ใช้ในการศึกษาพฤติกรรมของวัสดุเม็ดมีอยู่หลายแบบจำลองด้วยกัน อาทิเช่น แบบจำลองสปริง-แดชพอตเชิงเส้น (Linear Spring-Dashpot),

แบบจำลอง DMT, แบบจำลองจากทฤษฎีของเฮิร์ตซ์ และแบบจำลองจากทฤษฎีของ JKR (Johnson-Kendall-Robert Theory) เป็นต้น

แบบจำลองของแรงสัมผัสตั้งฉากสัมผัสระหว่างอนุภาคแห้งหรือวัสดุเม็ดที่ไม่เกิดผลของโคเฮชันประกอบไปด้วยแรงเฉล (Impulsive Force, N^+) ซึ่งเป็นแรงต้านทานการเสียดรูปหรือต้านทานการเหลื่อมกันระหว่างอนุภาค และแรงหนืด (Viscous Force) ที่เป็นแรงที่คำนึงถึงผลของแรงทางพลศาสตร์ (Dynamics Effect) แรงเฉลที่นิยมใช้กันโดยทั่วไปมีอยู่ 2 แบบคือ แรงเฉลแบบแปรผันเชิงเส้นและแรงเฉลจากทฤษฎีของเฮิร์ตซ์ แรงเฉลแบบแปรผันเชิงเส้นจะแปรผันตรงกับระยะเหลื่อม (δ) อยู่ในรูปความสัมพันธ์ดังนี้ (F. Radjaï et al., 2000)

$$N^+ \propto \delta \quad (2.4)$$

ในส่วนของแรงเฉลแบบแปรผันเชิงเส้นและแรงเฉลจากทฤษฎีของเฮิร์ตซ์จะมีค่าดังนี้

$$N^+ = k\delta^n \quad (2.5)$$

โดยที่ k คือ ค่าความแข็งของผิวอนุภาค

เมื่อใช้แรงเฉลแบบแปรผันเชิงเส้น n จะมีค่าเท่ากับ 1 จะได้สมการดังนี้

$$N^+ = k\delta \quad (2.6)$$

เมื่อใช้แรงเฉลจากทฤษฎีของเฮิร์ตซ์ n จะมีค่าเท่ากับ 3/2 จะได้สมการดังนี้

$$N^+ = k\delta^{3/2} \quad (2.7)$$

นำแรงเฉลแบบแปรผันเชิงเส้นมารวมกับแรงหนืดที่แปรผันตรงกับอนุพันธ์อันดับหนึ่งเทียบกับเวลา ($\dot{\delta}$) จะได้แรงสัมผัสตั้งฉากสำหรับวัสดุแห้ง เรียกว่าแบบจำลองสปริง-แดชพอดเชิงเส้น ดังนี้

$$f_n = -k\delta - \alpha\dot{\delta} \quad (2.8)$$

โดยที่ α คือ ค่าสัมประสิทธิ์ความหนืด และ f_n คือ แรงระหว่างผิวสัมผัสในทิศทางตั้งฉาก

จากแรงเฉลโดยทฤษฎีของเฮิร์ตซ์ เมื่อนำรวมเข้ากับแรงหนืดที่แปรผันตรงกับระยะเหลื่อมเทียบกับเวลาจะได้สมการดังนี้

$$f_n = -k\delta^{3/2} - \alpha\dot{\delta} \quad (2.9)$$

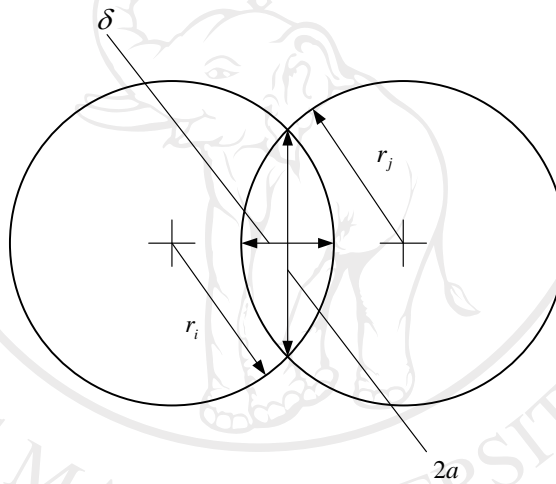
สำหรับงานวิจัยนี้ได้เลือกใช้แบบจำลองสปริง-แดชพอดเชิงเส้น เนื่องจากง่ายต่อการวิเคราะห์และเมื่อนำมาเปรียบเทียบกับทฤษฎีของเฮิร์ตซ์ ผลของแบบจำลองที่มีต่อพฤติกรรมของวัสดุเม็ดที่ใช้แบบจำลองสปริง-แดชพอดเชิงเส้น มีค่าแตกต่างโดยไม่มีนัยสำคัญ อีกทั้งแบบจำลองสปริง-แดชพอดเชิงเส้น นี้นิยมใช้ในการจำลองทางคอมพิวเตอร์แบบ 2 มิติ และในงานวิจัยนี้ได้นำแบบจำลองสปริง-แดชพอดเชิงเส้นรวมกับแรงสัมผัสตั้งฉากระหว่างอนุภาค 2 อนุภาคในวัสดุเม็ดที่เกิดผลของแรงแอดฮีซีฟ (Adhesive Force, N^-) โดยที่แรงแอดฮีซีฟนี้ใช้แนวคิดเดียวกันกับ I. Preechawuttipong et al., (2000) จะแปรผันตรงกับพื้นที่ของผิวสัมผัส

