УДК 631.4:62.001.57

АНАЛИЗ МЕТОДИК МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАЗРУШЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ ПОЧВЫ

В. Сербий, канд. техн. наук,
УкрНИИПИТ им. Л. Погорелого

В статье рассмотрены существующие способы математического моделирования поведения материалов при воздействии на них нагрузки.

Ключевые слова: *почва, математическое моделирование, разрушение материалов, псевдочастицы, метод решеточных уравнений Больцмана, метод подвижных клеточных автоматов.*

Многие математические модели описываются дифференциальным уравнением или системой дифференциальных уравнений с краевыми условиями первого, второго и третьего рода. Точное решение краевых задач удается получить лишь для немногих частных случаев. Поэтому общий способ их решения, в том числе и в САПР, заключается в использовании различных приближенных моделей [1].

Существует два основных класса расчетных моделей грунта: 1) модели сплошной и 2) модели дискретной среды.

В основе модели сплошной среды лежит принцип представления материи без разрывов, которая непрерывным образом заполняет часть пространства. В настоящее время на ее основании наиболее широкое распространение получили модели на основе интегральных уравнений и модели на основе метода сеток.

Основная идея построения модели на основе интегральных уравнений заключается в переходе от исходного дифференциального уравнения в частных производных к эквивалентному интегральному уравнению, подлежащему дальнейшим преобразованиям.

Сущность метода сеток состоит в аппроксимации искомой непрерывной функции совокупностью приближенных значений, рассчитанных в некоторых точках области – узлах. Совокупность узлов, соединенных определенным образом, образует сетку. Сетка, в свою очередь, является дискретной моделью области определения искомой функции.

Применение метода сеток позволяет свести дифференциальную краевую задачу к системе нелинейных в общем случае алгебраических уравнений относительно неизвестных узловых значений функций вида:

$$\overline{\Phi}\left(\int \overline{V}dt, \overline{V}, \frac{d\overline{V}}{dt}, I, t \right) = 0.$$

К данному классу расчетных моделей относятся следующие методы: метод конечных разностей, метод конечных объёмов, метод граничных элементов, метод конечных элементов, метод частиц в ячейках, метод решеточных уравнений Больцмана (LBE).

В отличие от модели сплошной среды, в основе дискретного подхода лежит принцип представления объекта в виде ансамбля частиц (рис. 1).

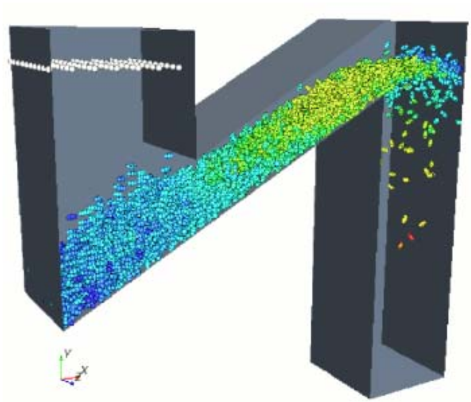

Рисунок 1 – **Моделирование поведения псевдочастиц методом дискретных элементов в Star CCM+**

Перемещение частиц описывается уравнением Ньютона для поступательного и вращательного движения:

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} r_i = f_i + m_i g, \qquad I_i \frac{d}{dt} \omega_i = t_i$$

К данному классу расчетных моделей относятся следующие методы: метод частиц, метод дискретного элемента, метод полного Лагранжева подхода (FLA), метод клеточного автомата, метод подвижных клеточных автоматов.

Рассмотрим более детально решеточный и дискретный способ математического моделирования, на примере: метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов (MCA).

1. В отличие от классических методов расчета метод решеточных уравнений Больцмана рассматривает перемещение как движение ансамбля псевдочастиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям.

Основная идея, предложенная в [2], заключается в том, что в кинетическом уравнении Больцмана достаточно использовать дискретный конечный набор скоростей частиц $c_к$. Это фактически означает, что непрерывная функция распределения $f(\xi)$ по микроскопическим скоростям ξ заменяется на систему δ-функций вида $\sum_k N_k \delta(\xi - c_k)$. Кроме того, в методе LBE скорости $c_к$ выбираются таким образом, чтобы за шаг по времени Δt частицы перелетали в соседние узлы регулярной пространственной решетки, вектора которой удовлетворяют условию $e_k = c_k \Delta t$ [3, 4]. Для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19 [5] возможный набор векторов скорости (k=0,1,…b; b= 18) показан на рис. 2.

