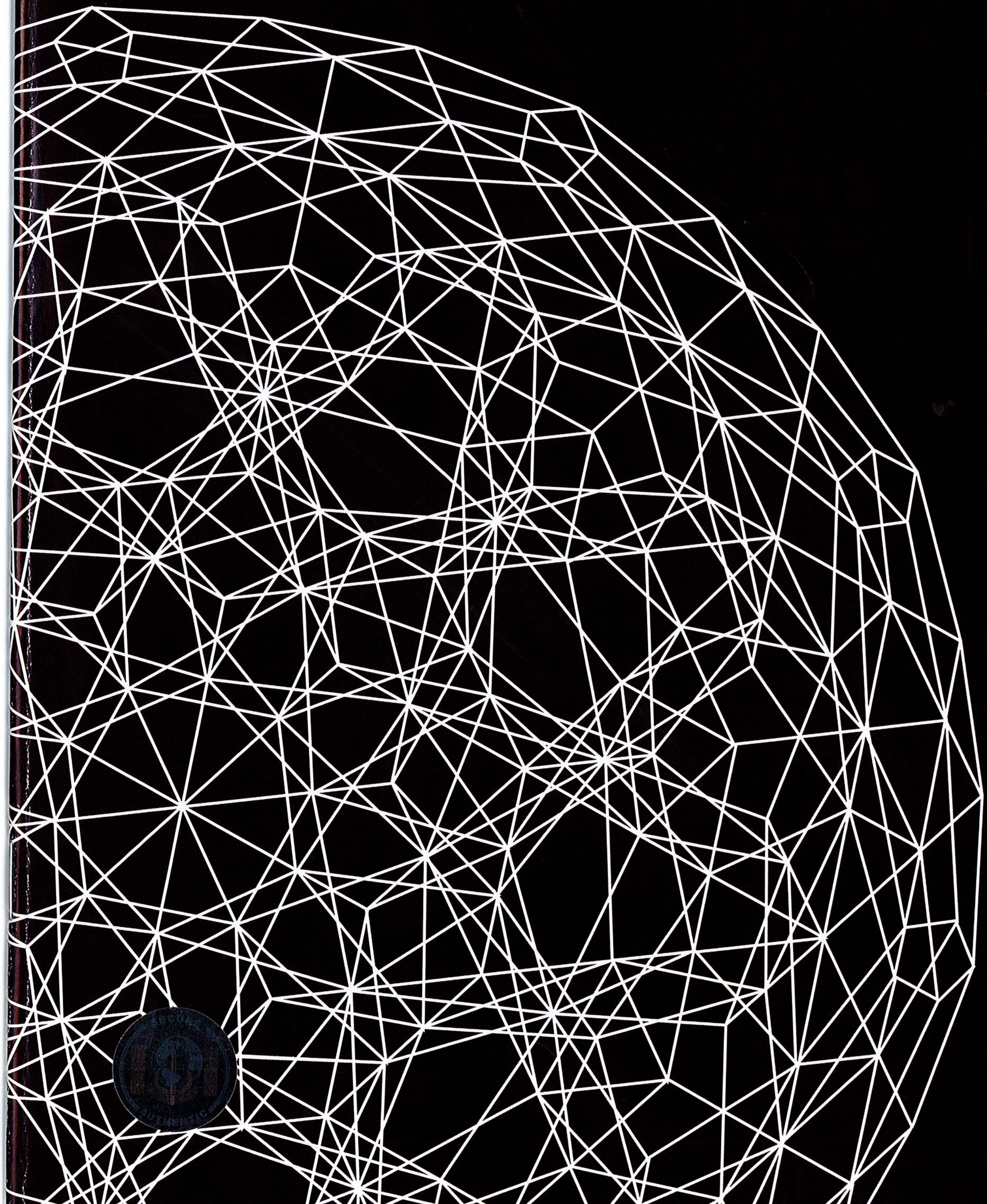
ISSN 1994-6260

ежемесячный научно-технический и производственный журнал

ВСЕ МАТЕРИАЛЫ

ЭНЦИКЛОПЕДИЧЕСКИЙ СПРАВОЧНИК



8
2015

УДК 539.3

Бессеточный подход к мультимасштабным мультифизическим расчетам конструкций из полимерных композиционных материалов

В.А. Нелюб, С.П. Ковалев, д-р физ.-мат. наук

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва
E-mail: kovalyov@nm.ru

Статья поступила в редакцию 07.05.2015 г.

