

Физические модели и математическое моделирование связных процессов в технических системах *

В.П. ФЕДОТОВ

Институт машиноведения Уро РАН, Екатеринбург

e-mail: fedotov@imach.uran.ru

Предложен модифицированный метод граничных элементов для физико-математического моделирования связных процессов. Физическое моделирование основано на теореме Онзагера связи обобщенных сил и потоков, где предполагается нелинейность коэффициентов взаимности. Подход иллюстрируется на примере диаграммы деформирования. Математическое моделирование основано на модификации МГЭ, основанной на исключении некорректных операций численного дифференцирования и интегрирования.

Введение.

Для анализа прочности необходимы феноменологические уравнения связи напряжений деформаций, температуры, концентрации легирующих элементов и т.п. Но получение их экспериментальными методами в действующей конструкции трудоемко, а зачастую, невозможно. Дальнейшее изложение основано на предположении о невозможности получения физико-механических характеристик и введения понятий устойчивости, разрушения, ресурса и т.п. в рамках замкнутой системы, поскольку они напрямую связаны с характером обмена с внешней средой. Феноменологические соотношения взаимности связных задач могут быть сформулированы в рамках открытых неравновесных систем на основе подхода Онзагера для связных физико-механических задач. Как гипотезу, имеющую подтверждение на практике, примем, что коэффициенты взаимности, линейные по Онзагеру, могут зависеть от обобщенных сил, что позволяет рассматривать нелинейные связные задачи.

Для повышения скорости счета и точности вычислений предлагается модифицированный метод граничных элементов для решения задач эллиптического, параболического и гиперболического типа, как базовой основы для решения нелинейных и связных задач математической физики. Модификация базируется на аналитическом вычислении интегралов и производных от функций влияния задач указанных трех типов и распараллеливании на всех этапах решения задач на уровне алгоритма. Для получения аналитических формул для точного вычисления интегралов от функций влияния и их производных вводится фиксированный "базовый" элемент. Интегрирование компонент функций влияния по произвольному участку границы сводится к интегрированию по фиксированному "базовому" элементу с последующим линейным преобразованием сдвига и поворота. Интегрирование для всех типов задач производится один раз, в результате чего получены компактные формулы, удобные для программирования. Предлагаемый подход исключает некорректные операции численного дифференцирования и интегрирования приближенных функций. Новизной предлагаемого подхода является установление неразрывной связи физических и математических моделей и возможность

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-01-00516).

корректного решения связанных задач, что для многих других методов чрезвычайно трудоемко или вообще невозможно.

В качестве иллюстрации приводятся решения тестовых задач теплопроводности, диффузии, упругопластичности, колебания пластин.

1. Физическое моделирование.

Дальнейшее изложение основано на предположении о невозможности получения физико-механических характеристик и введения понятий устойчивости, разрушения, ресурса и т.п. в рамках замкнутой системы, поскольку они напрямую связаны с характером обмена с внешней средой. Феноменологические соотношения взаимности связанных задач могут быть сформулированы в рамках открытых неравновесных систем на основе подхода Онзагера для связанных физико-механических задач, согласно которому устанавливается связь между обобщенными потоками J_k и обобщенными силами X_k

$$J_k = L_{km} X_m.$$

Как гипотезу, имеющую подтверждение на практике, примем, что коэффициенты взаимности L_{km} , линейные по Онзагеру, могут зависеть от обобщенных сил $L_{km} = L_{km}(X_m)$. Произведение обобщенных сил X_k и обобщенных потоков J_k представляет собой скорость роста энтропии \dot{S} в изолированной системе [1]. Если система открытая, то полную скорость роста энтропии можно представить в виде двух слагаемых

$$\dot{S} = \dot{S}_e + \dot{S}_i = X_e I_e + X_i I_i, \quad (1)$$

где $\dot{S}_e = X_e I_e$ — изменение энтропии за счет обмена энергией с внешними системами, $\dot{S}_i = X_i I_i > 0$ — изменение энтропии за счет внутренних неравновесных процессов.

