

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Диссертация посвящена разработке математического обеспечения для решения нелинейных задач МСС с большими деформациями и подвижными границами раздела. Эта научная проблема актуальна в связи с потребностью теоретического изучения технологических термомеханических процессов и получения новых материалов.

Цель работы. Научные задачи, положенные в основу диссертации, продиктованы потребностями теории и практики в более полном и точном описании термомеханических процессов, протекающих при больших деформациях сред с упругими, вязкими и пластическими свойствами на критических переходных режимах, связанных с развитием разрушения, локализацией деформаций, спеканием, кристаллизацией, большими деформациями при наличии фазового перехода, контакта и подвижных свободных границ.

Научные цели диссертации включают расширенную математическую формулировку термомеханических задач, учитывающую многообразие рассматриваемых термомеханических процессов, разработку методов решения с учетом существенно переменных во времени геометрии и свойств среды, численную реализацию соответствующих алгоритмов в виде пакета программ и проведение теоретического численного моделирования характерных процессов рассматриваемого класса.

Методика исследования. В диссертации предпринят комплексный подход к формулировке общей начально-краевой задачи и конструированию численных методов ее решения, включающий синтез формулировок и методов механики деформируемого твердого тела и механики жидкости и газа. Для расчета больших деформаций развиваются формулировки и методы решения, опирающиеся на метод произвольных подвижных Лагранжево-Эйлеровых координат, позволяющие единообразно рассматривать задачи для широкого класса сред с упругими, вязкими и пластическими свойствами при наличии подвижных границ раздела (межфазных, контактных, свободных, жестких, открытых и так далее). Унификации подвергнуты и математические методы решения начально-краевых задач, в основу которых положен безматричный метод конечных элементов, предложенный и развитый автором для богатого набора разнообразных термомеханических динамических и квазистатических задач о деформациях и течениях сплошных сред.

Значительное влияние на выработку единой формулировки задач, применяемой в диссертации, оказали своими трудами по теории больших деформаций и термодинамике сплошных сред следующие ученые: Дж. Астарита, Дж. Марруччи, С.К. Годунов, А.А. Ильюшин, В.И. Кондауров, Р.М. Кристенсен, В.Н. Кукуджанов, Л.И. Малверн, Л.И. Седов, И.С. Сокольников, Г. Циглер.

Развитые в диссертации унифицированные методы восходят к трудам следующих авторов: M.L. Wilkins, Ю.П. Попов, А.А. Самарский (явные схемы), Г. Стрэнг, Дж. Фикс (теория и конструирование конечно-элементных алгоритмов), С.W. Hirt, Ю.И. Шокин (анализ и конструирование схем методом дифференциальных приближений), С.К. Годунов, Г.П. Прокопов, В.М. Ковеня, Н.Н. Яненко, С.А. Иваненко (подвижные

адаптивные сетки); A.A. Amsden, F.H. Harlow (дискретные маркеры), J.A. Sethian (непрерывные маркеры), В.А. Баженов, А.И. Гулидов, А.Г. Горшков, А.С. Кравчук (контактные алгоритмы), M.R. Hestenes, E. Stiefel (метод сопряженных градиентов), А.А. Абрамов, А.Ю. Еремин, Н.И. Марьяшкин (методы регуляризации дискретных и краевых задач, пакетные технологии), А.А. Самарский (монотонные схемы расчета конвекции с минимальной вязкостью), J.P. Boris, D.L. Book (коррекция потоков в зонах разрыва решений), О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов, В.А. Гущин, В.В. Щенников, В.Н. Кукуджанов, В.М. Ковеня, Н.Н. Яненко (расщепление по физическим процессам).

В диссертации использовано множество и других составляющих, снабженных аккуратными ссылками на источники, привести которые здесь, в автореферате, не представляется возможным. Общая методологическая тенденция диссертации отражает стремление к синтезу перспективных, выработанных поколениями ученых, математических находок, приемов и конструкций в едином алгоритме решения по возможности более общей термомеханической задачи. Насколько такой путь продуктивен, можно судить по получаемым, описываемым ниже, результатам.

Научная новизна. В диссертации дан вариант решения крупной актуальной научной проблемы создания математического обеспечения для решения нелинейных задач МСС с подвижными границами раздела.

Основными элементами новизны в диссертации являются следующие ее составляющие:

- вывод уравнений МСС в подвижных адаптивных координатах;
- модификация термодинамического метода получения определяющих соотношений, не требующая применения экстремальных принципов для скорости диссиpации и расширяющая класс термодинамически допустимых определяющих соотношений;
- безматричный метод конечных элементов;
- ряд явных и неявных схем для квазистатических и динамических задач упруго-вязкопластичности с большими деформациями;
- контактные алгоритмы методов множителей Лагранжа и штрафных функций;
- развитие метода маркеров для расчета подвижных границ раздела;
- управление подвижными адаптивными сетками с помощью уравнений нелинейной термоупругости;
- реализация упомянутых алгоритмов в многоцелевой интерактивном пакете программ АСТРА;
- набор численных решений новых задач о формировании, разрушении и локализации деформаций, спекании, росте кристаллов, течениях со свободными границами.

Практическое значение диссертации. Разработанные теория, методы, алгоритмы и пакет программ служат инструментом теоретического численного моделирования ряда природных и технологических процессов для их изучения, прогнозирования и оптимизации. Все представленные решения получены при выполнении плановых НИР: контакт составных конструкций и высокоскоростные соударения исследовались по проектам с предприятиями машиностроительной промышленности, исследования по разрушению, локализации деформаций и спеканию проводились в рамках плановых НИР ИПМ РАН по проблеме "Механика деформирования и разрушения твер-

дых тел с неоднородностями и микродефектами с учетом физических воздействий” Гос.регистр. № 01.91.0007314, финансировались в серии проектов РФФИ, координировавшихся Н.Г.Бураго и В.Н.Кукуджановым, по проекту, выполненному автором по контракту со Шведской Академией Наук (координатор проекта В.Н.Кукуджанов). Исследования по росту кристаллов финансировались контрактами с НАСА (США) и Российским Космическим Агентством (координатор проектов В.И.Полежаев). Разработка алгоритмов генерации адаптивных сеток финансировалась компанией Форд (США) в 1997 г. по контракту с Н.Г.Бураго. Алгоритмы методов непрерывного и дискретных маркеров созданы в рамках работ по контракту RiB-98-6 с министерством Брюссельской области (Бельгия). Кроме того, с использованием пакета АСТРА был выполнен и ряд НИР для отечественных организаций: Атоммаша, Гидропроекта, завода Квант и др.

Обилие выполненных прикладных исследований показывает, что разработанное математическое обеспечение нелинейных задач МСС с подвижными границами раздела (программа АСТРА) имеет достаточно серьезное практическое применение.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением строгого математического аппарата, исследованием корректности начально-краевых задач, контролем сходимости численных методов на примерах решения модельных задач. Для новых задач сходимость прослеживалась при последовательном дроблении расчетных сеток. Кроме того, в численных расчетах контролировалось выполнение интегральных законов сохранения и граничных условий. Решение задач осуществлялось, как правило, разными методами с последующим сравнением результатов. Хорошее согласование получаемых таким образом решений между собой служит определенной гарантией их достоверности.

Апробация работы. Результаты диссертации по мере получения были представлены на многих (более 50-ти) отечественных и зарубежных конференциях и семинарах. Укажем некоторые из них ниже. Пакет программ АСТРА в виде и комплектации, близкой к современной, был представлен на 5-й Всесоюзной зимней школе по механике сплошной среды (Песчанка, 25 января 1985 г.), на Скандинавской конференции по вычислительной механике (International Seminar of NoACM, Trondheim, Norway, 1994), на зарубежных выставках Российских научных достижений, организованных Госкомитетом по науке и технике: в Брюсселе (1996 г.) и Ганновере (2002 г.).

Контактные алгоритмы были доложены на Всесоюзном Съезде по теоретической и прикладной механике в Ташкенте (1986 г.), на 8-м Всесоюзном симпозиуме по распространению упругих и упругопластических волн (Новосибирск, 1987).

Доклады по теории определяющих уравнений и теории спекания делались на семинарах Чалмерского и Лундского университетов (1994, 1995, Швеция), на семинаре ИПМ РАН под руководством В.Н. Кукуджанова (1998 г.), на 32-й Ассамблее Европейского Геофизического Общества (Гаага, Нидерланды, 1999), на Всероссийском Съезде по теоретической и прикладной механике (Пермь, 2001 г.).

Задачи по разрушению и локализации деформаций докладывались по мере их решения на семинарах ИПМ РАН и Чалмерского университета (1993-1995, 1997, 1998), международных конференциях по экологической безопасности (Варшава, Польша, ок-

тябрь 1996) и по механике сплошной среды памяти И.И.Воровича (Ростов-на-Дону, октябрь 2001 г.)

Задачи роста кристаллов докладывались в Центре микрографитации НАСА (Huntsville, USA, 1997), на Международных и Всероссийских конференциях по механике невесомости (Санкт-Петербург, 1997; Александров, 1997; Jerusalem, Israel, 1998; N. Cyprus, Turkey, 1999; Tokyo, Japan, 1998; Nagoya, Japan, 1998; Stony Brook, USA, 2000; Pasadena, USA, 2001).

Работы по управлению адаптивными сетками и методам непрерывного и дискретных маркеров докладывались на Всероссийских конференциях по генерации сеток (Дюрсо, сентябрь, 1996, 1998), на Международных конференциях по генерации сеток и промышленным приложениям (Starkville, Mississippi, USA, May, 1997, 1999; Санкт-Петербург, 2001; Москва, 2002).

Структура и объем работы. Диссертация состоит из *введения, четырех глав, заключения и списка литературы*. Полный объем диссертации составляет 222 страницы. Рисунки включены в текст и 50 страниц занимает список литературы, который содержит 686 источников.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** формулируется цель исследования, обосновывается его актуальность. Поясняется структура работы и содержание основных ее частей. Даётся список работ автора по теме диссертации.

Первая глава содержит фундаментальный обзор литературы по разработке численных дискретных (сеточных) методов решения задач с подвижными границами раздела. Этот обзор опубликован автором в работах [35, 36].

Сначала даны основные источники по теории и постановке классических контактных задач. Затем приведен список работ, содержащих обзоры по численно-аналитическим методам решения контактных задач и, в более широкой трактовке, задач с подвижными границами раздела, включая межфазные и свободные границы. Далее приведены ссылки на имеющиеся в литературе обзоры по сеточным методам расчета задач с подвижными границами раздела.

Работы по контактным алгоритмам разделены на два семейства в зависимости от подхода к описанию движений сплошной среды: выделены лагранжевы и эйлеровы алгоритмы. Дополнительное подразделение каждого из семейств на две группы сделано по признаку явного выделения границ раздела дискретными элементами поверхности или неявного их описания как зон больших градиентов решения или изоповерхностей при использовании методов сквозного счета.

Описаны работы по лагранжевым алгоритмам сквозного счета: алгоритмы идеального контакта, алгоритмы буферного (контактного) слоя, алгоритмы единого уравнения состояния для сквозного счета фазовых переходов, в частности, модели континуального разрушения, континуальные модели блочных и слоистых сред.

Рассмотрены лагранжевы алгоритмы явного выделения границ раздела: алгоритмы поиска зоны контакта и отбора контактных пар "узел - граничный элемент": алго-

ритмы глобального и локального поиска, варианты иерархии граничных элементов для ускоренного определения зон контакта.

Далее рассмотрены алгоритмы удовлетворения условий непроникания: приближенные модели неупругого удара для определения скорости движения границы, приближенные модели поверхностей скольжения, алгоритмы фиктивных узлов, контактные алгоритмы метода характеристик, применение решений задачи о распаде произвольного разрыва, алгоритмы метода множителей Лагранжа и метода штрафных функций, алгоритмы перестройки (адаптации) сеток на границе раздела, алгоритмы схлопывания ячеек, содержащих контактный разрыв.

Затем даны источники по эйлеровым алгоритмам явного выделения границ раздела (в частности свободных границ) с помощью лагранжевых частиц и дискретных маркеров.

Для учета сложных граничных условий, требующих информации об ориентации и кривизне границы раздела, дан список работ, в которых предложены варианты непрерывных лагранжевых маркер-функций (функции плотности, функции цвета, функции расстояния), определяющие границу раздела как изоповерхность маркер-функции, а кривизну и нормаль через пространственные производные.