Бессеточные методы позволяют проводить инженерные расчеты непосредственно по геометрической модели, построенной конструктором в CAD-системе, что помогает избежать трудоемкой и чреватой погрешностями процедуры генерации сетки конечных элементов. В настоящей работе среди бессеточных методов отобраны наиболее приспособленные для мультимасштабных мультифизических расчетов сложных твердотельных конструкций из полимерных композиционных материалов. Построен алгоритм расчета конструкций такими методами.

Ключевые слова: *бессеточные методы, мультимасштабные мультифизические расчеты, сложные твердотельные конструкции, R-функции.*

Полимерные композиционные материалы находят все большее применение в самых различных отраслях промышленности благодаря комплексу уникальных свойств, совершенствуются уже известные технологии производства изделий из стекло- и углепластиков [1—4] и методы исследования их свойств [5—7] и разрабатываются новые материалы и технологии [8—10]. Проектирование сложных конструкций из полимерных композиционных материалов сегодня немыслимо без их компьютерного расчета и мультимедийной визуализации (симуляции, от англ. *simulation*). Расчет заключается в численном решении задач математической физики, описывающих состояние конструкции, геометрическая форма которой задается инженером в системе класса CAD (Computer-Aided Design).

Традиционным методом расчета, широко используемым уже более полувека в системах класса CAE (Computer-Aided Engineering), является метод конечных элементов (МКЭ) [11]. Он предписывает искусственно расчленять геометрическую модель конструкции линиями или плоскостями на конечную совокупность областей (сетку элементов), взаимодействующих в граничных узловых точках. Области, содержащие криволинейные участки границы конструкции, отбрасываются. Элементы предполагаются настолько малыми, что дифференциальные и интегральные характеристики рассчитываемых физических полей в них могут быть с достаточной точностью приближенно заданы линейными формами (в более общем случае — полиномами). Это позволяет свести задачу математической физики к системе линейных алгебраических уравнений.

МКЭ хорошо зарекомендовал себя при расчете многих задач. Однако по мере роста конструктивной и эксплуатационной сложности изделия он предъявляет непомерно высокие требования к квалификации инженеров-расчетчиков и к мощности компьютеров, причем не столько при вычислении физических полей, сколько на стадии генерации сетки элементов. В частности, трудно построить качественную сетку для мультифизических задач, где конструкция одновременно подвергается разноплановым физическим воздействиям, например механическому, электромагнитному и тепловому. Дело в том, что правила построения сетки для высокоточного расчета конструкции зависят от вида учитываемого воздействия, поэтому неясно, как построить оптимальную сетку для совместного расчета всех воздействий.

Еще одно затруднение связано с мультимасштабным расчетом сложных конструкций, компонуемых из деталей согласно многоступенчатой иерархической структуре. Здесь проблема состоит в том, что оптимальная сетка конструкции, вообще говоря, не совпадает с объединением сеток деталей, особенно в условиях применения проникающих методов сборки, таких как сварка. Проблемы такого рода усугубляются при расчете нестационарных процессов, сопровождающихся изменением формы конструкции, где нужно перестраивать сетку на каждом шаге по времени. Конечно, в литературе можно найти множество предложений по совершенствованию процедуры генерации сетки, но они применимы лишь в некоторых частных случаях и не снимают проблему в принципе.

В связи с этим в настоящее время активно развивается ряд методов, альтернативных МКЭ, получивших общее название бессеточных (meshfree methods) [12]. Они направлены на проведение инженерного расчета непосредственно по цельной геометрической модели, построенной в CAD-системе, что позволяет избежать трудоемкой и чреватой погрешностями процедуры генерации сетки конечных элементов. В настоящей работе из большого многообразия бессеточных методов отобраны для построения алгоритма такие, которые наиболее приспособлены для мультимасштабных мультифизических расчетов сложных твердотельных конструкций, таких как атомные реакторы.