С учетом (1) запишем уравнение сохранения энергии $-\frac{d\Lambda}{dt} = T_0 \dot{S} = T_0 X_e I_e + T_0 X_i I_i = 0$, здесь параметр T_0 имеет смысл температуры. $\Lambda(y_k)$ называется функцией Ляпунова или энергетической функцией. В замкнутой системе положительно определенная функция $\Lambda(y_k)$ обладает таким свойством, что функция

$$\frac{d\Lambda(y_k)}{dt} = \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y_k} \right) \cdot \left(\frac{dy_k}{dt} \right) = -T_0 \dot{S} = (T_0 X_i) \cdot (-J_i)$$

является знакоотрицательной, а движение системы, соответствующей $\Lambda(y_k)$, устойчиво. Тогда как фазовый переход от упругости к пластичности и разрушение связано с потерей устойчивости. Поэтому для их описания необходимо рассматривать открытую систему.

Рассмотрим физическое моделирование на примере процесса деформирования. Будем рассматривать деформированный образец как открытую систему. В качестве внутренней обобщенной силы X_i будет выступать деформация образца $\delta\varepsilon/T_0$, в качестве внутреннего обобщенного потока J_i — внутреннее напряжение σ . В качестве обобщенного внешнего потока J_e возьмем внешнее напряжение σ_p . Отметим, что отождествление внешнего σ_p и внутреннего σ напряжений нет. В этом случае можно сразу записать условие сохранения энергии

$$-\frac{d\Lambda}{dt} = \delta\Psi = -\sigma_p \delta\varepsilon + \sigma \delta\varepsilon = -\sigma_p \delta\varepsilon + L(\varepsilon) \delta\varepsilon = 0.$$

Следуя Коши, будем считать, что в упругой области коэффициент Онзагера зависит от обобщенной силы следующим образом

$$L(\varepsilon) = E \cdot (1 - k\varepsilon + m\varepsilon^2). \quad (2)$$

Здесь E — модуль Юнга. Поведение рассматриваемой системы (деформирование образца) полностью определяется потенциалом

$$\Psi = \int_0^\varepsilon E(1 - k\gamma + m\gamma^2) \gamma d\gamma - \sigma_p \varepsilon = \frac{E\varepsilon^2}{2} - \frac{Ek\varepsilon^3}{3} + \frac{Em\varepsilon^4}{4} - \sigma_p \varepsilon \quad (3)$$

и описывается вариационным уравнением

$$\delta\Psi = (E\varepsilon - Ek\varepsilon^2 + Em\varepsilon^3 - \sigma_p) \delta\varepsilon = 0.$$

Исследования этой системы методами синергетики [3], окончательно приводят к уравнению в упругой области

$$\sigma = E \left(1 - \frac{1}{3} \frac{E}{\sigma_c} \varepsilon + \frac{1}{27} \frac{E^2}{\sigma_c^2} \varepsilon^2 \right) \varepsilon = 0, k = \frac{1}{3} \frac{E}{\sigma_p}, m = \frac{1}{27} \frac{E^2}{\sigma_p^2}.$$

Для построения модели диссипативного процесса будем постулировать аддитивность процесса дислокационного упрочнения и разупрочнения от образования пространственных дефектов несплошностей [4], т.е. диаграмму $\sigma \sim \varepsilon$ представим в виде

$$\sigma = \sigma_T + \frac{\sigma_1 - \sigma_T}{\sqrt{\varepsilon_B - \varepsilon_T}} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_T} - \frac{\sigma_2 - \sigma_T}{(\varepsilon_B - \varepsilon_T)^2} (\varepsilon - \varepsilon_T)^2. \quad (4)$$

Здесь σ_1 и σ_2 — значения напряжений, соответствующих деформации ε_B при отсутствии в первом случае — разупрочнения, во втором случае — упрочнения.

Второе слагаемое правой части отражает известный из физики металлов механизм дислокационного упрочнения, для которого справедлива параболическая связь напряжений и плотности дислокаций, которая, в свою очередь, линейно связана со сдвиговыми деформациями $\rho \sim \varepsilon$, третье слагаемое является решением линейного кинетического уравнения накопления поврежденности.

Для определения σ_1 и σ_2 используются обычно два очевидных условия при $\varepsilon = \varepsilon_B$

$$\sigma(\varepsilon_B) = \sigma_B; \quad \left. \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_B} = 0;$$

из которых следует $\sigma_1 = (4\sigma_B - \sigma_T)/3$, $\sigma_2 = (\sigma_B + 2\sigma_T)/3$. Здесь σ_T — предел текучести, σ_B — временное сопротивление, ε_B — деформация временного сопротивления. Как показано в [2], приведенная модель (4) дает достаточное для расчетов приближение к экспериментальным данным для многих металлов при различных температурах T и концентрациях примесей c . Поскольку экспериментальные зависимости $\sigma_T(T)$, $\sigma_T(c)$, $\sigma_B(T)$, $\sigma_B(c)$ хорошо известны, модель (4) может единым образом применяться для решения связанных задач.