Далее приведены работы по эйлеровым алгоритмам сквозного счета границ раздела, использующим принцип улавливания границ раздела как зон больших градиентов: методы коррекции потоков и антидиффузии. Дан список работ по адаптивным к решению и геометрии сеткам, применение которых позволяет повысить точность описания разрывных решений, решений в погранслоях и в зонах границ раздела, в частности, за счет уменьшения ошибок аппроксимации путем уменьшения размера ячеек сетки в зонах больших градиентов. Отдельно охарактеризованы работы, сгущающие сетки путем сдвига имеющихся узлов, и работы по локальной перестройке сетки путем добавления новых узлов.

Стремление избежать хлопот по построению сеток привело к развитию методов граничных элементов, в рамках которых развиты специфические численные методы расчета контакта. Отмечены имеющиеся работы с обзорами этого направления.

Еще дальше по пути отказа от применения сеток прошли работы по созданию контактных алгоритмов в рамках различных вариантов бессеточных свободных лагранжевых методов, опирающихся на нефинитные, но быстро затухающие узловые базисные функции.

Важное место в ряду алгоритмов расчета контакта занимают работы по учету контактного трения и его разновидности, трения качения.

Для специалистов по механике контакта небезинтересно будет познакомиться с обзорами, показывающими специфику и разнообразие проблемно-ориентированных контактных алгоритмов: для анимации в кино (фильмы о динозаврах), биомедицинских приложений (компьютерные тренажеры для хирургов), для геофизических задач, для расчета явлений кавитации, для расчета свободных и межфазных границ, для моделирования одежды (!).

Обзор заканчивается описанием имеющихся работ по оптимизации формы и контактных усилий, по векторизации и распараллеливанию контактных алгоритмов, по

сравнительному анализу и оценкам точности контактных алгоритмов.

Во второй главе дана формулировка системы уравнений МСС в подвижных аддитивных координатах и поставлена общая начально-краевая задача, положенная в основу диссертации. Основной материал данной главы опубликован в следующих работах автора [11, 18, 20, 31].

Основными искомыми функциями термомеханической задачи считаем те, по которым все остальные можно найти, не привлекая операции дифференцирования по времени. Эти основные искомые функции определяются системой основных уравнений термомеханики, которая в диссертации имеет вид:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (1)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \quad (2)$$

$$\rho c_v \frac{dT}{dt} = D_* + \rho r + \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (3)$$

$$\frac{d\varepsilon'_{\mathbf{p}}}{dt} = \lambda_p \boldsymbol{\sigma}'_c - \varepsilon'_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{L}^T \cdot \varepsilon'_{\mathbf{p}} \quad (4)$$

$$\frac{da_p}{dt} = \lambda_p \boldsymbol{\sigma}'_c : \boldsymbol{\sigma}'_c \quad (5)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = H(\Phi_\theta) \lambda_\theta \quad (6)$$

$$\frac{d\omega}{dt} = H(\omega) \lambda_\omega \quad (7)$$

$$\rho \frac{dC_\alpha}{dt} = \nabla \cdot \mathbf{q}_{c\alpha} + \rho r_{c\alpha} \quad (8)$$

$$\frac{d\overset{\circ}{\mathbf{x}}}{dt} = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \quad (10)$$

где последовательно записаны: уравнение неразрывности (1), уравнения движения (2), уравнение энергии (3), уравнения пластического течения (4), уравнение пластической работы (5), уравнение поврежденности (6), уравнение спекания (7), уравнение диффузии примесей (8), уравнение непрерывного маркера (9), уравнение подвижных координат (10). Основные искомые функции находятся под знаком временной производной в левой части уравнений.

Уравнения (1-10) записаны с использованием абстрактной тензорной нотации в традиционных обозначениях: ρ - плотность актуального (деформированного) состояния, \mathbf{u} - скорость движения сплошной среды, t - время, ∇ - оператор пространственного дифференцирования в актуальной конфигурации, $\boldsymbol{\sigma}$ - тензор напряжений Коши, $\boldsymbol{\sigma}_c$ -

консервативная составляющая тензора напряжений Коши, \mathbf{g} - ускорение силы тяжести, T - абсолютная температура, c_v - теплоемкость при постоянном объеме, r - внешние массовые источники тепла нетермомеханической природы, \mathbf{q} и $\mathbf{q}_{c\alpha}$ - диффузионные потоки тепла и концентраций, D_* - приток тепла, определяемый по формуле:

$$D_* = (\sigma' - \mathbf{T} \frac{\partial \sigma'}{\partial \mathbf{T}}) : \mathbf{e}'_p + \rho(\mathbf{T} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta \partial \mathbf{T}} - \frac{\partial \varphi}{\partial \theta}) \frac{d\theta}{dt} + \mathbf{T} \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{T}} : \mathbf{e}$$

где φ - свободная энергия, штрих отмечает девиаторы, Далее использованы следующие обозначения (формула (5) и далее): ε_p - пространственный тензор пластической деформации, σ' - девиатор напряжений Коши, σ'_c - консервативная составляющая девиатора напряжений, $\lambda_p = (k_p f_p)^{-1} \mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p$ - коэффициент пропорциональности в законе пластического течения, $: -$ двойное скалярное произведение, $\mathbf{e}_p = d\varepsilon_p/dt + \mathbf{L} \cdot \varepsilon_p + \varepsilon_p \cdot \mathbf{L}^T$ - пространственный тензор скорости пластической деформации, $\mathbf{L} = \nabla \mathbf{u}$ - тензор градиента скорости, C_α - концентрации примесей ($\alpha = 1, 2, \dots$), $r_{c\alpha}$ - источники/стоки концентрации (члены, описывающие химические реакции). Материальная временная производная $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla$ учитывает конвекцию сплошной среды, возникающую из-за разницы в скоростях материальной (\mathbf{u}) и координатной (\mathbf{w}) сред. В подходе Лагранжа полагается $\mathbf{u} = \mathbf{w}$, в подходе Эйлера $\mathbf{w} = 0$, в общем случае для определения $\mathbf{w} = \partial \mathbf{x}/\partial t$ служит уравнение подвижных координат (10).

Уравнение подвижных координат (10) предложено автором и построено по образу уравнений нелинейной термоупругости, но содержит нестационарный член с временной производной первого порядка, так что уравнение это принадлежит параболическому типу и волновых процессов в сеточной среде не возникает. Величина $\tilde{\sigma}$ играет роль напряжений в координатной среде, определяемых обычными соотношениями термоупругости:

$$\tilde{\sigma} : I = (3\lambda_* + 2\mu_*) J_* (\ln J_* + N(\nabla \cdot \mathbf{y})) , \quad \tilde{\sigma}' = 2\mu_* \tilde{\varepsilon}'_* , \quad \tilde{\varepsilon} = 0.5(\tilde{\mathbf{F}}^T \cdot \tilde{\mathbf{F}} - I) , \quad J_* = \det(\tilde{\nabla} \mathbf{x})$$

здесь отображение $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\tilde{\mathbf{x}}, t)$ представляет закон движения подвижной сетки, $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}}$ при $t = 0$, $\tilde{\mathbf{x}}$ - начальная сетка, $\tilde{\mathbf{F}}$ - тензор градиента (сеточной) деформации, $\tilde{\varepsilon}$ - тензор (сеточной) деформации, N - норма градиентов решения термомеханической задачи, играющая для подвижной сетки роль температуры, так что сеточная среда сжимается в зонах больших градиентов решения и уменьшает ошибки сеточной аппроксимации.

Система уравнений (1)-(10) замыкается кинематическими соотношениями

$$\varepsilon = (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{F}^{-1})/2 , \quad \mathbf{e} = (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)/2 \quad (11)$$

и определяющими соотношениями, ответственными за свойства сплошной среды. В диссертации рассматриваются среды дифференциального типа, описываемые следующими основными параметрами состояния:

$$\pi = (T, \varepsilon, \chi, C_\alpha, dT/dt, \mathbf{e}, d\chi/dt, dC_\alpha/dt, \nabla T, \nabla C_\alpha)$$

где $\chi = (\varepsilon'_p, \theta, \omega)$ - структурные параметры состояния, представленные пластической деформацией, поврежденностью и пористостью и отвечающие за изменение свойств конденсированных сред при развитии дислокаций, микротрецин и пор.

Определяющие соотношения выводятся как следствия законов термодинамики и гипотезы параметров состояния, в соответствии с которой состояние сплошной среды полностью определяется набором основных параметров состояния. Применяется известный термодинамический метод вывода определяющих соотношений, который выработали применительно к теории больших упругопластических деформаций А.А. Ильюшин, Л.И. Седов, Р. Кристенсен, L.E. Malvern, C. Truesdell, Г. Циглер, В.Н. Кукуджанов, В.И. Кондауров, Л.В. Никитин, В.И. Левитас, П.В. Трусов и многие другие. Описана модификация этого метода не требующая привлечения каких-либо дополнительных экстремальных принципов и позволяющая вывести определяющие соотношения, задавая две функции - функцию свободной энергии и функцию скорости диссипации энергии (подробное описание сделано в работе [31]).

Даны примеры вывода определяющих соотношений для основных сред дифференциального типа: для вязких/невязких сжимаемых/несжимаемых газа/жидкости; для нелинейных термо-упругих сред, для упругопластической и упруговязкопластической сред, для разрушающихся и консолидирующихся упругопластических сред.

Выражения для функций свободной энергии и скорости диссипации, описывающие перечисленные выше типы сплошных сред, в диссертации имеют вид:

$$\begin{aligned}\varphi &= \varphi_1(\rho, T, \rho_p, \theta, \omega) + h_1 \frac{\mu}{\rho} \varepsilon'_e : \varepsilon'_e + H(T - T_m) \varphi_\omega(T - T_m, \omega) \\ D &= \lambda_v (\mathbf{e} : I)^2 + 2\mu_v \mathbf{e} : \mathbf{e} + H(\Phi_p) k_p f_p + \frac{k_T}{T} \nabla T \cdot \nabla T + \\ &+ H(\Phi_d) k_d \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + H(\omega) k_\omega \left(\frac{d\omega}{dt} \right)^2 + \sum_{\alpha} \frac{k_{c\alpha}}{C_\alpha} \nabla C_\alpha \cdot \nabla C_\alpha\end{aligned}$$

где $\varphi_1, \varphi_\omega, k_p, k_d, k_c, k_T, \lambda_v, \mu_v, f_p, k_{c\alpha}$ - неотрицательные функции от $T, \varepsilon, \varepsilon_p, \omega, \theta$. Свободная энергия φ ответственна за обратимые процессы, а скорость диссипации энергии D - за необратимые. Каждое из слагаемых в выражении для свободной энергии и диссипации отвечает определенному процессу.

Первое слагаемое в свободной энергии отвечает за способность среды накапливать тепло и за сопротивление сплошной среды объемной деформации. Для несжимаемой среды это слагаемое не зависит от плотности и отвечает только за накопление тепла, а давление, препятствующее сжатию среды, определяется как множитель Лагранжа для условия несжимаемости.

Второе слагаемое в свободной энергии отвечает за сопротивление среды изменению формы. Для разгруженного состояния, имеющего в пространстве деформаций координаты, определяемые остаточной деформацией ε_p , это слагаемое обращается в нуль, а свободная энергия имеет минимум по деформациям. Для этого члена записано простейшее выражение.

Третье слагаемое описывает вклад в свободную энергию, обусловленный силами поверхностного натяжения, действующими на поверхности активных пор. Активными поры становятся при расплавленном состоянии материала, содержащего поры. Силы поверхностного натяжения обеспечивают эффект уплотнения рыхлых материалов при

спекании или консолидации. Величина T_m отмечает пороговое значение температуры, при которой поры становятся активными.

Отметим, что величины остаточной плотности ρ_p и пористости ω являются зависимыми определяющими параметрами, поскольку их скорости изменения определяются скоростью пластической деформации. Зависимым определяющим параметром является и плотность, поскольку скорость ее изменения определяется скоростью деформации (уравнение неразрывности). Это не мешает применять зависимые определяющие параметры при записи выражений для свободной энергии и скорости диссипации, но упомянутые связи обязательно учитываются при выводе определяющих соотношений.

Первые для слагаемых в выражении диссипации описывают диффузию импульса и определяют вязкостные напряжения в среде. Функции λ_v и μ_v являются коэффициентами вязкости.