ระหว่างอนุภาค ดังรูป 2.3 ซึ่งเราสามารถแสดงให้เห็นว่าพื้นที่ของการสัมผัสระหว่างอนุภาคทั้งสองนั้นจะแปรผันตรงกับระยะเหลืออม ($2a \propto \sqrt{r\delta}$) โดยที่ $r = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j}$ แรงแอดเฮซีฟที่เลือกมาใช้จะมีความสัมพันธ์ดังนี้

$$N^- = \gamma\sqrt{r\delta} \quad (2.10)$$

โดยที่ γ คือ พลังงานแอดเฮชันที่ผิวสัมผัสของอนุภาคทั้งสอง และได้นำแนวคิดจากทฤษฎีของ JKR (Johnson, K.L et al., 1971) เกี่ยวกับแรงสัมผัสจากระหว่างอนุภาคทั้งสองคือผลรวมระหว่างแรงดลและแรงแอดเฮชัน

$$N = N^+ + N^- \quad (2.11)$$



รูป 2.3 การสัมผัสกันระหว่างอนุภาคทรงกลม 3 มิติและแบบ 2 มิติสำหรับ Disk

แรงสัมผัสตั้งฉากในรูปของความสัมพันธ์ของการขจัดสัมผัสหรือระยะเหลืออม δ และ δ' เป็นสมการดังนี้ (I. Preechawuttipong et al., 2000)

$$f_n = -k\delta - \alpha\delta' + \gamma\sqrt{r\delta} \quad (2.12)$$

ในที่นี้แบบจำลองตั้งสมการ (2.12) จะถูกอ้างอิงในชื่อ แรงแอดเฮชันสถิตฐาน (Geometrical Adhesion, GA)

2.3 แบบจำลองของแรงแอดเฮชันพื้นฐาน

แนวคิดเกี่ยวกับแรงสัมผัสของวัสดุเม็ดในงานวิจัยนี้จะมีข้อกำหนดดังนี้ กล่าวคือ

- แรงสัมผัสที่มีค่าเป็นบวก = แรงกดหรือแรงอัด (Compressive Force) ระหว่างอนุภาค
- แรงสัมผัสที่มีค่าเป็นลบ = แรงดึง (Tension) ระหว่างอนุภาค

เมื่อพิจารณาแรงแอดเฮชันพื้นฐานในกรณีสถิตยศาสตร์ ทำให้เกิดลักษณะเฉพาะจากการใช้แบบจำลองนี้คือ แรงสัมผัสตั้งฉากวิกฤตต่อแรงดึง (F_c) ซึ่งเป็นแรงต้านทานต่อแรงดึงสูงสุดที่อนุภาคยังคงสัมผัสกันได้มีค่าดังนี้

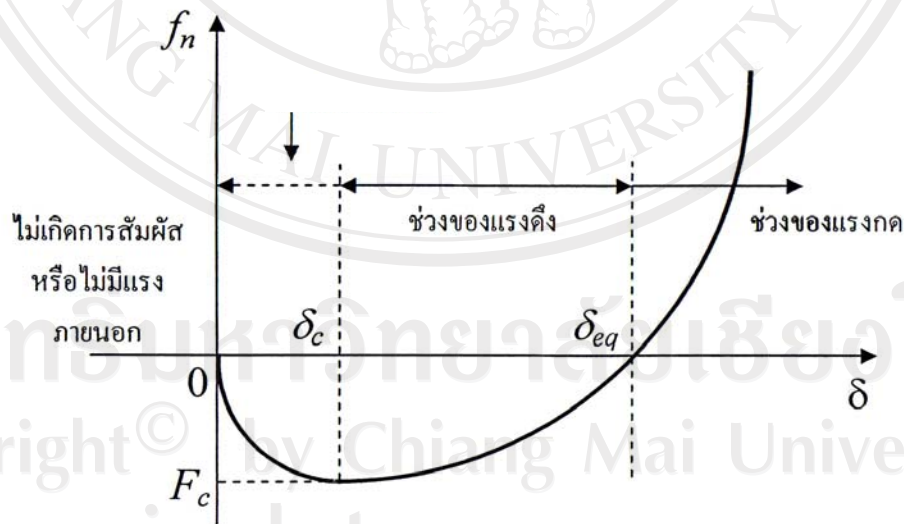
$$F_c = -\frac{r\gamma^2}{4k} \quad (2.13)$$