Работа построена следующим образом: изложены общие принципы бессеточных расчетов, отобранных для построения алгоритма (при этом ни в коей мере не делается попытка дать обзор всех бессеточных методов); описано формирование мультифизических моделей, описывающих состояние твердотельных конструкций с приемлемой точностью; представлен полученный алгоритм мультимасштабного мультифизического бессеточного расчета. В заключении подводятся итоги и намечаются направления дальнейших исследований.

Принципы бессеточных расчетов

Исторически одним из первых бессеточных методов, реализованных в компьютерной программе, был метод сглаженных частиц (smoothed-particle hydrodynamics, SPH) [13]. Этот метод был разработан для решения вычислительных задач гидрогазодинамики. Он предписывает разделять сплошную среду на одинаковые ячейки, настолько малые, что внутри них действуют положения физической кинетики. Каждая ячейка рассматривается как контейнер для пучка частиц, и физика задачи описывается балансовыми уравнениями передвижения частиц между ячейками. Дискретизация, необходимая для решения на компьютере, выполняется непосредственно из естественных физических соображений, а не путем трудоемкого выделения искусственных конечных элементов.

Предлагается применять методы такого рода и для расчета конструкций из твердых материалов. Однако в целом исследование баланса потоков частиц нехарактерно для физики твердого тела. Поэтому результаты настоящей работы опираются на другой класс бессеточных методов, в основе которых лежат геометрические соображения.

Идея таких методов была впервые сформулирована Л.В. Канторовичем [14]. Рассматривается следующая традиционная постановка задачи математической физики. Требуется рассчитать в каждой точке некоторого тела Ω физическое поле η, удовлетворяющее уравнению $\mathbf{D}\eta = 0$ и граничному условию $\eta|_{\partial\Omega} = 0$, где через $\partial\Omega$ обозначена граница тела Ω. Иногда граничное условие задается лишь на части границы тела, и в этом случае под $\partial\Omega$ будет подразумеваться эта часть.

Тело Ω обычно задается компактным множеством в $\mathbb{R}^n$ с $n = 3$, реже с $n = 2$ или 1. Значение поля η в точке может быть скаляром, вектором в пространстве произвольного числа измерений, тензором, элементом алгебры Клиффорда или любого другого линейного пространства. В качестве $\mathbf{D}$ выступает дифференциальный оператор в частных производных, во многих задачах нелинейный, а в наиболее общих случаях даже интегро-дифференциальный (т.е. содержащий операции дифференцирования и интегрирования выражений, включающих неизвестную функцию-аргумент).

Если граничное условие имеет вид $\eta|_{\partial\Omega} = \eta_0$ для некоторой заданной функции η_0 (задача Дирихле), то сначала ищется промежуточная неизвестная функция η', удовлетворяющая уравнению $\mathbf{D}(\eta' + \eta_0) = 0$ и граничному условию $\eta|_{\partial\Omega} = 0$, а затем вычисляется искомая функция η по формуле $\eta = \eta' + \eta_0$. Существуют также способы учета граничных условий, накладываемых на значения нормальных производных поля η на $\partial\Omega$ (задача Неймана), но для краткости мы не будем их приводить.

В рассматриваемом классе бессеточных методов предлагается искать решение поставленной задачи в виде

$$\eta = \omega\Phi, \qquad (1)$$

где ω — заранее заданная скалярная функция координат, описывающая геометрию тела, а Φ — неизвестная функция. На функцию ω накладывается следующее ограничение: она должна быть положительной внутри тела Ω и обращаться в нуль на $\partial\Omega$. Благодаря этому ограничению поле η автоматически удовлетворяет граничному условию. В свою очередь, поле Φ описывает физику задачи «в бесконечной среде» (т.е. без учета граничного условия). Если в качестве ω выбрана достаточно «хорошая» функция, то для решения уравнения $\mathbf{D}(\omega\Phi) = 0$ относительно Φ можно применять классические методы, такие как аппроксимация конечными суммами базисных функций, интегрирование с равномерным шагом и т.п. Концептуально, геометрическая форма задачи, выраженная функцией ω, «отделяется» в форме скалярного множителя от физического содержания, сосредоточенного в функции Φ.