Третье слагаемое в выражении диссипации описывает эффекты вязкопластической деформации (образование и движение дислокаций, изменение внутреннего строения конденсированной среды). Множитель с функцией Хевисайда H обеспечивает режим обратимой (упругой) деформации для состояний внутри поверхности нагружения (текучести) $\Phi_p(T, \varepsilon, \varepsilon_p, \omega, \theta) = 0$. Упругопластический материал, для которого условие пластичности не зависит от скорости нагружения, отвечает случаю, когда скорость диссипации является однородной функцией первого порядка по скорости пластической деформации: $f_p = (\mathbf{e}'_p : \mathbf{e}'_p)^{1/2}$, иначе материал будет вязкопластическим, то есть нарастание пластических деформаций будет зависимым от скорости нагружения. Если множитель с функцией Хевисайда заменить единицей, то третье слагаемое будет описывать поведение ползучего материала.

Четвертое слагаемое в диссипации описывает эффект диффузии тепла, а $k_T \geq 0$ обозначает коэффициент теплопроводности.

Пятое слагаемое в диссипации отвечает за кинетику роста поврежденности, которая представляет плотность микротрешин. С ростом поврежденности, который происходит при выполнении условия разрушения $\Phi_\theta \geq 0$, сопротивление деформации, определяемое коэффициентами упругости, падает. Отметим, что такая модель континуального разрушения описывает ниспадающие ветви зависимости характерного напряжения от характерной деформации при сохранении корректности начально-краевой задачи, поскольку в модели нет математических конструкций типа касательного модуля упругопластичности и пространственный дифференциальный оператор остается положительно определенным.

Шестое слагаемое описывает кинетику пористости при горячем спекании и холодном прессовании.

Наконец, седьмое слагаемое описывает диффузию примесей в сплошной среде, оно устроено аналогично слагаемому для теплопроводности.

По заданным функциям свободной энергии и диссипации определяющие соотношения находятся так:

$$-\rho(\eta + \frac{\partial \varphi}{\partial T}) = -\rho\eta_D(\pi)$$

$$\overset{\circ}{\sigma} - \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \overset{\circ}{\varepsilon}} = \overset{\circ}{\sigma}_D (\pi)$$

$$-\rho \frac{\partial \varphi}{\partial \overset{\circ}{\chi}} = \overset{\circ}{\mathbf{X}}_D (\pi)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_D(\pi)$$

$$\mathbf{q}_{c\alpha} = [\mathbf{q}_{c\alpha}]_D(\pi)$$

где функции $Z_1 = \rho \eta_D$, $Z_2 = \overset{\circ}{\sigma}_D$, $Z_3 = \overset{\circ}{\mathbf{X}}_D$, $Z_4 = \mathbf{q}_D/T$, $Z_5 = [\mathbf{q}_{c\alpha}]_D/C_\alpha$ являются диссипативными потоками (обобщенными диссипативными силами) и определяются выражением для скорости диссипации, которое приводится к виду:

$$D = \sum_{i=1}^5 D_i \geq 0 , \quad D_i = Z_i \pi_i^{(2)}$$

где $\pi_1^{(2)} = \frac{dT}{dt}$, $\pi_2^{(2)} = \overset{\circ}{\mathbf{e}}$, $\pi_3^{(2)} = \frac{d\overset{\circ}{\chi}}{dt}$, $\pi_4^{(2)} = \nabla T$, $\pi_5^{(2)} = \nabla C_\alpha$ - обобщенные скорости.

В частном случае обратимых процессов функции η_D , $\overset{\circ}{\sigma}_D$, $\overset{\circ}{\mathbf{X}}_D$, \mathbf{q}_D , $[\mathbf{q}_{c\alpha}]_D$ и, соответственно, скорость диссипации D равны нулю.

Скалярные функции φ и D представляются функциями инвариантов тензорных аргументов, что обеспечивает удовлетворение требований объективности и инвариантности определяющих соотношений при ортогональных преобразованиях (поворотах) начальной и актуальной конфигураций. Для облегчения выкладок при материальном дифференцировании по времени свободной энергии и при определении ее частных производных применяется материальное представление тензоров напряжений и деформаций (величины с нуликами), для которого дифференцирование по времени выражается обычными производными. По завершению выкладок делается обратный переход к пространственному представлению.

Для принятых в диссертации выражений свободной энергии и скорости диссипации определяющие соотношения имеют вид:

$$\begin{aligned} \sigma &= -p\mathbf{I} + \sigma'_c + \lambda_v(\mathbf{e} : \mathbf{I})\mathbf{I} + 2\mu_v\mathbf{e} , \quad \sigma'_c = 2\mu(\varepsilon' - \varepsilon'_p) , \quad \mathbf{e}'_p = \lambda_p \sigma' , \quad \mathbf{q} = k_T \nabla T \\ \mathbf{q}_{c\alpha} &= \mathbf{k}_{c\alpha} \nabla \mathbf{C}_\alpha , \quad p = \rho^2 \frac{\partial \varphi}{\partial \rho} , \quad \eta = -\frac{\partial \varphi}{\partial T} , \quad U = \varphi - T\eta , \quad s_\omega = \frac{\partial \varphi_\omega}{\partial \omega}(1 - \omega) \\ \frac{d\omega}{dt} &= -H(\omega)k_\omega^{-1}(p + s_\omega) , \quad \frac{d\theta}{dt} = -H(\Phi_d)k_d^{-1}\frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (12)$$

где s_ω - "напряжение спекания". Подробности, касающиеся определяющих уравнений, можно найти в работе [31]. А подробный вывод представленной системы уравнений дан в работе [11].

В области решения

$$\{\tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{V}, t \geq 0\}$$

требуется решить систему уравнений (1)-(10), дополненную недифференциальными по времени кинематическими соотношениями (11) и определяющими соотношениями (12), отвечающими заданному типу сплошной среды. Решение должно удовлетворять начальным условиям

$$t = 0, \quad \tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{V} : \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}_0(\tilde{\mathbf{x}}) \quad (13)$$

и граничным условиям:

$$t \geq 0, \quad \tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{S}_A \subset \tilde{S} : \mathbf{A} = \mathbf{A}_*(\tilde{\mathbf{x}}, t) \quad (14)$$

$$t \geq 0, \quad \tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{S}_B = \tilde{S} \setminus \tilde{S}_A, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{B}_n^*(\tilde{\mathbf{x}}, t) \quad (15)$$

В выражениях (14)-(15) функции правых частей помечены звездочками и являются заданными. Набор основных искомых функций

$$\mathbf{A} = (\rho, \mathbf{u}, T, \varepsilon_p, a_p, \theta, \omega, C_\alpha, \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x})$$

содержит те искомые функции, которые необходимы для вычисления всех остальных искомых функций в данный момент времени, не привлекая операции дифференцирования по времени. Плотность включена в число основных переменных для единобразия описания задач независимо от того, фигурирует ли начальная конфигурация в постановке задач (структурные среды) или нет (классическая гидрогазодинамика).

Величины \mathbf{B} характеризуют потоки величин \mathbf{A} , обусловленные диффузией и межмолекулярными силами:

$$\mathbf{B} = (0, \sigma, \mathbf{q}, 0, 0, 0, \mathbf{q}_{c\alpha}, 0, \tilde{\sigma})$$

Заметим, что при численном решении диффузионные потоки \mathbf{B} появляются во всех основных эволюционных уравнениях за счет схемной или искусственной вязкости.

Для корректности начально-краевой задачи (1)-(15) определяющие соотношения и начально-краевые условия должны удовлетворять дополнительным ограничениям, которые зависят от класса задач:

1) определяющие соотношения должны обеспечивать эллиптичность пространственных дифференциальных операторов правых частей при наличии потоковых членов \mathbf{B} . Это требование согласуется с законами термодинамики и отражает необходимое условие устойчивости задачи по Адамару. В нестационарных задачах это ограничение обеспечивает параболичность уравнений для вязких сред и гиперболичность уравнений для упругопластических сред и невязкого газа;

2) для стационарных задач ($\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 0$) граничные условия для уравнений с ненулевыми потоковыми членами \mathbf{B} должны быть консервативными ("самоуравновешенными"). Это ограничение выражает соответствующий данному уравнению закон сохранения. В случае уравнений равновесия деформируемых тел для корректности квазистатической задачи необходим налагаемый граничными условиями запрет смещений и поворотов тела как жесткого целого.

3) на входных границах, $((\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n} < 0)$, через которые сплошная среда втекает в область решения, должны быть заданы значения всех основных искомых величин для

случая сверхзвукового потока и "смягченные" граничные условия в случае дозвукового потока (Роуч, 1980; Федорченко, 1982), то есть, например, в этом случае одновременное задание давления и нормальной скорости на одной и той же границе переопределяет краевую задачу.

4) на выходных или "жидких" границах, $((\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n} > 0)$, должны ставится "мягкие" условия, то есть условия продолжения (экстраполяции) решения за границы области решения (например, равенство нулю первых или вторых нормальных производных от основных искомых функций). Родственный случай граничных условий представляют неотражающие граничные условия в задачах о распространении возмущений.

Важные случаи граничных условий, такие как контактные граничные условия, условия на межфазных границах и условия на подвижных свободных границах, а также другие особенности постановок задач, обсуждаются в диссертации при рассмотрении методов решения конкретных типов задач.

В третьей главе дано описание применяемых методов решения рассматриваемых задач.

Для решения задач сеточными методами надо прежде всего уметь строить сетки. В диссертации применяются следующие методы генерации начальных сеток: 1) 2D алгоритм автоматического формирования списков номеров узлов в 3-х и 4-х угольных ячейках и списков граничных узлов для заданного набора узлов сетки; 2) 2D алгоритм "нарезания пирога" для автоматизированной генерации узлов и ячеек в многосвязных областях с заданными таблично границами; 3) Несколько алгоритмов построения 2D сеток с помощью отображений: а) простейших квадратичных б) квазигармонических барьерных и с) описываемых уравнениями нелинейной упругости; 4) алгоритм генерации 3D сеток путем трансляции двумерных сеток вдоль заданной пространственной кривой. 5) Алгоритм сшивания сеток (возможно, несогласованных) на границах между подобластями.

Описание алгоритмов открывают явные лагранжевые схемы расчета задач динамики упругопластических сред, представляющие конечно-элементные вариации метода М.Уилкинса: схема типа "крест", схема квазивторого порядка точности (аналог трехслойной схемы Адамса-Башфорта) и полностью консервативная схема Самарского-Попова. К настоящему времени такие схемы реализованы многими авторами во многих вариантах. В нашем случае с специфическими чертами являются следующие: 1) применение пластических деформаций вместо напряжений в составе набора основных искомых функций во избежание дифференцирования закона упругости и для обеспечения запоминания средой своего начального состояния; 2) определение всех искомых функций в узлах сетки с использованием линейной интерполяции, а не кусочно-постоянной для деформаций и напряжений, как обычно, что подготавливает алгоритм к обобщению на случай произвольно подвижных сеток; 3) подавление коротковолновых пилообразных возмущений нелинейным монотонизирующим сглаживанием, включаемым только для устранения немонотонностей, что работает лучше, нежели линейно-квадратичные искусственные вязкости в стандартных уилкинсовских алгоритмах.

Далее описано превращение явных схем в неявные при минимальном изменении ал-

горитма. А именно, основной алгоритм явного расчета шага по времени в неявной схеме выполняет работу по определению невязки, а решение находится с помощью итерационного процесса метода сопряженных градиентов, оперирующего с этими невязками. При этом на каждом шаге исходные уравнения применяются в квазилинеаризованной по Ньютону форме и никакой необходимости в формировании матриц жесткости нет. Поэтому неявные схемы реализованы как надстройка над обычной явной схемой. Для обеспечения устойчивости итерационного процесса по отношению к ошибкам округления, возмущениям оператора задачи и свободных членов (правых частей) в алгоритмы введено простейшее преобуславливание, подразумевающее умножение невязок на приближенную обратную матрицу системы уравнений, роль которой играет диагональная матрица, составленная из диагональных элементов матрицы жесткости. Фактически эта операция реализует масштабирование неизвестных и является вполне достаточной для обеспечения устойчивости итерационного процесса неявных схем.