2. Деформационный ресурс и разрушение.

Согласно предлагаемой модели поведение образца (материальной точки) определяется внешним воздействием и внутренним откликом материала на каждой стадии. Под разрушением материала в точке будем понимать критическую ситуацию, когда энергия внешнего воздействия сравнивается с внутренним потенциальным и диссипативным энергетическим откликом материала. Текущий ресурс в каждый момент деформации

будет определяться разностью энергий внешнего воздействия и внутренней реакции материала.

Энергия внешнего воздействия определяется формулой

$$W_p = \int_0^t \sigma_p(\tau) \varepsilon(\tau) d\tau.$$

На первой стадии упругий потенциал определен формулой (3), тогда

$$\Psi_e = \int_0^\varepsilon E(1 - k\gamma + m\gamma^2) \gamma d\gamma = \frac{E\varepsilon^2}{2} - \frac{Ek\varepsilon^3}{3} + \frac{Em\varepsilon^4}{4}.$$

На второй стадии действуют два диссипативных механизма, которые определяются формулой (4), тогда энергетический отклик вычисляется по формуле

$$\Psi_{DIS} = \int_{\varepsilon_{DIS}}^\varepsilon \left[\frac{\sigma_1 - \sigma_T}{(\varepsilon_B - \varepsilon_T)^{1/2}} (\gamma - \varepsilon_T)^{1/2} - \frac{\sigma_2 - \sigma_T}{(\varepsilon_B - \varepsilon_T)^2} (\gamma - \varepsilon_T)^2 \right] d\gamma.$$

На последней стадии разупрочнения, если оно есть, поведение системы определяется третьим слагаемым функции (4), а энергия интегралом

$$\Psi_{SOFT} = \int_{\varepsilon_{DIS}}^\varepsilon \left[\frac{\sigma_2 - \sigma_T}{(\varepsilon_B - \varepsilon_T)^2} (\gamma - \varepsilon_T)^2 \right] d\gamma.$$

Текущий остаточный ресурс системы определяется разностью

$$\Psi_{RES} = W_p - \Psi_e - W_{DIS} - W_{SOFT} \quad (5)$$

Уравнение $\Psi_{RES} = 0$ позволяет определить значение деформации ε_{fr} , при котором произойдет разрушение. Отметим, разрушение может произойти на любой из рассматриваемых стадий, тогда соответствующие слагаемые в (5) отсутствуют.

Следует отметить, что после σ_B диаграмма приходит в неустойчивое состояние и для вычисления распределенных характеристик необходимо применение аппарата статистической механики, однако для вычисления интегральных характеристик, входящих в (5) детерминированные зависимости (4) могут быть достаточны для первого приближения.

3. Математическое моделирование.

Для решения связанных физико-механических задач предлагается модифицированный метод граничных элементов [4], [5]. Построение общего алгоритма для таких задач не представляется возможным, поэтому здесь рассматриваются алгоритмы решения базовых задач математической физики, конкретизация алгоритма для каждой реальной задачи требует отдельного рассмотрения.

Эллиптические задачи.

Решение линейной упругой задачи определяется интегральным соотношением

$$u_i(\xi) = \int_{S_f} [u_{ij}^*(\xi, x) f_j^*(x) - f_{ij}^*(\xi, x) u_j(x)] dS(x) + \\ + \int_{S_u} [u_{ij}^*(\xi, x) f_j(x) - f_{ij}^*(\xi, x) u_j^*(x)] dS(x),$$

где $u_{ij}^*(\xi, x), f_{ij}^*(\xi, x)$ — тензоры влияния, $u_j(x), f_j$ — поверхностные перемещения и напряжения, звездочкой обозначены известные величины. Разбивая границу области на элементы и устремляя внутреннюю точку ξ на границу, получим систему $2p$ уравнений

$$\frac{1}{2}u_i^{(p)} = \sum_{q=1}^N \left(f_j^{(q)*} \int_{S^{(q)}} u_{ij}^*(x^{(p)}, x) dS(x) - u_j^{(q)} \int_{S^{(q)}} f_{ij}^*(x^{(p)}, x) dS(x) \right) + \sum_{q=N+1}^{N+M} \left(f_j^{(q)} \int_{S^{(q)}} u_{ij}^*(x^{(p)}, x) dS(x) - u_j^{(q)*} \int_{S^{(q)}} f_{ij}^*(x^{(p)}, x) dS(x) \right).$$