В таком подходе действительно не требуется формировать высококачественную расчетную сетку конечных элементов. Достигается значительная экономия интеллектуальных и вычислительных ресурсов, особенно при нерегулярной границе или при больших деформациях тела. Можно упрощенно проводить моделирование процессов, приводящих к изменению формы тела: если закон изменения формы $\Omega = \Omega(t)$ известен, а скорость изменения невысока по сравнению со скоростью стабилизации рассчитываемого физического поля, то можно задать ω функцией координат и времени, которая в каждый момент времени t положительна внутри тела $\Omega(t)$ и обращается в нуль на его границе. Менять оператор $\mathbf{D}$ при этом не требуется, так что классические численные методы остаются применимыми. Если же рассчитывать такие процессы посредством МКЭ, то приходится применять специальную процедуру рождения и уничтожения конечных элементов (Birth and Death), которая требует очень большого количества вычислительных ресурсов [15].

Из вышеизложенного ясно, что критическим фактором эффективности бессеточных расчетов является правильный выбор функ ции геометрии ω. В разных бессеточные методах предлагаются разные критерии и алгоритмы выбора этой функции. В качестве примера рассмотрим метод Scan&Solve™, реализованный в программном компоненте, подключаемом к коммерческой CAE-системе Rhinoceros [16]. Метод Scan&Solve™ предлагает брать в качестве значения функции геометрии ω в точке $\boldsymbol{x}$ число, пропорциональное евклидову расстоянию от $\boldsymbol{x}$ до границы $\partial\Omega$, причем для быстрого вычисления расстояния применяется специальный патентованный алгоритм. Физическая компонента решения Ф вычисляется путем аппроксимации конечной суммой базисных функций — как правило, однородных B-сплайнов.

Метод Scan&Solve™ вполне пригоден для проведения мультифизических расчетов, однако эффективность реализованного в нем алгоритма вычисления функции ω падает по мере роста масштаба конструкции. Для сборочных единиц, скомпонованных из множества деталей сложной формы, необходимо иметь естественный способ построения функции геометрии единицы по функциям геометрии деталей. Такой способ предлагается в бессеточных методах, известных под общим названием функционально-воксельных [17].

Эти методы в настоящее время активно разрабатываются в России. Функция геометрии ω строится в них аналитически, причем для этого привлекаются средства компьютерной алгебры. В частности, если некоторое тело Ω получено из семейства тел Ω_j, $j = 1, ..., n$, посредством булевых (теоретико-множественных) операций объединения, пересечения и дополнения, то функция геометрии ω тела Ω получается путем суперпозиции функций ω_j тел Ω_j с так называемыми R-функциями, предложенными В.Л. Рвачевым [18]. Чтобы задать исходные функции ω_j, применяются как средства аналитической геометрии (для примитивных тел, таких как куб или шар), так и машинной графики (для тел, отрисованных растровыми изображениями — семействами двумерных проекций либо трехмерными воксельными массивами). Например, если $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$, то

$$\omega = \omega_1 + \omega_2 + \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}. \quad (2)$$

Представление геометрии тел сколь угодно сложной формы булевыми комбинациями простых тел хорошо известно как конструктивное геометрическое дерево (CSG-tree) и поддерживается всеми промышленными CAD-системами [19]. При помощи функционально-воксельных методов инженерные расчеты можно проводить непосредственно над конструктивными геометрическими деревьями в CAD-системах. Аналогично, если имеется конструкторская структура сложного твердотельного изделия, состоящего из деталей, то можно получить функцию геометрии изделия по функциям геометрии деталей при помощи суперпозиций типа (2). Таким путем удается проводить мультимасштабные расчеты по иерархической структуре изделия, в направлении от примитивных деталей к все более сложным сборочным единицам.