และแรงวิกฤตที่เกิดขึ้นนี้จะมีค่าการเลื่อนกันที่ตำแหน่งแรงดึงเริ่มต้น (δ_c) ดังนี้

$$\delta_c = \frac{r\gamma^2}{4k^2} \quad (2.14)$$

และตำแหน่งสมดุล (δ_{eq}) ระหว่างอนุภาคทั้งสองที่สัมผัสกันประกอบไปด้วยตำแหน่ง 2 ตำแหน่งคือ ตำแหน่งที่ไม่มีแรงภายนอกกระทำ และ ตำแหน่งที่แรงสัมผัสมีค่าเท่ากับ 0 ซึ่งมีค่าดังนี้

$$\delta_{eq} = \frac{r\gamma^2}{k^2} \quad (2.15)$$



รูป 2.4 แรงสัมผัสตั้งฉากในฟังก์ชันของระยะเลื่อนกันสำหรับแบบจำลอง GA

จากรูป 2.4 แสดงให้เห็นถึงช่วงของการเปลี่ยนแปลงของแรงสัมผัสตั้งฉากที่เป็นฟังก์ชันกับระยะเลื่อนกันสำหรับแบบจำลองแอดเฮชันพื้นฐาน ช่วงระยะเลื่อนระหว่าง 0 ถึง δ_c จะหมายถึง

การสัมผัสที่ไม่มีเสถียรภาพ กล่าวคือเป็นช่วงที่อนุภาคอาจไม่เกิดการสัมผัสกันหรืออาจเกิดการสัมผัสกันอย่างเบาบาง ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับแรงกระทำจากภายนอก และผิวสัมผัสระหว่างอนุภาคทั้งสองสามารถรับแรงดึงได้เมื่ออยู่ในช่วงระหว่าง δ_c ถึง δ_{eq} และจะรับแรงกดเมื่อระยะเหลื่อมมากกว่าช่วง δ_{eq}

2.4 คุณสมบัติของแบบจำลองของแรงแอตแทชันพื้นฐาน

เมื่อได้ค่าแรงสัมผัสตั้งฉากระหว่างอนุภาคทั้งสองจากสมการ (2.12) และได้นำกฎการเคลื่อนที่ข้อที่ 2 ของนิวตันมาประยุกต์ใช้ สามารถเขียนแบบจำลองของแรงแอตแทชันพื้นฐานให้อยู่ในรูปสมการอนุพันธ์อันดับที่ 2 ของระยะเหลื่อมได้ดังนี้ (I. Preechawuttipong et al., 2000)

$$m\ddot{\delta} + \alpha\dot{\delta} + k\delta - \gamma\sqrt{r\delta} = 0 \quad (2.16)$$

โดยที่ m คือ มวลลดส่วน (Reduced Mass) ของอนุภาคทั้งสองที่เกิดจากการสัมผัสซึ่งมีค่า $m = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ จากสมการ (2.16) สามารถแปลงค่า $\sqrt{\delta}$ ได้จากอนุกรมของเทเลอร์

(Taylor series), (E. Kreyszig., 1988) โดยกำหนดให้ $\delta_{eq} = \delta_0$ จะได้ $\sqrt{\delta} = \sqrt{\delta_0} + \frac{\delta - \delta_0}{2\sqrt{\delta_0}}$

และสามารถเขียนสมการการเคลื่อนที่ใหม่ได้ดังนี้

$$\ddot{\delta} + \frac{\alpha}{m}\dot{\delta} + \left[\frac{k}{m} - \frac{\gamma}{2m}\sqrt{\frac{r}{\delta_0}} \right] \delta = \frac{\gamma}{2m}\sqrt{r\delta_0} \quad (2.17)$$

โดยกำหนดให้ $\lambda = \frac{\alpha}{2m}$, $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$, $\omega_a^2 = \frac{\alpha}{2m}\sqrt{\frac{r}{\delta_0}}$, $\tilde{\gamma} = \frac{\gamma}{2m}\sqrt{r\delta_0}$ และกำหนดให้ $\delta(0) = 0$,

$\dot{\delta}(0) = v_0$ จะได้คำตอบของสมการที่น่าสนใจจากสมการ (2.17) คือ

$$\delta(t) = -\delta_0 e^{-\lambda t} \cos(\beta t) + \left(\frac{v_0 - \delta_0 \lambda}{\beta} \right) e^{-\lambda t} \sin(\beta t) + \delta_0 \quad (2.18)$$

เมื่อ $\lambda^2 + \omega_a^2 - \omega_0^2 < 0$, $\beta = \sqrt{\omega_0^2 - \omega_a^2 - \lambda^2}$ และเพื่อป้องกันการกollisionกันของอนุภาคหนึ่ง

กับอีกอนุภาคหนึ่งเมื่ออนุภาคทั้งสองกระทบกันภายใต้เงื่อนไข $k > \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\gamma}{2}\sqrt{\frac{r}{\delta_0}}$ ซึ่งเป็น