Описанная выше схема решения задачи и есть предложенный автором (1978,...) безматричный метод конечных элементов. Он очень эффективен со многих точек зрения: он прост в реализации как обычный явный метод, по гибкости алгоритма не имеет себе равных среди неявных методов, что особенно привлекательно для исследовательских программ; по быстроте отыскания решения он превосходит другие методы - известные асимптотические оценки и практические измерения быстродействия показывают почти линейный рост числа операций с ростом числа неизвестных. Потребляемая дополнительно по сравнению с явными методами память требуется для размещения 5 дополнительных векторов, длина которых равна числу неизвестных, независимо от числа пространственных переменных задачи. Отказов практически не наблюдается, за исключением случаев явно некорректных задач, то есть уровень рабочности (работоспособности в широком диапазоне входных параметров задачи) очень высок.

Поскольку явные и неявные алгоритмы представимы в виде цепочки операций с векторами, была выполнена векторизация алгоритмов. Были также проведены эксперименты с построением распараллеленных алгоритмов. Было выяснено, что гибкость алгоритмов при векторизации и распараллеливании теряется, появляется ярко выраженная зависимость исследования от привязки к определенному компьютеру и базовому математическому обеспечению. Поэтому в диссертации предпочтение было дано скалярным вариантам алгоритмов.

Были построены алгоритмы, работающие на вложенных сетках, реализованные в трех вариантах: применение вложенных сеток для ускорения сходимости итерационных процессов (по аналогии с методом Р.П. Федоренко), для уточнения решения с помощью локально вложенных шаблонов (по А. Брандту), для уточняющей экстраполяции решений на вложенных сетках на сетку с "нулевым шагом" (по Ричардсону). Первые два варианта были в дальнейшем отвергнуты как лишающие алгоритм гибкости. Третий вариант применяется эпизодически для оценки точности решений. Он не требует переделки программ, а лишь просчета вариантов на вложенных сетках.

Для обобщения лагранжевых схем на случай произвольно подвижных лагранжево-эйлеровых сеток необходим учет конвективного движения, обусловленного разницей в скоростях движения среды и координат. Применяемые в диссертации схемы, учитывая-

ющие конвекцию пояснены на примере стандартного уравнения конвекции-диффузии:

$$\int_V ((dA/dt - C)\delta A + (\mathbf{k} \nabla A) \cdot \nabla \delta A) dV = \int_{S_1} B_n \delta A dS$$

где A - величина, для которой записано данное балансное соотношение; $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla$ - материальная временная производная; k - коэффициент физической диффузии; B_n - поток величины A через площадку $\mathbf{n} dS$. Частная производная по времени берется вдоль траекторий подвижных координат, скорость движения которых обозначена символом \mathbf{w} , \mathbf{u} - материальная скорость.

Многочисленные эксперименты со схемами, реализующими центральные и направленные против потока разности при аппроксимации конвективных членов склонили автора к использованию центрально-разностных аппроксимаций. Будучи снабженными хорошим регуляризатором, обеспечивающим монотонное поведение схемы, роль которого играют искусственные или аппроксимационные вязкости, центрально-разностные схемы дают результаты не хуже схем с направленными разностями, но в условиях нерегулярных сеток имеют преимущество однородности и простоты алгоритма. Кроме того, бесхитростное применение конечноэлементной аппроксимации с использованием стандартных базисных функций приводит именно к схемам, которые на равномерных сетках совпадают со стандартными центрально-конечно-разностными схемами.

В качестве регуляризатора для центрально-разностных схем учета конвекции применялась искусственная вязкость ν , вид которой подсказывает анализа дифференциальных приближений сеточных уравнений по Хирту и Шокину. Исправленная вязкость записывается так:

$$\tilde{k}^n = k^n \frac{1}{1 + \nu/k^n} + \nu, \quad \nu = 0.5 \max(|u - w|h, |u - w|^2 \Delta t_n)$$

Чтобы максимально сблизить величины эффективной (исправлена + аппроксимационная) и физической вязостей при сохранении монотонности схемы, в приведенном выражении исправленного коэффициента вязкости применена коррекция физической вязкости по методу экспоненциальной подгонки А.А. Самарского.

Рассмотрим особенности реализованных схем, которые накладывает сквозной счет ударных волн и зон разрежения. Анализ дифференциальных приближений явных схем показывает, что для устранения дестабилизирующих членов с отрицательным коэффициентом вязкости, обусловленных явными аппроксимациями консервативных напряжений (давления, в случае газовой динамики, упругие напряжения в случае структурированных сред), их надо экстраполировать на новый временной слой:

$$\sigma_C^{n+1} = \sigma_C^n + \partial \sigma_C / dt \Delta t_n$$

Этого однако недостаточно, поскольку анализ дифференциальных приближений неточен и дать истолкование всем дополнительным членам, да и найти их всех, и аппроксимировать в общем случае не удается. Поэтому дополнительно применялась

нелинейная монотонизация решения, уже упоминавшаяся выше при описании лагранжевых схем. Такая монотонизация сводится к покоординатному анализу локального поведения решения либо непосредственно по его узловым значениям, либо по значениям насчитанных по полученному решению его вторых производных. Изменение знака второй производной рассматривается как индикатор немонотонности решения и необходимости включения максимального сглаживания. Покоординатное сглаживание лучше обнаруживает и устраняет нефизическую рябь, чем сглаживание на основе анализа решения сразу во всей 3D окрестности отдельного узла. Число точек, в которых на отдельном шаге по времени включается нелинейная монотонизация, очень мало, поэтому профили скачков получаются крутыми, а решение монотонным. В зонах сильного разрежения может появляться локальная неустойчивость, если упомянутые здесь регуляризаторы попробовать отключить при $\nabla \cdot \mathbf{u} > 0$.

В попытках лучшего описания решений при наличии ударных волн были реализованы схемы типа метода Мак-Кормака с той разницей, что вместо альтернирующих направленных разностей в диссертации в паре с центральными разностями применялась альтернирующая (плюс/минус) искусственная вязкость уже рассмотренных выше видов. Кроме того, в отличие от метода Мак-Кормака, который не подстраивается под состояние среды, альтернирование вязкости ("антидиффузия") включалась здесь только в узких зонах близи сильных ударных волн (при $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_n < -0.01$). Стандартные тесты для сверхзвуковых течений совершенного идеального газа (поршень, канал со ступенчатым сужением, диск поперек потока) показали, что такая схема в отличие от схемы Мак-Кормака устойчива в зонах разрежения и показывает неплохие решения.

Отметим, что хотя применяемые схемы расчета конвекции неконсервативны, они используют глобальный контроль погрешности в законах сохранения массы, импульса, энергии и концентраций. Такой контроль дополнен включаемой/отключаемой коррекцией решения, подправляющей функции приращений массы, импульса, энергии и концентраций на шаге по времени путем умножения на число, определяемое так, чтобы глобальное балансное соотношение для сохраняемой величины выполнялось точно. Отметим, что такая коррекция делает решения более гладкими, не размазывая дополнительно скачки.

Далее описаны конечноэлементные алгоритмы для несжимаемых сред на примере уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска. Были реализованы в вариационной интерпретации метода Бубнова-Галеркина известные явно-неявные схемы коррекции давления (расщепления по физическим процессам), в которых давление определяется из условия несжимаемости, принимающего вид уравнения Пуассона для давления (модификации методов расщепления Харлоу-Велча, Гущина-Щенникова). Представленная в диссертации вариационная интерпретация этих схем может трактоваться как реализация метода множителей Лагранжа, если рассматривать давление как множитель Лагранжа для условия несжимаемости. Также в диссертации для многих задач о течениях несжимаемых сред применен неявный метод штрафных функций (О.А. Ладыженская, 1970). Реализованы также алгоритмы, реализующие явные схемы искусственной сжимаемости, но они мало использовались, поскольку сильно уступают по эффективности и точности упомянутым

выше методам.

Далее рассмотрены алгоритмы управления произвольно подвижными сетками, разработанные и/или реализованные в диссертации.

Геометрическая адаптация. В задачах формования, а также в задачах об ударных взаимодействиях деформируемых тел, характеризующихся особенно заметными изменениями геометрии тел, в подвижных лагранжевых сетках появляются ячейки, уменьшившиеся до очень малых размеров. Из-за этого шаг по времени в явных схемах становится неприемлемо малым и дальнейшее по времени определение решения становится практически невозможным. Выход из этого затруднения предоставляют произвольно подвижные сетки, если управлять их движением так, чтобы каждый узел сетки занимал бы положение, по возможности наиболее близкое к геометрическому центру относительно его соседей. То есть, такая произвольно подвижная сетка адаптируется к подвижным лагранжевым границам, обеспечивая почти равномерное расположение внутренних узлов. Для коррекции положения узлов и определения скоростей их движения на каждом шаге проводилось сглаживание положений внутренних узлов (их сдвиг в сторону геометрического центра относительно соседей). Положение граничных узлов также корректировалось путем их смещения в касательной плоскости к границе опять-таки к геометрическому центру соседей. Граничные точки на ребрах (в углах), в которых нормаль к границе меняется скачком, принимались лагранжевыми во избежание грубых искажений формы тел. Другой способ геометрической адаптации подвижной сетки основан на построении отображения сетки в начальной конфигурации подвижной области решения на текущую ее конфигурацию с помощью барьерных гармонический отображений или отображений, определяемых уравнениями нелинейной упругости.

Динамическая адаптация подразумевает сгущение сетки в зонах больших градиентов решения для уменьшения ошибок аппроксимации, которые имеют в этих зонах максимум при использовании равномерных сеток. Зоны больших градиентов связаны со скачками решения и пограничными слоями. Было реализовано два алгоритма. Первый был заимствован из работы (Catherall, 1991) и представляет сглаживание координат внутренних узлов сетки, подправленное так, чтобы узел смещался более в сторону того соседа, в котором значение адаптационной функции (некоторой нормы градиентов решения) максимально. Чтобы не допустить порчу сетки из-за выворачивания ячеек, алгоритм содержит ограничение на минимальный размер ребра сетки, по достижении которого дальнейшая адаптация прекращается. Гарантий корректности адаптивной сетки алгоритм не дает.

Лучшие результаты получены при использовании алгоритма [11], строящего адаптивную сетку с помощью уравнений нелинейной термоупругости, в которых норма градиентов решения играет роль антитемпературы: там, где она велика, сетка (сеточная среда) сгущается. Алгоритм интегрирования сеточных "термоупругих" уравнений реализован по неявной схеме "ньютоновская квазилинеаризация плюс сопряженные градиенты", аналогично тому, как это сделано выше для уравнений термоупругопластичности. Неявное интегрирование приводит не только к ожидаемому уточнению решений, но благодаря эффективности неявной схемы почти не замедляет основную

(возможно, явную) схему решения термомеханической задачи.

Как хорошо известно, основные заморочки в численных методах МСС связаны с реализацией граничных условий, которая может занимать до 90% от кода решения. Поэтому дальнейший материал 3-й главы содержит описание алгоритмов для расчета подвижных контактных, межфазных и свободных границ, разработанных и применяемых в диссертации.

Расчет контакта деформируемых тел описан по материалам работ Бураго и Кукуджанова [13, 14, 15, 16, 18, 19, 20]. Реализованы алгоритмы метода множителей Лагранжа (для явных схем) и штрафных функций (для неявных схем). Описана цепочка проверок для граничных узлов и ячеек для быстрого отбора контактных пар "узел - граничная ячейка". Описаны модифицированные вариационные формулировки исходных уравнений в форме Бубнова-Галеркина для методов множителей Лагранжа и штрафных функций и соответствующие алгоритмы определения контактных нагрузок путем выполнения условий непроникания и закона трения. Показано, как контактные алгоритмы включаются в рассмотренные выше явные и неявные схемы.

Далее рассмотрена группа алгоритмов, предоставляющая возможность сквозного счета свободных подвижных границ и являющаяся развитием метода фиктивных областей применительно к подвижным областям решения. Это методы дискретных и непрерывных маркеров. Общей чертой указанных методов является применение окаймляющих область решения (и область ее возможного движения) равномерных сеток, из которых исключаются ячейки, не принадлежащие области решения. Это делается путем определения рабочих ячеек (занятых сплошной средой):

- по значению функции области (1) или (0) в зависимости от принадлежности ячейки области, занятой рассматриваемой сплошной средой (в исходном методе фиктивных областей);
- по наличию в ячейке дискретных маркеров, то есть лагранжевых нематериальных частиц, движущихся вместе с материальной сплошной средой (в методах дискретных маркеров);
- по значению функции непрерывного маркера в рабочих (> 0.5) и нерабочих (< 0.5) ячейках (методы непрерывного маркера).