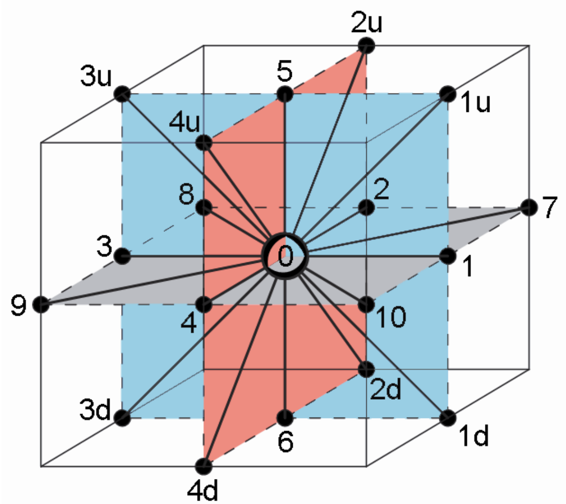

Рисунок 2 – **Возможные векторы скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для трехмерной девятнадцатискоростной модели D3Q19 [6]**

В методе LBE в качестве переменных используются коэффициенты перед δ-функциями, т.е. одночастичные функции распределения $N_k(x,t)$ для всего конечного набора скоростей частиц c_k.

Уравнение эволюции для функций распределения имеет вид N_k

$$N_k(x,t) = N_k(x - c_k \Delta t, t - \Delta t) + \Omega_k(N_k) + \Delta N_k \,,$$

где Ω_K – оператор столкновений, ΔN_k – изменение функций распределения за счет действия объемных сил (внутренних и внешних).

Обычно используется оператор столкновений в виде BGK (Bhatnagar – Gross – Krook) приближения:

$$\Omega_k = N_k^{eq}\left(\rho, u\right) - \tilde{N}_K(x,t))/\tau \,,$$

которое представляет собой просто релаксацию к локальному равновесию. Безразмерное время релаксации τ определяет кинематическую вязкость $\nu=\theta(\tau-1/2)\Delta t$. Изменяя в определенных пределах параметр τ >1/2, можно изменять вязкость. Здесь θ – нормированная кинетическая температура псевдочастиц. Для трехмерной изотермической модели LBE D3Q19 она равна $\Theta = (\frac{h}{\Delta t})^2 / 3$, где h – шаг решетки.

Для реализации алгоритма вычислений нами использовано расщепление метода LBE по физическим процессам.

Уравнения переноса для функций распределения N_k вдоль характеристик (которые являются прямыми для уравнения Больцмана) на дискретной решетке имеют вид:

$$\tilde{N}_k\left(x,t\right) = N_k\left(x - c_k \Delta t, t - \Delta t\right).$$

Кроме того, на каждом шаге по времени происходит изменение функций распределения за счет оператора столкновений и действия сил:

$$N_k(x,t) = \tilde{N}_k(x,t) + \Omega_k(\tilde{N}_k(x,t)) + \Delta N_k .$$

Для учета действия объемных сил в методе LBE группой авторов под руководством д-р физ.-мат. наук А.Л. Куперштоха предложен метод точной разности [7-10]

$$\Delta\tilde{N}_k\left(x,t\right) = N_k^{eq}\left(\rho, u + \Delta u\right) - N_k^{eq}\left(\rho, u\right).$$

Изменение скорости Δu за шаг по времени определяется полной силой, действующей на вещество в узле, а именно

$$u + \Delta u = u + F\Delta t / \rho .$$

В случае действия объемных сил для вычисления физической скорости вещества u^* следует использовать выражение, определенное на половине шага по времени:

$$pu^* = \sum_{k=1}^{b} c_k \tilde{N}_k + 1/2 F\Delta t .$$

2. Применение сеточных методов ограничено моделированием процессов в материалах, сопровождающихся малыми деформациями. Для описания образования и роста трещин, разрушения и перемешивания вещества перспективно использовать метод подвижных клеточных автоматов (MCA – movable cellular automata), разработанный в ИФПМ СО РАН (г. Томск).

Автомат имеет радиус R в недеформированном состоянии, массу m, момент инерции J. Поступательное движение описывается вторым законом Ньютона:

$$m_i \frac{d^2\vec{R}_i}{dt^2} = \vec{F}_i^{\Omega} + \sum_j \vec{F}_{ij},$$

где $\vec{F}_i^{\Omega}$ – суммарная объемная сила, действующая на i автомат, $\sum_j \vec{F}_{ij}$ – сила, действующая на i автомат со стороны j автомата в месте их контакта.

Для вращательного движения клеточного автомата

$$J\frac{d^2\vec{\Theta}_i}{dt^2} = \sum_j q_{ij}[\vec{n}_{ij} \times \vec{F}_{ij}]$$

Здесь $\vec{\Theta}_i$ – вектор угла поворота автомата, q_{ij} – расстояние от центра i автомата до точки его контакта с j автоматом, $\vec{n}_{ij}$ – единичный радиус-вектор от центра i автомата к центру j автомата.

Развитие метод получил в докторской работе А.Ю. Смолина. В основу концепции положено, что пара автоматов может находиться в двух состояниях.

1) В связанном состоянии между частицами действуют парные и объемные силы.

2) Несвязанное состояние соседних автоматов означает разрыв сплошности среды в этом месте.

В реализованной модели используется простейший случай взаимодействия частиц по закону Гука.

$$f = \begin{cases} -k\left(r - r_0\right), при\, r \le r_{max}; \\ 0, при\, r > r_{max} \end{cases}.$$

где r – текущее расстояние между центрами автоматов, $r_0=2R$ – расстояние между автоматами в недеформированном состоянии, k – коэффициент упругой связи между автоматами.