คำตอบทั่วไปของกรณีอันเดอร์แดมปีง (Underdamping)

2.4.1 ระยะเหลื่อมสูงสุด (Maximum Overlap)

ถ้าระยะเหลื่อมสูงสุดที่เกิดขึ้นนั้นสามารถทราบได้เมื่อความเร็วสัมพัทธ์เริ่มต้นของการกระทบกันระหว่างอนุภาค 2 อนุภาคเท่ากับ v_0 และที่เวลาของความเร็วสัมพัทธ์ $\delta'(t_m) = 0$

$$\delta'(t_m) = \delta_0 \beta \sin(\beta t_m) - \frac{\lambda v_0}{\beta} \sin(\beta t_m) + \frac{\delta_0 \lambda^2}{\beta} \sin(\beta t_m) + v_0 \cos(\beta t_m) \quad (2.19)$$

โดยที่ t_m คือ เวลาที่ความเร็วสัมพัทธ์มีค่าเป็น 0 โดยมีค่าดังนี้

$$t_m = \frac{1}{\beta} \arctan\left(\frac{v_0 \beta}{\lambda v_0 - \delta_0 \beta^2 - \delta_0 \lambda^2}\right) \quad (2.20)$$

ดังนั้นสมการที่ใช้ในการหาค่าระยะเหลื่อมสูงสุด (δ_{\max}) คือ (I. Preechawuttipong et al., 2000)

$$\delta_{\max} = \left(\frac{\delta_0^2 \beta^2 + \delta_0^2 \lambda^2 - 2\delta_0 \lambda v_0 + v_0^2}{\sqrt{v_0^2 \beta + (\lambda v_0 - \delta_0 \beta^2 - \delta_0 \lambda^2)}} \right) e^{-\frac{\lambda}{\beta} \arctan\left(\frac{v_0 \beta}{\lambda v_0 - \delta_0 \beta^2 - \delta_0 \lambda^2}\right)} + \delta_0 \quad (2.21)$$

2.4.2 เวลาของการเกิดการสัมผัส (Time of Contact)

เวลาของการเกิดการสัมผัส (t_c) จะได้เงื่อนไขที่ระยะเหลื่อม ณ เวลาของการสัมผัสหรือสิ้นสุดการสัมผัส $\delta(t_c) = 0$ จะได้ค่าดังนี้ (I. Preechawuttipong et al., 2000)

$$t_c = \begin{cases} \frac{2\pi + \arctan\left(-2 \frac{b \delta_0}{\delta^2 - b^2}\right)}{\beta}; \delta_0 > b \\ \frac{\pi + \arctan\left(-2 \frac{b \delta_0}{\delta^2 - b^2}\right)}{\beta}; \delta_0 < b \end{cases} \quad (2.22)$$

โดยที่ $b = \frac{v_0 - \delta_0 \lambda}{\beta}$ และค่า b จะต้องเป็นจำนวนจริงบวกเพื่อที่ทำให้มีระยะเหลื่อมเกิดขึ้นเมื่ออนุภาคสัมผัสกันและมีค่าความเร็ววิกฤตคือ

$$v_c = \delta_0 \beta + \delta_0 \lambda \quad (2.23)$$

ถ้าค่าความเร็วสัมพัทธ์เริ่มต้นของการกระทบกันระหว่างอนุภาค (v_0) มีค่ามากกว่าค่าความเร็ววิกฤตของการกระทบกันระหว่างอนุภาค (v_c) ค่าดังกล่าวนี้ทำให้อนุภาคที่สัมผัสกันสามารถแยกออกจากกันได้เมื่อเวลาผ่านไป t_c ดังสมการ (2.22) ระยะเวลาของการสัมผัสจะอยู่ในช่วงระหว่าง

$\frac{\pi}{\beta} < t_c < \frac{3\pi}{2\beta}$ และถ้าความเร็วสัมพัทธ์เริ่มต้นเพิ่มมากขึ้น เวลาของการเกิดการสัมผัสก็จะยิ่งลดลงและมีค่าเข้าใกล้ $\frac{\pi}{\beta}$ มากขึ้น

2.4.3 แรงเสียดทานหรือแรงสัมผัส (Tangential Force)