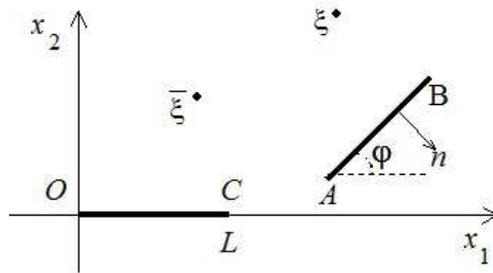


Рис. 1. Базовый элемент.

Модификация заключается в аналитическом интегрировании тензоров влияния по базовому элементу ОС (рис.1) с последующим аффинным преобразованием. Влияние любого отрезка границы АВ на точку ξ , будет эквивалентно влиянию базового отрезка ОС на точку $\bar{\xi}$,

Например, $\int_{OC} u_{ij}^*(\bar{\xi}, x) dS(x) = -\frac{1}{2}A_1\bar{\xi}_2 (\ln(\bar{\xi}_1^2 + \bar{\xi}_2^2) - \ln((\bar{\xi}_1 - L)^2 + \bar{\xi}_2^2))$, $A_1 = -1/(8\pi\mu(1-\nu))$. Остальные значения интегралов приведены в [5].

Предлагаемый подход позволяет построить эффективную итерационную процедуру для учета нелинейности процесса, характерного для связанных задач. Физическая модель удовлетворяет требованию фазового перехода второго рода при переходе от упругости к пластичности, что математически исключает угловую точку, производная в которой отсутствует, а задача определения границы раздела упругой и пластической области является некорректной. Формулировка задачи в обобщенном смысле, т.е. через граничные интегральные уравнения позволяет учитывать нелинейность только через изменение свободного вектора разрешающей системы, не меняя ее матрицы, что существенно экономит время счета. Действительно, нелинейные свойства можно учесть так $2\mu\varepsilon_{ij} + \frac{2\nu\mu}{1-2\nu}\varepsilon_{kk}\delta_{ij} - \sigma_{ij}^a = \sigma_{ij}^e - \sigma_{ij}^a$, где, согласно (2) $\sigma_{ij}^a = \frac{2E(-kI_\varepsilon + mI_\varepsilon^2)}{2(1+\nu)} (\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu}\varepsilon_{kk}\delta_{ij})$, начальные напряжения на каждой стадии итерации, I_ε - интенсивность деформаций. После стандартных преобразований [5] задача сведется к к системе граничных интегральных уравнений с дополнительным известным слагаемым

$$\int_{\Omega} \sigma_{kj}^a u_{ik,j}^*(x_0, x) d\Omega(x).$$

В итерационном процессе интегралы по поверхности уже вычислены, изменяются только интегралы по области от известных функций.

Гиперболические задачи.

В гиперболических задачах помимо граничных условий возникают начальные условия в области для искомой функции и ее производной по времени, что требует вычисления соответствующих интегралов. Применяя к ним второе тождество Грина и проводя преобразования, сокращающие неберущиеся интегралы перейдем к граничному интегральному уравнению

$$\begin{aligned}
u(\xi, t_F) = & - \int_{t_0}^{t_F} \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x, \tau)}{\partial \tau} \frac{(t_F - \tau) H(c(t_F - \tau) - r)}{2\pi r \sqrt{c^2(t_F - \tau)^2 - r^2}} n_r d\Gamma(x) d\tau - \\
& - \int_{t_0}^{t_F} \int_{\Gamma} \nabla u(x, \tau) \frac{H(c(t_F - \tau) - r)}{2\pi \sqrt{c^2(t_F - \tau)^2 - r^2}} d\Gamma(x) d\tau + \\
& + \frac{1}{c^2} \int_{\Gamma} \psi(x) \frac{\partial U^*}{\partial n} d\Gamma(x) + \frac{1}{c^2} \int_{\Gamma} \frac{\partial \psi(x)}{\partial n} U^*(\xi, x, t_F, t_0) d\Gamma(x) + \\
& + \frac{1}{c^2} \int_{\Gamma} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial n} U_{\tau}^* d\Gamma(x) + \int_{\Gamma} \varphi(x) \frac{n_r}{2\pi r} d\Gamma(x).
\end{aligned}$$