Наиболее удобен для формулировки граничных условий метод непрерывного маркера, определяющий границу как изоповерхность со значением маркер-функции 0.5, а нормаль и кривизну границы через производные маркер-функции.

В диссертации реализованы все три типа алгоритмов для общего трехмерного нестационарного случая сжимаемых и несжимаемых вязких сред. Эти алгоритмы сквозного счета воплощают уже рассмотренные выше явные и неявные варианты метода конечных элементов на равномерной окаймляющей эйлеровой сетке.

Алгоритм метода фиктивных областей позволяет решать задачи МСС в многосвязных трехмерных областях при весьма грубо учете граничных условий.

Метод дискретных маркеров позволяет рассматривать задачи МСС со множественными рождающимися и исчезающими подвижными свободными границами также при весьма грубо учете граничных условий. Характерной новой особенностью нашей реализации является расчет течений с входными и выходными границами с использова-

нием переменного числа маркеров, рождающихся на входных границах и исчезающих на выходных границах.

Наконец, метод непрерывного маркера позволяет рассматривать те же задачи, но более экономно использовать память вычислительной машины и точнее учитывать граничные условия. Поведение непрерывного маркера описывается обычным уравнением переноса. Для предотвращения размыва границ из-за счетной диффузии применялась коррекция функции непрерывного маркера, включающая антидиффузионное степенное преобразование найденного нового значения непрерывного маркера, оставляющее его значения, близкие к единице или к нулю, без заметных изменений и приближающее промежуточные значения к ближайшему из указанных предельных. Затем применялась дополнительная коррекция приращения маркер-функции на шаге по времени путем умножения ее на число для точного выполнения глобального закона сохранения для маркер-функции.

Заключают третью главу алгоритмы расчета межфазных границ. Было реализовано два типа алгоритмов: 1) В первом алгоритме проводилось явное выделение фазовой границы, подвижные эйлерово-лагранжевы сетки в подобластях строились методом квазигармонических отображений (С.А.Иваненко, 1997), а скорость движения межфазной границы определялась условиями Стефана. 2) Во втором алгоритме применена схема сквозного счета межфазных границ, предложенная А.А. Самарским и Б.Д. Моисеенко (1965), учитывающая условия Стефана в модифицированном уравнении баланса тепла.

Все методы и алгоритмы третьей главы реализованы в пакете прикладных программ АСТРА, подробное описание которого и результаты расчетов можно найти на Интернет сайте автора www.ipmnet.ru/~burago.

В четвертой главе приведены результаты исследования ряда технологических и природных процессов.

Пакет программ АСТРА, в котором реализованы представленные в третьей главе методы решения, тщательно протестирован автором и его заинтересованными коллегами, соавторами и заказчиками проектов. Это является определенной гарантией достоверности представленных в диссертации результатов численного моделирования.

Сначала рассмотрены типичные квазистатические задачи упругопластиности: осесимметрическая задача о гребенчатом соединении и задача о нагружении плотины, скального основания и подстилающего грунта силами тяжести. Затем получены решения контактных задач с большими упругопластическими деформациями: задача об штамповании чашки из круглой пластины, задача об изготовлении лопатки турбины из круглой цилиндрической заготовки (Рис. 1). В задаче о лопатке применена геометрически аддитивная произвольно подвижная сетка, поскольку из-за больших деформаций решение на лагранжевой сетке без ее перестройки в процессе решения получить не удается.

Далее представлены типичные динамические задачи упругопластиности о высокоскоростных соударениях упругопластических тел (пластины, цилиндров, шаров) в двумерной и трехмерной постановке (Рис. 2), учитывающие большие деформации, переменный контакт и рикошет, образование всплесков (усов).

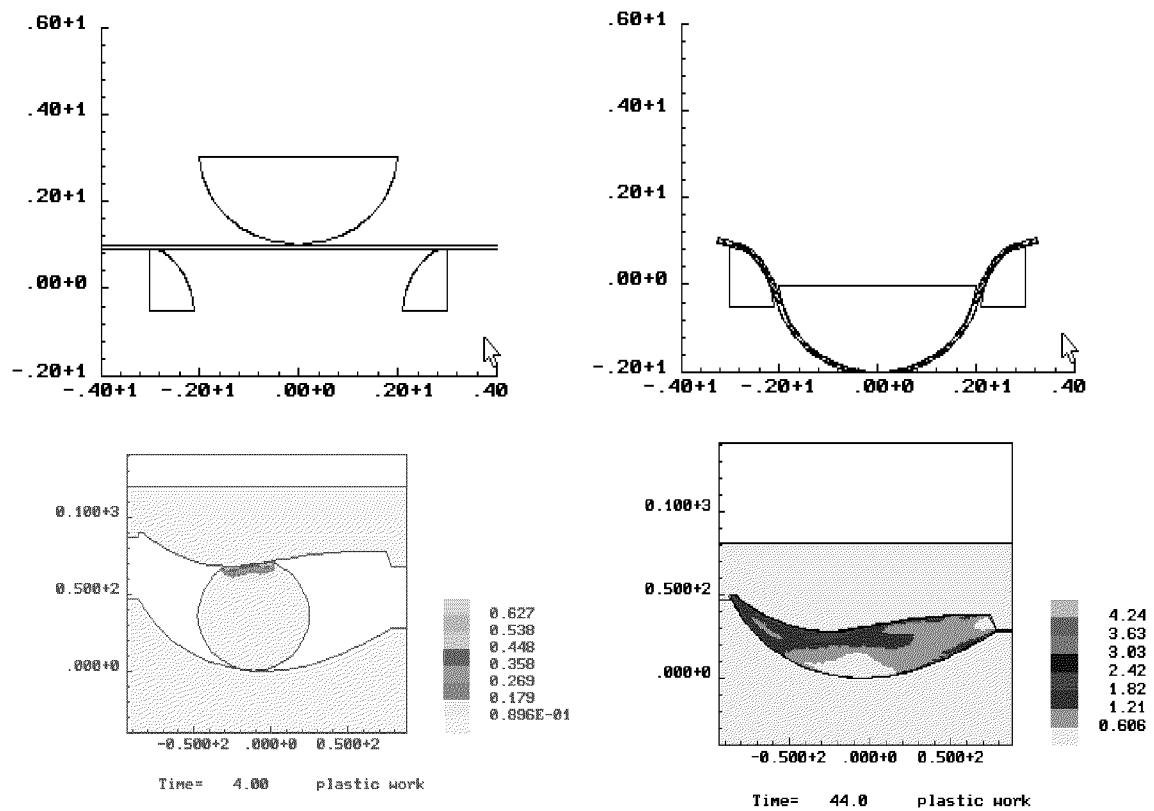


Рис. 1. Контактные задачи

с осесимметричными формами:

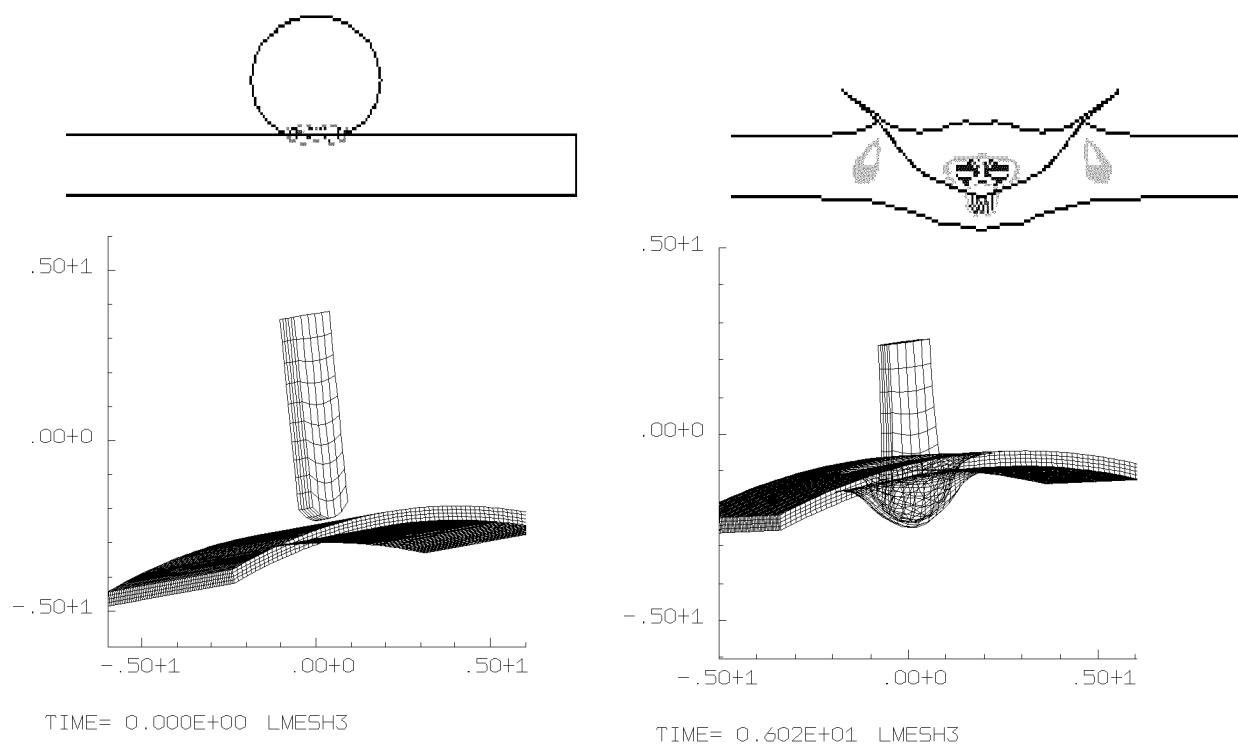


Рис. 2. Осесимметричные и трехмерные контактные динамические задачи.

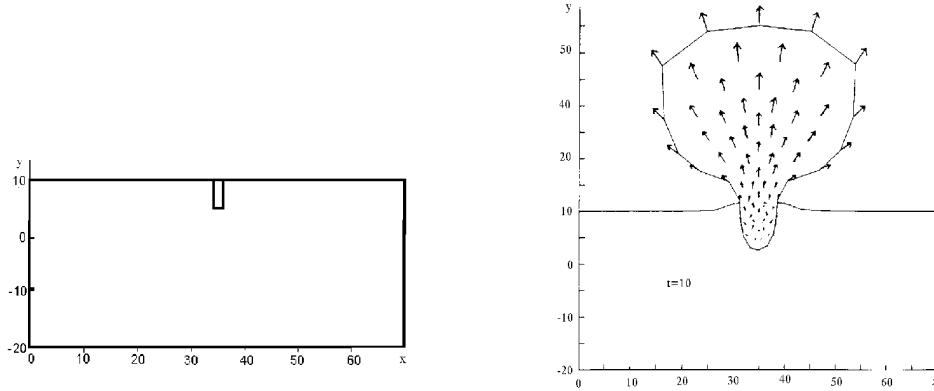


Рис. 3. Образование воронки при взрыве.

Получено решение задачи о взрыве заряда на дневной поверхности и образовании воронки, в которой рассчитано взаимодействие грунта и высокогенергетических газовых продуктов взрыва (Рис. 3).

Далее рассмотрены задачи о разрушении упругопластических тел распространяющимися магистральными трещинами, которые имитировались в соответствии с теорией континуального разрушения главы 2 узкими зонами локализации деформаций и всплеска поврежденности. Получены решения квазистатической задачи о разрушении растягиваемого образца с концентратором напряжений из-за излома границы (Рис. 4). Изучено влияние критерия разрушения, пластических деформаций, кинетики поврежденности, зависимости сопротивления среды от поврежденности, локального нагрева зоны ожидаемого разрушения. На основе опыта расчетов даны рекомендации по построению теоретических моделей и алгоритмов расчета локализации деформаций. Представлены также решения задач о разрушении при технологическом процессе резки металлического листа, об обрушении склона под действием веса сооружения.