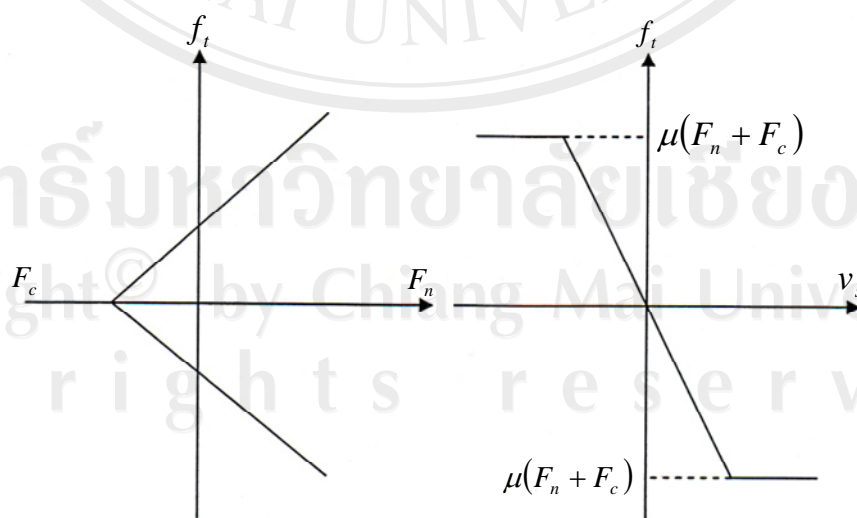
ในส่วนของแรงเสียดทานหรือแรงสัมผัสนั้น สมมุติว่าแรงเสียดทานวิกฤตหรือแรงวิกฤตต่อการลื่นไถล (T_c) เป็นฟังก์ชันกับระยะเหลื่อม (δ) จากกฎแรงเสียดทานของคูลอมบ์ (Coulomb law of dynamics friction) นั้นสามารถคำนวณหาค่าแรงเสียดทานวิกฤตได้จากค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทาน \times แรงสัมผัสตั้งฉาก และสมมุติให้แรงเสียดทานวิกฤตเป็นฟังก์ชันกับระยะเหลื่อมดังเช่นกฎแรงเสียดทานของคูลอมบ์ จะได้สมการแรงเสียดทานวิกฤตดังนี้

$$T_c = \mu(F_n + F_c) \quad (2.24)$$

แต่ในความเป็นจริงนั้น การนำกฎแรงเสียดทานของคูลอมบ์มาประยุกต์ใช้โดยตรงกับวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุลเป็นไปได้ยากมาก เนื่องจากความไม่ต่อเนื่องของกฎนี้ ดังนั้นจึงได้นำกฎของคูลอมบ์มาประยุกต์กับแรงเสียดทานที่เป็นฟังก์ชันกับความเร็วสัมพัทธ์ของการลื่นไถล (Sliding Relative Velocity) สมการของแรงเสียดทานที่ได้มีชื่อเรียกว่า Regularized Friction Law with adhesion ดังนี้ (I. Preechawuttipong et al., 2000)

$$f_t = \min\{\gamma_s v_s, T_c\} \cdot \text{sign}(v_s) \quad (2.25)$$

โดยที่ γ_s คือ ค่าสัมประสิทธิ์ความหนืดในแนวสัมผัสและ v_s คือ ความเร็วสัมพัทธ์ของการลื่นไถล



รูป 2.5 กฎแรงเสียดทานแห่งของคูลอมบ์ที่คิดผลของแรงแอดเฮชัน

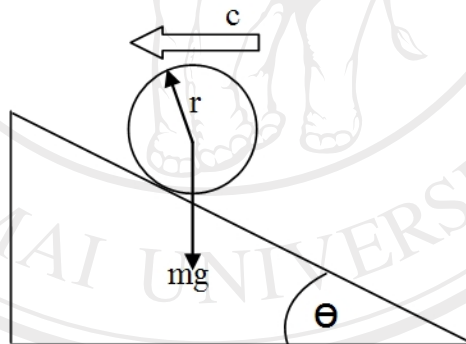
จากรูป 2.5(a) จะเห็นได้ว่าค่าแรงเสียดทานแปรผันตามแรงสัมผัสตั้งฉาก และรูป 2.5(b) กฎแรงเสียดทานแห้งของคูลอมบ์ที่เกิดผลของแรงแอดเฮชัน

2.4.4 แรงต้านทานการหมุน (Rolling Friction Force)

ในการสัมผัสกันของอนุภาคเมื่อคำนึงถึงแรงแอดเฮชันพื้นผิวของอนุภาคที่สัมผัสกันจะสัมผัสกันเป็นพื้นที่หรือปริมาตรที่ล้อมรอบจุดของการสัมผัส ดังนั้นพื้นผิวที่สัมผัสกันแบบแอดเฮชันสามารถต้านทานการแยกกันของอนุภาคในการกระทบกันแนวตั้งฉาก (Normal Separation), การลื่นไถลสัมพัทธ์ (Relative Sliding) และการหมุนสัมพัทธ์ระหว่างอนุภาค ในที่นี้เรียกว่าแรงต้านทานการหมุน (Rolling Friction Force) พิจารณาเมื่อมีวัตถุทรงกลมลูกหนึ่งมีมวล (m) และรัศมี (r) โดยอยู่ภายใต้แรงโน้มถ่วงของโลก (g) ที่อยู่บนพื้นเอียงที่มีมุมทำมุมกับแนวราบ (θ) และพยายามกลิ้งลงมาโดยไม่ให้เกิดการลื่นไถลดังรูป 2.6 ดังนั้นแรงต้านทานการหมุนคือ

$$c = \mu_r mgr \cos \theta \quad (2.26)$$

โดยที่ μ_r คือ ค่าสัมประสิทธิ์แรงต้านทานการหมุน และถ้าค่ามุม $\tan \theta < \mu_r$, การหมุนกลิ้งลงมาของวัตถุทรงกลมก็จะไม่เกิดขึ้น