При интегрировании выражений необходимо различать различные случаи расположения волны влияния от точки ξ относительно базового элемента. Скорость распространения волны конечна, а значит влияние точки ξ на базовый элемент проявится только после того, как волна, возникшая в точке ξ в момент времени τ , достигнет базового элемента. Будем различать пять случаев:

1. Волна еще не достигла базового элемента; множество таких точек будем называть

$$M_1 = \{ \xi \in \Omega : c(t_F - \tau) - r(\xi, x) < 0, x \in [a, b] \},$$

где $r(\xi, x)$ — расстояние между точками ξ и x ;

2. Волна достигла некоторых внутренних точек базового элемента, но не достигла его границ; множество таких точек будем называть

$$\begin{aligned}
M_2 = & \left\{ \xi \in \Omega : c(t_F - \tau) - r(\xi, a) < 0 \cap c(t_F - \tau) - r(\xi, b) < 0 \right. \\
& \left. \cap \exists x \in (0, b) : c(t_F - \tau) - r(\xi, x) > 0 \right\};
\end{aligned}$$

3. Волна достигла только правой границы базового элемента; множество таких точек будем называть

$$M_3 = \left\{ \xi \in \Omega : c(t_F - \tau) - r(\xi, a) < 0 \cap c(t_F - \tau) - r(\xi, b) > 0 \right\};$$

4. Волна достигла только левой границы базового элемента; множество таких точек будем называть

$$M_4 = \left\{ \xi \in \Omega : c(t_F - \tau) - r(\xi, a) > 0 \cap c(t_F - \tau) - r(\xi, b) < 0 \right\};$$

5. Волна полностью достигла базового элемента; множество таких точек будем называть

$$M_5 = \{ \xi \in \Omega : c(t_F - \tau) - r(\xi, x) > 0, x \in [a, b] \}.$$

Аналитические формулы для интегралов по всем положениям точки влияния ξ приведены в [4], [5].

Для параболических задач построение интегральных уравнений подобно предыдущему, отличие заключается только в аналитическом интегрировании соответствующих функций влияния.

Заключение.

Решение связанных задач математической физики требует решение двух проблем: - разработка Физических моделей нелинейных функциональных соотношений связности между обобщенными потоками и силами, а так же физическими параметрами процессов, которые учитывают характерные времена и объемы материальных точек; - разработка математических методов и алгоритмов позволяющих решать громоздкие системы дифференциальных уравнений в частных производных достаточно быстро и обеспечивающих высокую точность вычислений не только искомым функций, но и их первых и вторых производных. В работе предложен подход, базирующийся на неравновесной термодинамике открытых систем, позволивший рассматривать не только связанные процессы деформирования, диффузии, теплопроводности, но и отслеживать состояния неустойчивости систем с определением фазовых переходов, деформационного ресурса и разрушения. Модифицированный метод граничных элементов за счет предварительного аналитического счета позволил существенно сократить вычислительное время и за счет точного вычисления производных и интегралов от функций влияние позволил исключить некорректные операции численного дифференцирования и интегрирования. Непрерывные в области решения позволяют исключить сеточное и конечно-элементное дробление самой области, что вызывает трудности для связанных процессов с различными характерными представительными объемами. Следует отметить, что предлагаемый подход пока нельзя назвать универсальным, но он позволяет в единой методологии рассматривать отдельные классы связанных задач.

Список литературы

- [1] ДЪЯРМАТИ И. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1974. 301 с.
- [2] ТОМПСОН ДЖ. М. Неустойчивости и катастрофы в науке и технике. М.: Мир, 1985. 256 с.
- [3] ПРИГОЖИН И. Введение в термодинамику необратимых процессов М.: ИЛ, 1960. 127 с.
- [4] ФЕДОТОВ V. P., КОНТЕЕВ A. A. Modified boundary element method for problems on oscillations of flat membranes // Computers and Geosciences. - 2009. - V. 267, № 1. - Pp. 78-89.
- [5] ФЕДОТОВ В. П., СПЕВАК Л. Ф. Решение связанных диффузионно-деформационных задач на основе алгоритмов параллельного действия. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 175 с.