Бессеточные расчеты в материаловедении

В материаловедении важной инженерной задачей является расчет равновесного состояния конструкций. Расчет закрепленного упругого твердого тела Ω из изотропного материала, находящегося под действием известной внешней силы, требует решения дифференциального уравнения в частных производных второго порядка:

$$\Delta \boldsymbol{u} + (1 - 2\sigma)^{-1}\nabla(\nabla \boldsymbol{u}) + \\ + \boldsymbol{F} \cdot 2(1 + \sigma)/E = 0, \quad (3)$$

где $\boldsymbol{u}$ — искомое векторное поле деформаций; σ и E — числовые характеристики материала (коэффициент Пуассона и модуль Юнга соответственно); $\boldsymbol{F}$ — векторное поле плотности объемных сил [20]. В гравитационном поле $\boldsymbol{F} = \rho \boldsymbol{g}$. Если тело имеет ненулевую плотность заряда ρ_e и находится в электрическом поле напряженности $\boldsymbol{E}$, то в $\boldsymbol{F}$ добавляется слагаемое $\rho_e \boldsymbol{E}$. Если дополнительно необходимо учесть тепловое воздействие на тело, то в $\boldsymbol{F}$ добавляется слагаемое, пропорциональное ∇T, где T — скалярное поле температуры, которое само подчиняется уравнению теплопроводности.

Уравнение (3) справедливо при условии, что нагрузка $\boldsymbol{F}$ по абсолютной величине много меньше предела прочности материала тела. Вблизи предела прочности уравнение состояния тела значительно усложняется. Например, если в хрупком теле возникает частая сетка трещин, то для описания создаваемого ими напряжения вводится искусственное дополнительное скалярное «фазовое» поле, обладающее собственным энергетическим потенциалом [21].

В других подходах, таких как перидинамика [22], предлагается перейти от дифференциальных уравнений к интегральным, которые не требуют накладывать на решения априорные условия гладкости. Основное уравнение перидинамики, которому подчиняется нестационарное поле деформаций $\boldsymbol{u}$, имеет следующий вид:

$$-\rho(\boldsymbol{x})\ddot{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x},t)+\int_{\Omega}\boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}',t)- \\ -\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t),\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\big)d\boldsymbol{x}'+\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x},t)=0, \qquad (4)$$

где $\boldsymbol{f}$ — известная векторная функция «плотности плотности» парных внутренних сил, определяемая по свойствам материала вблизи предела прочности. Уравнения перидинамики обладают тем недостатком, что для их вывода необходимо принять определенные упрощающие предположения о структуре материала, в том числе о соотношении между компонентами изотропного тензора напряжений и коэффициентом Пуассона. Для произвольных материалов, вообще говоря, нет оснований принять такие предположения.

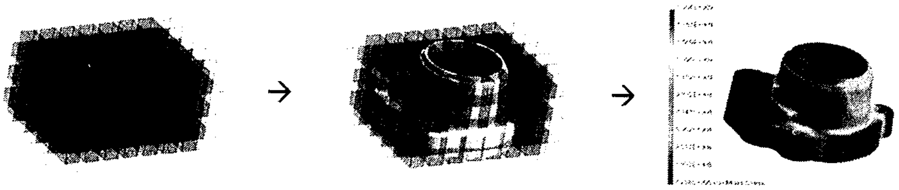
При расчете конструкций бессеточными методами типа описанных в начале статьи в уравнение (3) или в его аналоги производится подстановка вида $\boldsymbol{u} = \omega\boldsymbol{v}$ с известной функцией геометрии ω и неизвестным векторным полем $\boldsymbol{v}$. В результате в дифференциальном уравнении относительно $\boldsymbol{v}$ появляются слагаемые нулевого (пропорциональные $\boldsymbol{v}$) и первого порядка (пропорциональные $\nabla\boldsymbol{v}$). Так в аналитической форме проявляется «влияние» геометрии на физику.

Таким путем можно рассчитывать и достаточно медленные нестационарные процессы жизненного цикла конструкции, предполагая, что функция ω зависит не только от координат, но и от времени. Примером такого процесса служит механическая обработка заготовки. Можно рассчитать распространение температуры вглубь заготовки от точки соприкосновения режущего инструмента с поверхностью, чтобы проверить, что градиент температуры не вызывает деформацию, способную привести к искажению целевой формы изготавливаемой детали.