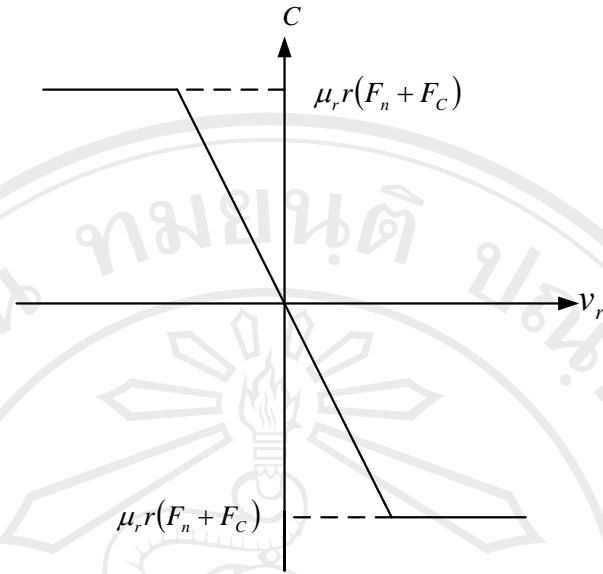


รูป 2.6 แรงต้านทานการหมุนของวัตถุทรงกลมบนพื้นเอียง

การนำกฎแรงเสียดทานต่อการหมุนมาประยุกต์ใช้โดยตรงกับวิธีพลศาสตร์ของโมเลกุลเป็นไปได้ยากมากเนื่องจากความไม่ต่อเนื่องของกฎนี้เช่นเดียวกับค่าแรงเสียดทานต่อการลื่นไถล จึงได้นำกฎของคูลอมบ์มาประยุกต์กับแรงต้านทานการหมุนที่เป็นฟังก์ชันกับความเร็วหมุนกลิ้งสัมพัทธ์ (v_r) ซึ่งเป็นแนวคิดเดียวกับกฎของแรงเสียดทาน ดังนั้นสมการของแรงคู่ควบที่ได้มีค่าดังนี้

$$c = \min \{ |\gamma_r v_r|, \mu_r r (F_n + F_c) \} \cdot \text{sign}(v_r) \quad (2.27)$$

โดยที่ γ_r คือ ค่าสัมประสิทธิ์ความหนืดต่อการหมุน



รูป 2.7 แรงคู่ควบเสียดทานต่อการหมุนที่คิดผลของแอดเฮชัน

2.4.5 แบบจำลองแอดเฮชันพื้นฐานเมื่อไม่คิดค่าแอดเฮชัน

สำหรับแบบจำลองแอดเฮชันพื้นฐานที่วัสดุเม็ดไม่คิดพลังงานแอดเฮซีระหว่างอนุภาค เรียกว่า วัสดุเม็ดแบบแห้ง โดยใช้แบบจำลองแรงสัมผัสตั้งฉากชนิด สปริง-หนืด (Spring-Viscous) ค่าพลังงานที่ผิวสัมผัสและการกระทบโดยตรงจะถูกลดรูปลงจากแบบจำลองที่คิดผลของค่าแอดเฮชัน กล่าวคือเมื่อไม่คิดพลังงานแอดเฮซีระหว่างอนุภาค ดังนั้นค่า γ , δ_0 และ $\omega_a = 0$ ทำให้สมการ $\beta = \sqrt{\omega_0^2 - \omega_a^2 - \lambda^2}$ ถูกลดรูปเหลือ $\beta = \sqrt{\omega_0^2 - \lambda^2}$ ดังนั้นกรณีไม่คิดค่าแอดเฮชัน สมการระยะเหลื่อม, ระยะเหลื่อมสูงสุด และเวลาของการเกิดการสัมผัส ถูกลดรูปเป็นสมการดังนี้

$$\delta(t) = \left(\frac{v_0}{\beta} \right) e^{-\lambda t} \sin(\beta t)$$

$$\delta_{\max} = \frac{v_0}{\omega_0} e^{-\frac{\lambda}{\beta} \arctan\left(\frac{\beta}{\lambda}\right)} \quad (2.28)$$

$$t_c = \frac{\pi}{\beta}$$

2.4.6 การเลือกตัวแปร

ในการจำลองทางคอมพิวเตอร์เพื่อศึกษาวัสดุเม็ดในงานวิจัยนี้ การสัมผัสกันระหว่างอนุภาคจะคำนึงถึงแรงสัมผัสตั้งฉากระหว่างอนุภาคและแรงเสียดทานเท่านั้น กล่าวคืออนุภาคที่กระทบกันนั้นสามารถหมุนต่อกันได้อย่างอิสระโดยไม่คิดแรงต้านทานการหมุนของอนุภาค อีกปัจจัยหนึ่งที่สำคัญคือ ตัวแปรในแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ซึ่งมี 2 แบบที่สำคัญคือ ตัวแปรทางกายภาพและการคำนวณทางตัวเลข