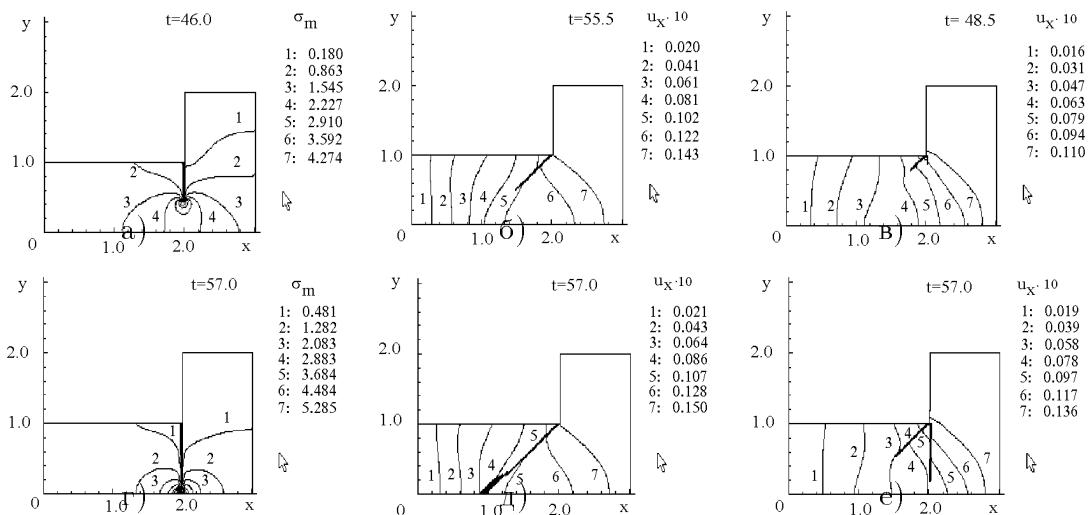


Рис. 4. Моды процесса разрушения, изолинии среднего напряжения σ_m и горизонтального перемещения u_x для случаев упругого материала (а, г), упругопластического материала (б, д), упругопластического материала при совместном действии растяжения и нагрева узкой вертикальной зоны под концентратором (е, е). Показаны средняя (а, б, г) и финальная (д, е) стадии процесса.

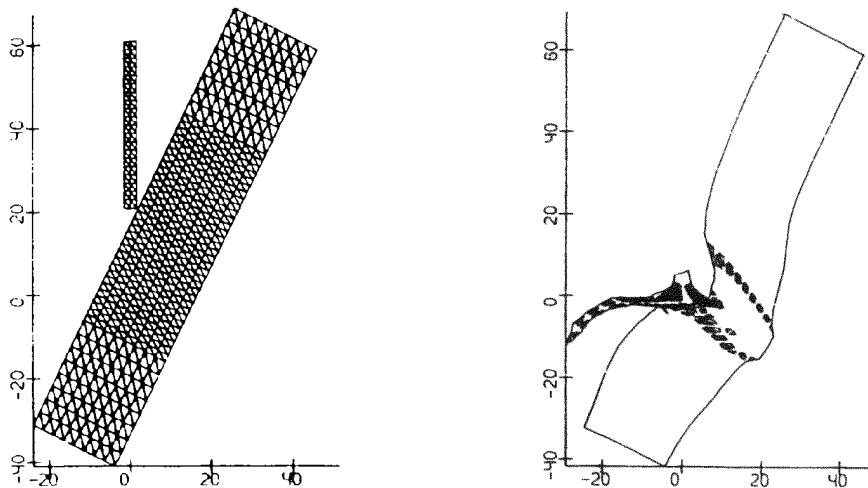


Рис. 5. Соударение пластин под углом с учетом разрушения. Эволюция зон разрушения. Окончательно пластина раскололась на три части. Ударник разрушен полностью.

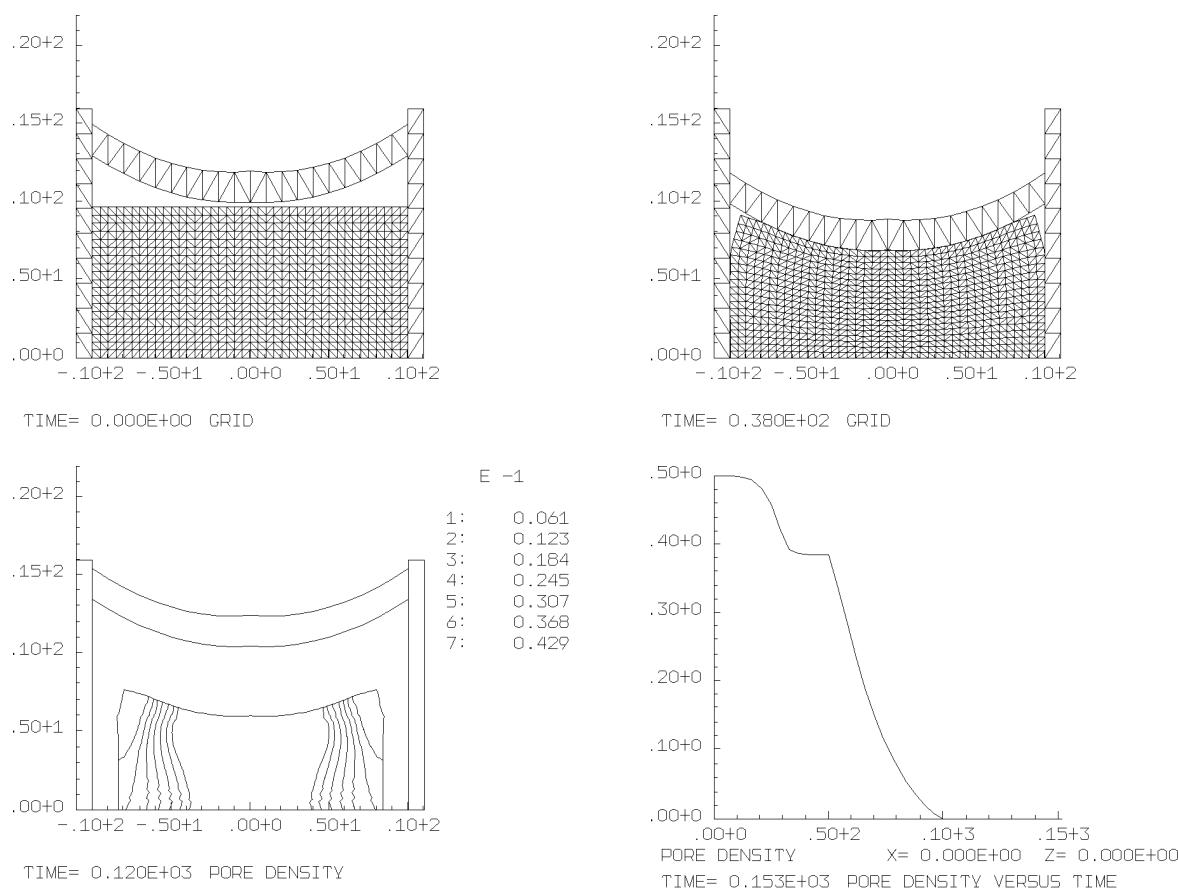


Рис. 6. Изменение формы образца во время стадии холодного прессования композитного порошка в цилиндрической форме сферическим штампом ($0 \geq t \geq 38$), поведение расчетной сетки (верхний ряд). Форма тела, распределение пористости после спекания ($t = 120$) и история пористости в центре образца (нижний ряд).

Получено решение о разрушении и локализации деформаций для динамической двумерной задачи соударения пластин под углом. Прослежен процесс раскалывания препятствия при срабатывании и рикошетировании ударника (Рис. 5).

Теорию консолидации главы 2 иллюстрируют задачи о спекании порошковых композитов. Работа теории проверена на модельных задачах о прессовании и спекании в условиях однородного состояния, имеющих простые аналитические решения. Затем дано численное решение о спекании образца в условиях неоднородного состояния для последовательных фаз технологического процесса: холодное прессование, нагрев и спекание, охлаждение. Рассчитана эволюция формы образца и свойств композитного материала, поля остаточной пористости, остаточных напряжений и деформаций,

Исследованы типичные задачи о росте полупроводниковых кристаллов из расплавов. Течения расплава рассчитаны методами главы 3 по нестационарным уравнениям Навье-Стокса несжимаемой тяжелой жидкости с учетом зависимости плотности жидкости от температуры и концентрации в выражении для сил тяжести (приближение Буссинеска). Движение межфазной границы полагалось предопределенным распределением температуры, фронт кристаллизации плоским. Распределение примеси в растущем кристалле определялось по рассчитанной истории распределения примеси на межфазной границе с учетом явления отторжения примеси, лишь часть которой переходит из расплава в кристалл при отвердении. Многочисленные и разнообразные расчеты влияния различных условий (тепловая схема, величина сил тяжести, скорость роста, воздействие вращения кристалла и печки, вибраций, электромагнитных полей), были выполнены и основательно опубликованы, но не вошли в настоящую диссертацию, поскольку эти исследования, выполненные совместно с А.И. Федюшкиным и В.И. Полежаевым, выходят за рамки специальности, по которой представляется настоящая диссертация. Поэтому в диссертации приведен лишь типичный пример базисного расчета, иллюстрирующий дополнительные возможности разработанных автором алгоритмов пакета программ АСТРА.

Работа алгоритмов, реализующих метод непрерывного маркера, продемонстрирована на задаче о стекании тяжелой несжимаемой вязкой жидкости со свободными границами через дыру с верхнего этажа некоторого сооружения на нижний и на задаче об обрушении водяной колонны в замкнутом бассейне.

Работа алгоритмов дискретных маркеров проиллюстрирована расчетами падающих в бассейн, заполненный водой, горизонтальных водяных струй и расчетом фонтана и образующейся лужи от вертикально вверх бьющей водяной струи.

В конце четвертой главы приведены примеры применения алгоритмов динамически адаптивных сеток, основанных на нелинейной теории термоупругости, к двум задачам, являющихся известными международными тестами для проверок численных алгоритмов: 1) к задаче о сверхзвуковом течении совершенного газа в канале со ступенчатым сужением; 2) к задаче о термогравитационной конвекции. Сравнение полученных решений с известными показывает, что применение динамической адаптации позволяет "прыгать через сетку", то есть решение на адаптивной сетке с числом узлов n^N , где N - число пространственных независимых переменных, сопоставимо по точности с решением на равномерной сетке с числом узлов $(4n)^N$.

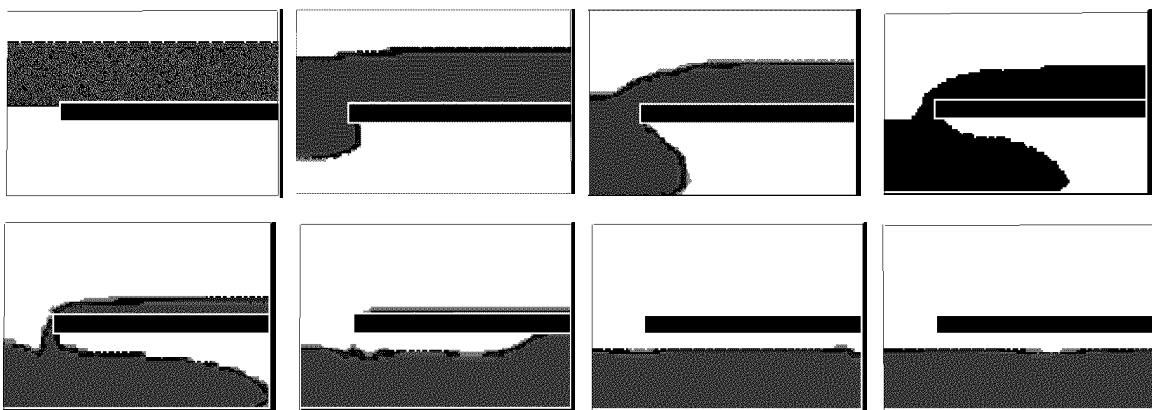


Рис. 7. Течение тяжелой вязкой жидкости в поле сил тяжести. Расчет свободных границ методом непрерывного маркера.