Объемная сила необходима для учета поперечных деформаций при продольных растяжениях/сжатиях. Для ее расчета используется следующий алгоритм. Для каждой частицы ансамбля вычисляют среднюю деформацию:

$$\xi_i = \frac{1}{2Mr_0}\sum_{j=1}^{M}(r_j - r_0).$$

Здесь M – количество соседей, связанных с данной частицей. Множитель 2 в знаменателе равен размерности пространства.

$$F_i^{\Omega} = \sum_{i=1}^{M} P_j S_{ij}\vec{n}_{ij}, \text{ где } P_j = -\chi\xi_j,$$

где χ – коэффициент объемной упругой деформации, S_{ij} – площадь контакта автоматов.

К парным силам относятся вязкие силы и силы, возникающие в результате деформации сдвига. Касательные к поверхности автоматов вязкие силы пропорциональны разности скоростей поверхностей автоматов, контактирующих между собой. Угловая скорость вращения пары автоматов как целого:

$$\vec{\omega}_{ij} = \frac{[\overrightarrow{r_{ij}}^{2} \times (\vec{\vartheta}_j - \vec{\vartheta}_i)]}{r_{ij}^2},$$

где $\vec{r}_{ij}$ – вектор от центра i-го автомата к центру j-го автомата. Тогда сила вязкого трения рассчитывается по формуле:

$$\vec{F}_{ij} = -\eta \frac{[\overrightarrow{V}_{ij} \times \vec{r}_{ij}]}{r_{ij}^2},$$

где η – вязкость материала, $\vec{V}_{ij} = (\vec{\omega}_{ij} r - \vec{\omega}_i q_{ij} - \vec{\omega}_j q_{ji})$. Здесь $\vec{\omega}_i$ – угловая скорость i-ой частицы, $\vec{\omega}_j$ – угловая скорость j-ой частицы.

При взаимном движении автоматов, находящихся в контакте, возникают сдвиговые деформации. Возникающую парную силу в случае малых деформаций рассчитывают согласно формуле:

$$\vec{F}_{ij}^{s} = g[\vec{n}_{ij} \times \vec{\gamma}_{ij}],$$

где $\vec{\gamma}_{ij}$ – угол сдвига, который рассчитывается через скорости вращения автоматов:

$$\vec{\gamma}_{ij} = \int_0^{t_{ij}} (\vec{\omega}_i + \vec{\omega}_j - 2\omega_{ij}) dt,$$

где t_{ij} – время с момента установления текущего контакта между автоматами.

Момент сил, действующих на частицу i, возникающий под действием сил вязкого трения и сдвиговых деформаций между i-ой и j-ой частицами, равен:

$$\vec{M}_{ij}^{v} = 1/2[\vec{r}_{ij} \times (\vec{F}_{ij}^{v} + \vec{F}_{ij}^{S}].$$

Выводы. Метод решеточных уравнений Больцмана и метод подвижных клеточных автоматов представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества, и основаны на дискретных моделях сплошной среды. Метод решеточных уравнений Больцмана более перспективен, чем обычные конечно разностные методы, так как более адекватен природе вещества. Метод подвижных клеточных автоматов эффективен при описании деформаций с интенсивными динамическими нагрузками: накопление повреждений, фрагментаций и трещин, возникновение и развитие разрушений твердых тел под действием нагрузки.

Литература

1. http://rk6.bmstu.ru/electronic_book/function_model/mkr/mkr.htm
2. Broadwell J. E. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method // J. Fluid Mech. 1964. Vol. 19. P. 401–414.
3. McNamara G. R., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // Physical Review Letters. 1988. Vol. 61, N 20. P. 2332–2335.
4. Higuera F. J., Jimйnez J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. // Europhys. Lett. 1989. Vol. 9, N 7. P. 663–668.
5. Li W., Wei X., Kaufman A. Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // Visual Computer. 2003. Vol. 19. P. 444–456.
6. http://rudocs.exdat.com/docs/index-571571.html
7. Kupershtokh A. L. Calculations of the action of electric forces in the lattice Boltzmann equation method using the difference of equilibrium distribution functions // Доклады VII Межд. научн. конф. “Современные проблемы электрофизики и электрогидродинамики жидкостей”, Санкт-Петербург, 2003, с. 152–155.
8. Kupershtokh A. L. New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation // Proc. of the 5th International EHD Workshop, Poitiers, France, 2004, pp. 241–246.
9. Куперштох А. Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”. 2004, – Т. 4. - № 2. – С. 75–96.
10. Kupershtokh A. L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // Computers and Mathematics with Applications. 2010. Vol. 59, N 7. P. 2236–2245.

Анотація

У статті розглянуто існуючі способи математичного моделювання поведінки матеріалів під дією на них навантаження.

Summary

The article deals with the existing methods of mathematical modeling of the behavior of materials when subjected to loads.