Алгоритм мультимасштабного мультифизического бессеточного расчета

Соображения, изложенные в предыдущих разделах, приводят к следующему алгоритму бессеточного расчета сложных твердотельных конструкций, находящихся под одновременным влиянием нескольких разноплановых физических воздействий.

1. Выбор мультифизической модели, описывающей состояние тела с приемлемой точностью, определение структуры поля η и оператора $\mathbf{D}$.
2. Формирование функции ω, описывающей геометрию конструкции, в том числе путем мультимасштабной суперпозиции согласно конструкторской структуре.
3. Выбор численного метода решения уравнения $\mathbf{D}(\omega\Phi) = 0$ относительно неизвестного поля Φ, исходя из структуры уравнения.
4. Вычисление решения уравнения выбранным численным методом.
5. Визуализация результатов вычисления в виде массива чисел и/или цветовой шкалы распределения деформаций по объему конструкции, с цифровой анимацией в случае нестационарной задачи.



Пример расчета бессеточным методом [16]

Алгоритм может выполняться итеративно в режиме диалога с инженером-расчетчиком. Если инженер видит, что результаты вычисления явно не соответствуют реальному поведению конструкции, то он может вернуться вплоть до стадии выбора мультифизической модели, чтобы правильно учесть все влияющие эффекты.

Шаги 3—5 алгоритма бессеточного расчета равновесного состояния конструкции из твердого материала наглядно проиллюстрированы примером на рисунке.

Заключение

Нет никакого сомнения, что бессеточные методы расчета задач материаловедения, описанные в настоящей работе, чрезвычайно перспективны. Исключение трудоемких работ по построению сетки конечных элементов приводит к значительному снижению длительности цикла инженерных расчетов, а простота представления геометрии конструкций — к снижению объема потребления вычислительных ресурсов. Аналитическая процедура формирования функции геометрии приводит к повышению качества результатов расчета благодаря уменьшению степени несоответствия между расчетной моделью и исходной формой конструкции, спроектированной в CAD-системе. Наконец, появляется возможность численного решения уравнений математической физики несложными классическими методами.

Остается преодолеть инерцию мышления инженеров и рыночное доминирование CAE-систем, ориентированных на МКЭ. Для этого необходимо накопить обширный массив бессеточных решений актуальных инженерных расчетных задач, причем показатели качества решений должны превосходить результаты, полученные с помощью МКЭ. Алгоритм, предложенный в настоящей работе, открывает самые широкие возможности для такого накопления.

Отдельные результаты работы получены при финансовой поддержке по 14.577.21.0095.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Нелюб В.А.** Технология получения препрегов // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2013. № 3. С. 12—17.
2. **Нелюб В.А., Гращенков Д.В., Коган Д.И., Соколов И.А.** Применение прямых методов формования при производстве крупногабаритных деталей из стеклопластиков // Химическая технология. 2012. № 12. С. 735—739.
3. **Буянов И.А., Чуднов И.В.** Разработка новых материалов на основе термопластов и эпоксидных олигомеров и исследование их свойств методами термического анализа // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2013. № 4. С. 42—45.
4. **Нелюб В.А., Карасева А.А., Боченкова А.А.** Конструкционные стеклопластики на основе полиэфирной матрицы // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2012. № 7. С. 46—49.
5. **Бессонов И.В., Полежаев А.В., Кузнецова М.Н., Нелюб В.А., Буянов И.А., Чуднов И.В., Бородулин А.С.** Реологический и термический анализ низковязких эпоксифурановых композиций // Клеи. Герметики. Технологии. 2013. № 4. С. 29—33.
6. **Буянов И.А.** Особенности оценки теплостойкости полимерных связующих // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2013. № 5. С. 27—30.
7. **Чуднов И.В.** Исследования свойств полимерных связующих термоаналитическими // Энциклопедия инженера-химика. 2013. № 4. С. 30—35.
8. **Нелюб В.А.** Новые материалы и технология изготовления деталей из стеклопластиков на основе полиэфирной матрицы // Материаловедение. 2012. № 7. С. 30—33.