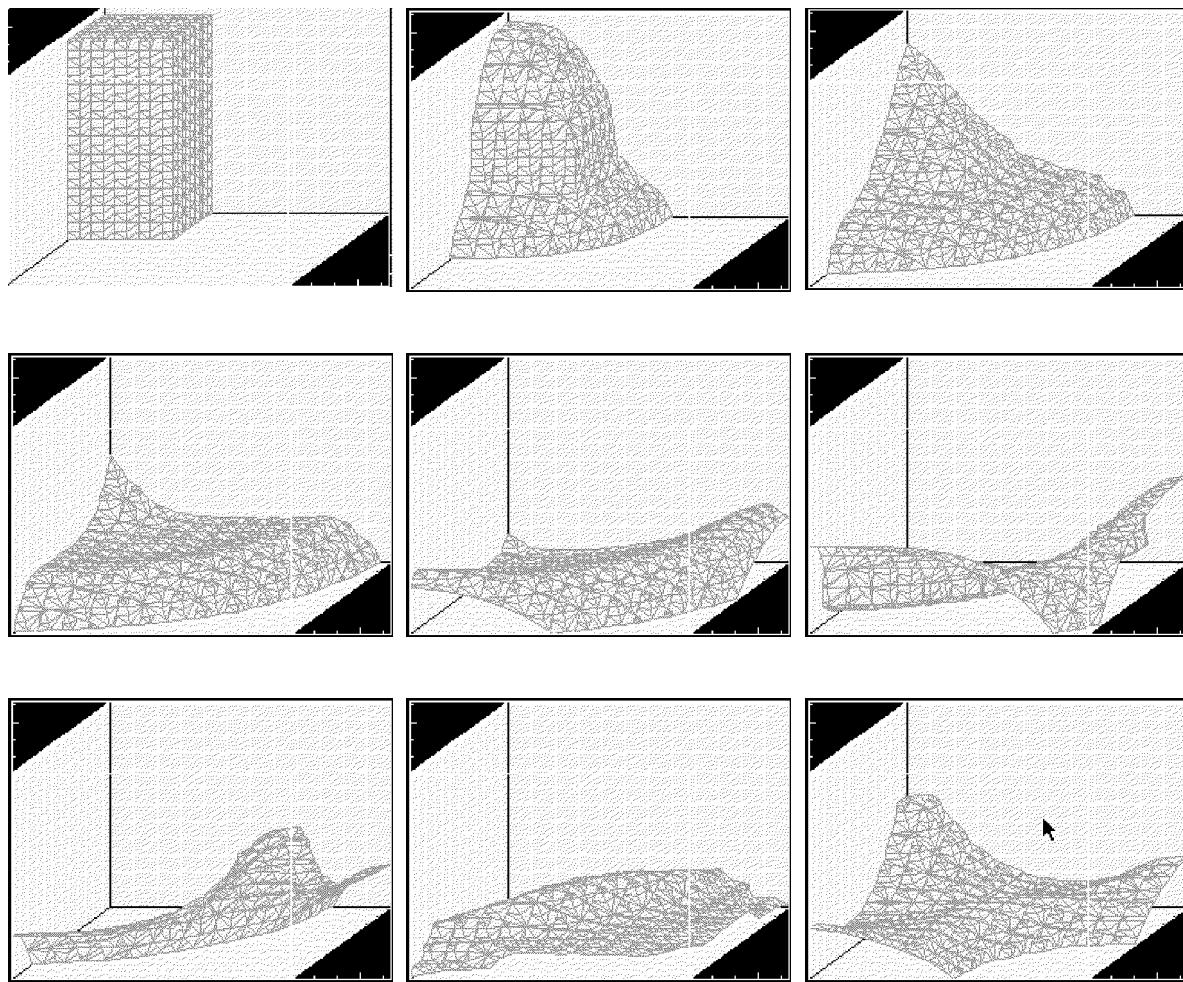


Рис. 8. Обрушение водяной колонны в замкнутом бассейне. Метод непрерывного маркера.

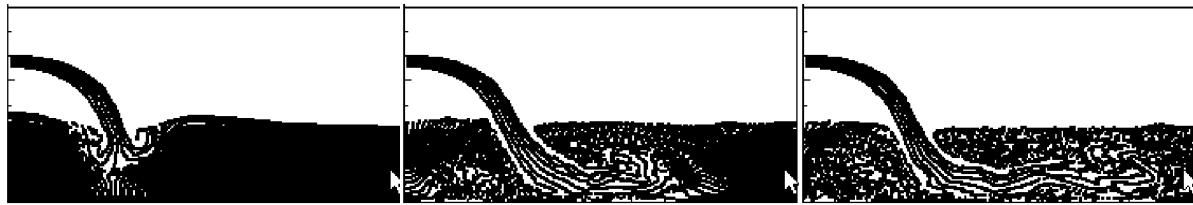


Рис. 9. Падение в водоем горизонтальной струи. Дискретные маркеры.

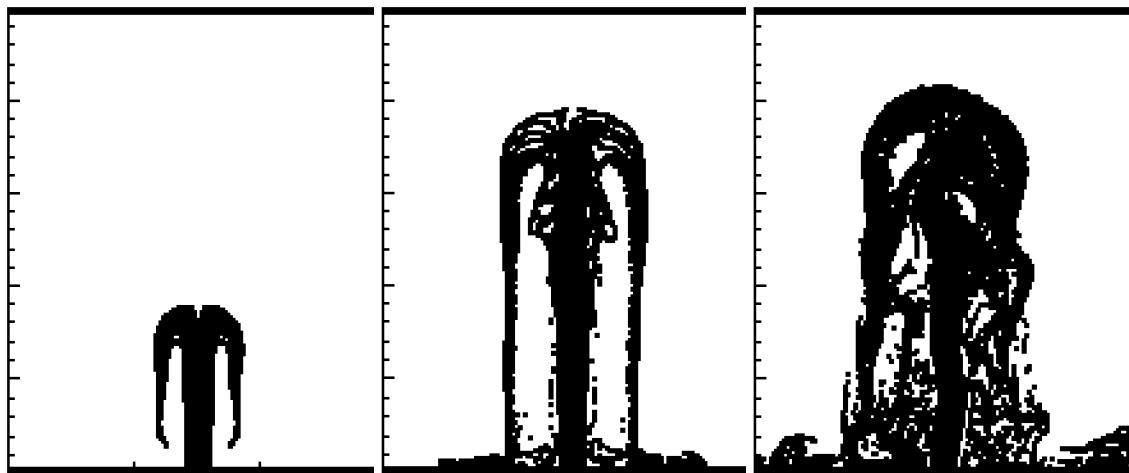


Рис. 10. Фонтан и лужа от вертикальной струи. Дискретные маркеры.

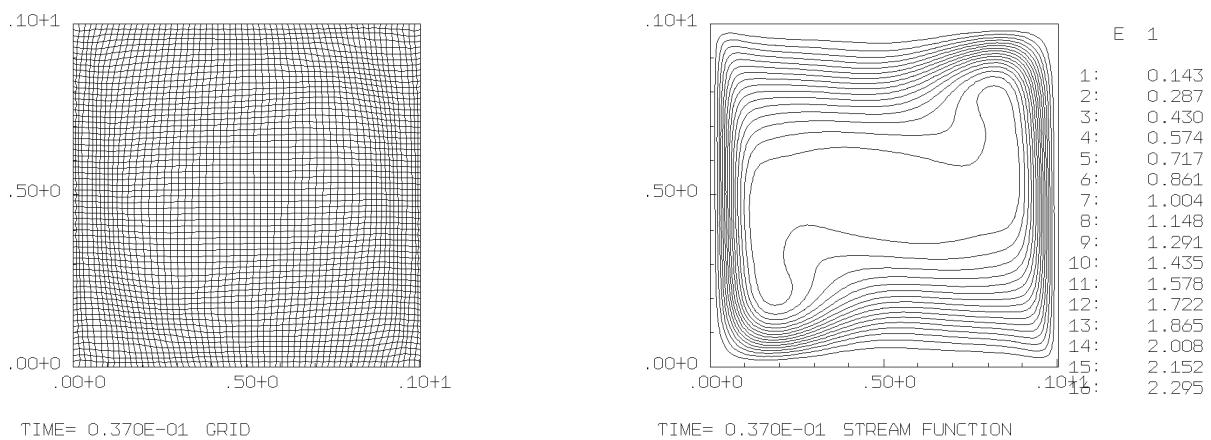


Рис. 11. Динамически адаптивная сетка, управляемая уравнениями нелинейной термоупругости и функции тока в задаче о термогравитационной конвекции вязкой несжимаемой жидкости при числе Грасгофа $Gr = 1400000$.

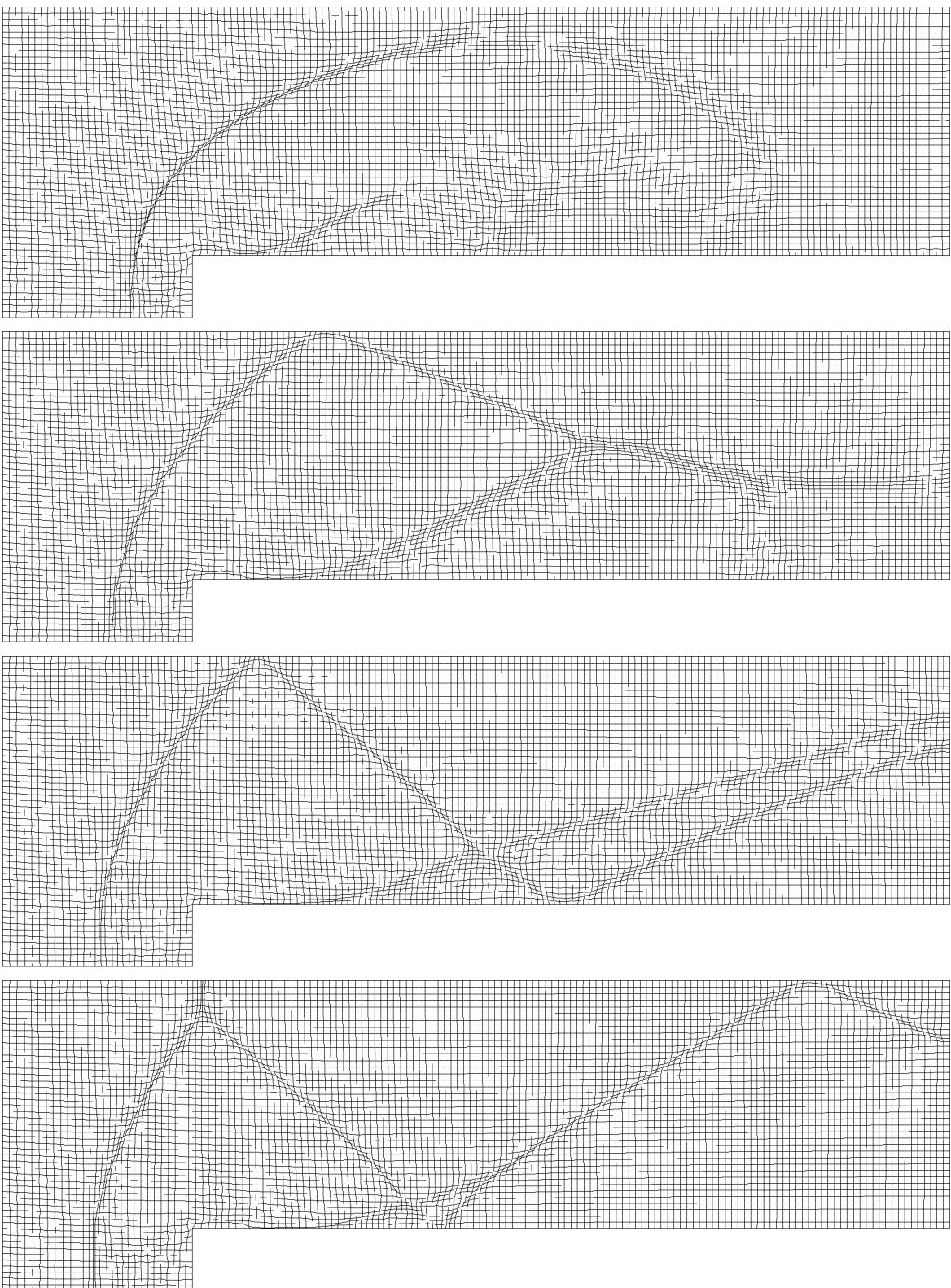


Рис. 12. Применение уравнений нелинейной термоупругости для управления динамически адаптивной сеткой в известном тесте о сверхзвуковом течении в канале со ступенчатым сужением для числа Маха $M=3$. Подвижная адаптивная сетка показана для моментов времени $0.5, 1.0, 2.0, 4.0$.