ก. ตัวแปรทางกายภาพ

ตัวแปรทางกายภาพได้แก่ พลังงานแอคเซชัน, ค่าความแข็งของผิวอนุภาคและค่าสัมประสิทธิ์ความหนืด ตัวแปรเหล่านี้เป็นตัวแปรที่มีผลในการจำลองทางคอมพิวเตอร์ ในงานวิจัยนี้จัดทำขึ้นเพื่อศึกษาอิทธิพลของแรงแอคเซชันที่มีผลต่อการเกิดและการแพร่กระจายการแตกร้าวของอนุภาคจึงกำหนดค่าความแข็งของผิวอนุภาคและค่าสัมประสิทธิ์ความหนืดเป็นค่าคงที่และปรับเปลี่ยนพลังงานแอคเซชันเท่านั้น โดยให้อยู่ในอัตราส่วนของพลังงานแอคเซชันต่อความแข็งของผิวอนุภาค (γ/k) และเพื่อป้องกันการกลิ้งกันของอนุภาคหนึ่งกับอีกอนุภาคหนึ่ง เมื่ออนุภาคทั้งสองกระทบกันต้องอยู่ภายใต้เงื่อนไข $k > \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\gamma}{2} \sqrt{\frac{r}{\delta_0}}$ ซึ่งเป็นคำตอบทั่วไปของกรณีอันเดอร์แดมปีง (Underdamping)

ข. ตัวแปรของการคำนวณทางตัวเลข

ตัวแปรของการคำนวณทางตัวเลขเป็นตัวแปรที่สำคัญอีกตัวแปรหนึ่งในการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ สามารถแบ่งได้เป็น 2 ส่วนดังนี้

- ค่า Δt หมายถึงช่วงเวลาของการคำนวณ (Time Step) โดยที่ค่า Δt นั้นต้องมีค่าน้อยกว่าค่าเวลาของการเกิดการสัมผัสเพื่อให้การคำนวณแรงระหว่างผิวสัมผัสมีความแม่นยำเพียงพอและทำให้การศึกษาการสัมผัสกันของอนุภาคเกิดความถูกต้องและแม่นยำ

- ค่าสัมประสิทธิ์ความหนืดในแนวสัมผัส ในสมการแรงเสียดทาน Regularized Friction Law ในการหาค่าสัมประสิทธิ์ความหนืดในแนวสัมผัสนี้มักจะได้จากประสบการณ์ โดยต้องมีค่าที่พอดีกล่าวคือไม่มากเกินไปและน้อยเกินไป ที่กำหนดเช่นนี้เพื่อหลีกเลี่ยงการสัมผัสระหว่างอนุภาคที่เกิดขึ้นทั้งหมดเป็นแบบลื่นไถล หลักการคร่าว ๆ ที่ใช้ในการเลือกค่านี้อือ

$$\gamma_s \approx \frac{v_t}{\mu \langle N \rangle}$$
 (Itthichai Preechawuttipong, 2002) โดยที่ v_t คือ ความเร็วสัมผัสเฉลี่ยของวัสดุเม็ด

และ $\langle N \rangle$ คือ แรงเฉลี่ยระหว่างผิวสัมผัส

2.5 ตัวแปรที่ใช้ในการวิเคราะห์พฤติกรรมทางกลศาสตร์ของวัสดุเม็ด

ตัวแปรที่ใช้สำหรับการวิเคราะห์เพื่อบ่งบอกคุณลักษณะเฉพาะทางรูปพรรณสัณฐานของระบบวัสดุเม็ด ได้แก่ จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาค (Coordination Number), จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาค (Coordination Number), ทิศทางเชิงมุมของการสัมผัส (Direction of Contacts) และโครงข่ายของแรงสัมผัส (Force Network) หัวข้อทั้งหมดจะกล่าวถึงรายละเอียดในลำดับถัดไปนี้

2.5.1 จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาค (Coordination Number)