В заключении приводится сводка основных результатов диссертации.

ОСНОВНЫЕ НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Собрана, систематизирована и прокомментирована литература по численным методам решения задач механики с подвижными границами раздела сред при больших деформациях.

2. Получены новые результаты по теории механики сплошной среды. А именно, дано последовательное обоснование основных уравнений механики сплошных сред в подвижных адаптивных координатах. Показано, что модель сплошной среды полностью определяется заданием набора независимых параметров состояния, ответственных за происходящие процессы, и двух функций, свободной энергии и диссиpации, а определяющие соотношения получаются как решения неравенства диссиpации без привлечения каких-либо дополнительных принципов. Даны примеры вывода определяющих уравнений для типичных сред дифференциального типа: вязких/невязких жидких и газообразных, нелинейных термо-упругих, упругопластических и упруговязкопластических. Найдена термодинамически корректная форма уравнений повреждающейся упругопластической среды и построены уравнения для описания процессов спекания порошковых композитов.

3. Построен набор конечно-элементных алгоритмов, позволяющих единообразно решать трехмерные квазистатические и динамические задачи с подвижными границами раздела в рамках произвольного Эйлерово-Лагранжева подхода для сплошных сред дифференциального типа. По сравнению с традиционными матричными предложенные алгоритмы неявных схем очень просты и кратки, так как не содержат никаких матричных операций и основаны на ньютоновской квазилинеаризации (внешние итерации по нелинейности) и методе сопряженных градиентов (внутренние итерации для решения вспомогательных линеаризованных задач). Помимо простоты реализации и гибкости предложенные алгоритмы имеют значительное преимущество в быстродействии и требуют меньше машинной памяти по сравнению со стандартными матричными конечно-элементными алгоритмами. При решении задач динамики по эффективности данные неявные схемы вполне сравнимы с явными схемами. Явные схемы для нестационарных задач также разработаны и представляют различные варианты двухслойных схем с нелинейной искусственной вязкостью, обеспечивающей квазивторой порядок точности.

4. Для расчета подвижных границ раздела упомянутые выше конечно-элементные схемы снабжены рядом новых вспомогательных алгоритмов:

* для расчета контактных взаимодействий с учетом переменной зоны контакта реализованы алгоритмы явного выделения контактных границ, а именно метод множителей Лагранжа и метод штрафных функций;

* для улавливания зарождающихся и развивающихся контактных границ при разрушении тел с фрагментацией разработаны алгоритмы сквозного счета;

* для отслеживания подвижных свободных границ и границ раздела сред при экстремально больших деформациях развиты алгоритмы методов непрерывного и дискретных маркеров;

* для адаптации произвольно подвижных Эйлерово-Лагранжевых сеток к решению и к подвижным границам успешно применены обычные уравнения термоупругости.

5. На основе предложенной теории и методов решения автором создана программа АСТРА, используемая для решения широкого класса задач термомеханики о пространственных нестационарных течениях сплошных сред с упругими, вязкими и пластическими свойствами.

6. Алгоритмы и программа АСТРА успешно приложены к исследованию ряда технологических процессов, а именно:

- * к изучению контактных взаимодействий составных конструкций сложной формы,
- * к задачам формования,
- * к задачам высокоскоростных соударений упругопластических тел и взрыва,
- * к расчету процессов разрушения с фрагментацией,
- * к задачам спекания порошковых композитов,
- * к расчету выращивания полупроводниковых кристаллов,
- * к расчету сложных движений сплошной среды со свободными границами, ударными волнами и пограничными слоями.

Выполненное исследование выявило ряд новых физических фактов о данных процессах и показало эффективность разработанного математического обеспечения (ПП АСТРА) для их численного моделирования.

Литература

- [1] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. (1971) О влиянии задержки текучести материала на распространение упругопластических волн // Тез.докл. 5-го Всес.симп. по распространению упругих и упругопластических волн, Алма-Ата: Наука, с. 93.
- [2] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Распространение упруговязкопластических волн в средах с зараздыванием текучести // В книге "Распространение упругих и упругопластических волн", Труды 5-го Всес. симпозиума, Алма-Ата: Наука, 1973. С. 101-107.
- [3] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Численный метод решения геометрически нелинейных осесимметричных задач для упруго-пластических оболочек вращения // Строительная механика и расчет сооружений. 1976. N. 5, С. 44-49.
- [4] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Выпучивание и закритические деформации упругопластических оболочек вращения в условиях осевой симметрии // Численные методы в механике твердого деформируемого тела / Под ред. Г.И. Пшеничнова. М.: ВЦ АН СССР, 1978. С. 47-68.
- [5] Бураго Н.Г. Численный метод решения физически и геометрически нелинейных задач деформирования тел сложной формы // VII Всес. конф. по прочности и пластичности, Тезисы докладов, Горький: Горьк. ун-т, 1978, С. 24-25.

- [6] Бураго Н.Г. Численный метод расчета статических и динамических процессов деформирования упруго-пластических конструкций // Тезисы докладов Всес. конф. "Современные методы и алгоритмы расчета строительных конструкций", Таллин, 1979. С. 107-108.
- [7] Бураго Н.Г., Любимов В.М. Алгоритм дифференциальной прогонки с промежуточной ортогонализацией и нормировкой базисных решений для систем обыкновенных линейных дифференциальных уравнений. - Алгоритмы и программы. 1979. №. 4, П003713. С. 1-27.
- [8] Абрамов А.А., Бураго Н.Г., Диткин В.В. и др. Пакет прикладных программ LTP-BVP. Пакеты прикладных программ. Под ред. А.А. Самарского, А.А. Абрамова, Ю.Г. Евтушенко. М.: Наука, 1982. С. 18-23.
- [9] Абрамов А.А., Бураго Н.Г., Диткин В.В. и др. Пакет прикладных программ для решения линейных двухточечных краевых задач. Сообщения по программному обеспечению ЭВМ. М.: ВЦ АН СССР, 1982. 56 с.
- [10] Abramov A.A., Bourago N.G., Ditkin V.V. et al. Computer codes "LTPBVP" and "SPARS" // "Computational mathematics, Banach Center publications", v.13, PWN-Polish Scientific publishers, Warshaw 1984. P. 463-472.
- [11] Бураго Н.Г. Формулировка уравнений механики сплошной среды в подвижных аддитивных координатах // Численные методы в механике твердого деформируемого тела / Под ред. Г.И. Пшеничнова, М.: ВЦ АН СССР, 1984. С. 32-49.
- [12] Бураго Н.Г. Уравнения для расчета больших деформаций упругопластических оболочек // Численные методы в механике деформируемого твердого тела / Под ред. Г.И. Пшеничнова, М.: ВЦ АН СССР, 1984. С. 50-59.
- [13] Бураго Н.Г. Ударные взаимодействия упругопластических тел // Всес. конф. "Современные вопросы механики и машиностроения", Тезисы докладов, М.: ВИНТИ, 1986, вып. 2, С. 39.
- [14] Бураго Н.Г. Моделирование контакта упругопластических тел // VI Всероссийский Съезд по теоретической и прикладной механике. Аннотации докладов. Ташкент, 1986. С. 142-143
- [15] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Численное моделирование нестационарных процессов в упругопластической среде // Методы расчета высокоупругих материалов. Тезисы докладов. Рига: 1986. С. 112.
- [16] Бураго Н.Г. Конечноэлементные методы расчета контактных взаимодействий упругопластических тел при околозвуковых скоростях удара // Теория распространения волн в упругих и упругопластических средах / Под ред. М. В. Степаненко. Новосибирск: Институт горного дела СО АН СССР, 1987. С. 18-25.
- [17] Бураго Н.Г. О векторном варианте метода конечных элементов на вложенных сетках и векторизации КЭ-алгоритмов решения задач теории упругости и пластичности // II Всес. конф. "Численная реализация физико-механических задач прочности". Тезисы докладов. Горький: 1988. С. 18-19.

- [18] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Численное решение упругопластических задач методом конечных элементов. Пакет прикладных программ АСТРА // Препринт Института проблем механики АН СССР, 1988. №. 326. С. 1-63.
- [19] Бураго Н.Г. Численное моделирование взрывов в геоматериале // Труды Всероссийской конф. "Деформирование и разрушение горных пород", Бишкек: ИЛИМ, 1990. С. 49-56.
- [20] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Решение упругопластических задач методом конечных элементов // Вычислительная механика деформируемого твердого тела, М.: Наука, 1991. Вып. 2. С. 78-122.
- [21] Bojarintcev V.I., Bourago N.G., Lednev A.I., Frost V.I. Application of reflected grid method for examination of small surface deformation of moving fluid // J. of Flow Visualization and Image Processing, vol.1, No.3, 1993. P. 235-239.
- [22] Bourago N.G., Numerical Modeling of Unsteady Viscous Gas and Fluid Flows, // In: "Abstracts of 6th Nordic Seminar on Computational Mechanics", Lincoping, Sweden, 1993.
- [23] Bourago N.G. Computer code ASTRA for nonlinear problems in continuum mechanics // In: Trans. of 7th Nordic Seminar on Computational Mechanics, Trondheim, Norway, 1994. P. 48-49.
- [24] Kukudzhanov V.N., Bourago N.G., Kovshov A.N., Ivanov V.L., Shneiderman D.I. On the problem of damage and localization of strains. Goteborg: Chalmers Univ. of Tech., 1995. Dept. of Struct. Mech. publ. 95:11. P. 1-35.
- [25] Бураго Н.Г., Федюшкин А.И., Голышев В.Д., Гоник М.А., Полежаев В.И., Цветовский В.Б. Моды вынужденной и естественной конвекции и их влияние на распределение примеси в кристаллах, выращенных по методу АТФ1а // Труды III-й Межд. конф. "Кристаллы, рост, свойства, структура, приложения", том 1. г. Александров: ВНИИСИМС, 1997. С. 239-259.
- [26] Bourago N.G., Fedyushkin A.I., Polezhaev V.I. Modeling of Unsteady Submerged Heating Crystal Growth in Ground-Based and Microgravity Environment // Proceedings of Xth European and 6th Russian Symposium on Physical Sciences in Microgravity. St Petersburg: 1997. Vol. 2. С. 405-412.
- [27] Bourago N.G., Fedyushkin A.I. The rotation effect on dopant distribution during submerged heater crystal growth // Abstracts of Third Int. Conference "Single crystal growth, strength problem, and heat mass transfer", Obninsk, Russia, 1999. P. 195-198.
- [28] Bourago N.G., Fedyushkin A.I. Impurity distribution in submerged heater method with and without rotation // Proc. Int. Conf. Comput. Heat Mass Transfer, N. Cyprus, Turkey, 1999. P. 207-215.
- [29] Bourago N.G., Fedyushkin A.I., Polezhaev V.I. Dopant distribution in crystals grown by the submerged heater method under steady and oscillatory rotation // Advances in Space Research, 1999. Vol. 24. No. 10. P. 1245-1250.
- [30] Бураго Н.Г., Ковшов А.Н. Напряженно-деформированное состояние горной породы в окрестности скважин, Известия РАН, МТТ, 1999, N. 1, с. 139-143.

- [31] Бураго Н.Г., Глушко А.И., Ковшов А.Н. Термодинамический метод получения определяющих уравнений для моделей сплошных сред // Изв. РАН, МТТ, 2000, N.6, с. 4-15.
- [32] Бураго Н.Г., Ковшов А.Н. Модель дилатирующей разрушающейся среды // Изв. РАН, МТТ, 2001, N. 5, С. 112-117.
- [33] Бураго, Н.Г., Глушко, А.И., Ковшов, А.Н. Метод получения определяющих соотношений для моделей сплошных сред на основе законов термодинамики // VIII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике, Аннотации докладов, Пермь, 2001.
- [34] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. О континуальном разрушении и локализации деформаций // Прикладные проблемы прочности и пластичности, Межвуз. сб., М., Наука, 2001, вып. 63, С. 41-48.
- [35] Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Обзор контактных алгоритмов, Изв. РАН, МТТ, 2003. С. 1-73. (принята к печати).
- [36] Bourago N.G. A survey on contact algorithms // Proc. of the Workshop "Grid generation: theory and applications" / Ed. S.A.Ivanenko et V.A.Garanzha. Moscow: Computing Centre of RAS, 2002. P. 42-59.