จำนวนการสัมผัสเฉลี่ยต่ออนุภาคได้มีการนิยามไว้ดังนี้

$$Z = \frac{2N_c}{N_p} \quad (2.29)$$

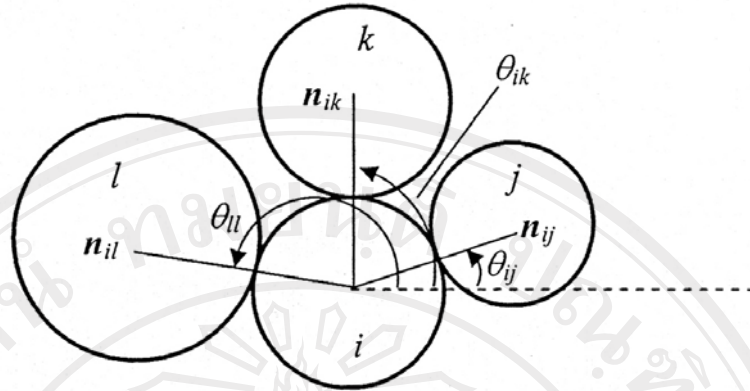
โดยที่ N_c คือ จำนวนอนุภาคทั้งหมดที่สัมผัสกัน, N_p คือ จำนวนอนุภาคทั้งหมดของระบบ และค่าคงที่ 2 คือ การนับจำนวนการสัมผัสที่สลับลำดับอ้างอิงของอนุภาค ในกรณีนี้วัสดุเม็ดที่คิดแรงแอคชันระหว่างผิวสัมผัสของอนุภาคสามารถรับได้ทั้งแรงดึงและแรงกด

2.5.2 ทิศทางเชิงมุมของการสัมผัส (Direction of Contacts)

ในวัสดุเม็ดยิ่งประกอบด้วยอนุภาคจำนวนมาก ซึ่งแต่ละอนุภาคได้มีการสัมผัสกันระหว่างอนุภาคเกิดขึ้นมากมายจนเป็นโครงข่ายของการสัมผัส เมื่อมีแรงภายนอกมากกระทำวัสดุเม็ดยิ่ง ๆ แรงจะถูกส่งผ่านจากอนุภาคหนึ่งไปยังอนุภาคหนึ่งผ่านทางสัมผัสระหว่างอนุภาคเท่านั้น ตามลักษณะโครงข่ายของแรงระหว่างอนุภาค การจัดเรียงโครงข่ายของการสัมผัสในทิศทางต่าง ๆ จึงเป็นคุณลักษณะที่สำคัญโดยตรงกับสถานะของความเค้นภายใน ที่ผ่านมาได้มีการศึกษาการจัดเรียงทิศทางของการสัมผัส (Radjai et al.) ที่ใช้วิธีการกระจายทางสถิติ ($P(\theta)$) ของทิศทาง θ ผิวสัมผัสในแนวตั้งฉาก n

การหาค่าการกระจายของการสัมผัสนั้นสามารถหาได้จากการนับจำนวนของการสัมผัส $N_p(\theta)$ ที่อยู่ในช่วงแบ่งเชิงมุม (θ') โดยที่ $\theta' \in [\theta - \Delta\theta, \theta + \Delta\theta]$ และค่าการกระจายตัวเชิงมุมของการสัมผัสหรือความเป็นไปได้ของการสัมผัสในทิศทางต่าง ๆ $P(\theta)$ นั้นสามารถหาได้จากสมการดังนี้

$$P(\theta) = \frac{N_p(\theta)}{N_c} \quad (2.30)$$

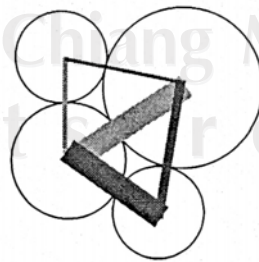


รูป 2.8 การนิยามมุม θ ของการสัมผัสระหว่างอนุภาค

2.5.3 โครงข่ายของแรงสัมผัส (Force Network)

การจัดเรียงของแรงสามารถศึกษาได้จากโครงข่ายของแรงระหว่างผิวสัมผัส ประกอบด้วยแรงสัมผัสตั้งฉากหรือแรงรวมและความดันหรือความเค้นภายในระบบของวัสดุเม็ด

เมื่อมีการสัมผัสระหว่างอนุภาคเกิดขึ้น แรงจะถูกส่งผ่านระหว่างอนุภาคหนึ่งไปยังอนุภาคหนึ่งโดยการสัมผัสกันระหว่างอนุภาคเท่านั้น โดยแรงจะถูกส่งผ่านผิวของอนุภาคผ่านเส้นผ่านศูนย์กลางของอนุภาคที่มีลักษณะเป็นวงกลมหรือทรงกลม ส่วนอนุภาครูปทรงอื่น ๆ แรงจะถูกส่งถ่ายผ่านในแนวตั้งฉากกับผิวสัมผัสผ่านจุดศูนย์กลางรวมมวลหรือจุดเซนทรอยด์ (Centroid) ระหว่างอนุภาคทั้งสอง แรงที่ส่งถ่ายผ่านการสัมผัสจะถูกแสดงด้วยเส้นเชื่อมต่อของการสัมผัสผ่านเส้นผ่านศูนย์กลางระหว่างอนุภาค ส่วนความหนาของเส้นแรงคือขนาดของแรงที่ส่งผ่านระหว่างอนุภาคดังรูป 2.9



รูป 2.9 ลักษณะและขนาดของแรงที่ส่งผ่านกันโดยการสัมผัสระหว่างอนุภาค