УДК 539.3

Б. Л. Боженко, Т. С. Нагірний

ДО ЧИСЕЛЬНОГО РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ВАРІАЦІЙНИХ ЗАДАЧ ЛОКАЛЬНО ГРАДІЄНТНОЇ МЕХАНІКИ З ВИКОРИСТАННЯМ АПРОКСИМАЦІЙ РУХОМИХ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ

Сформульовано основні співвідношення локально градієнтної термопружності та з використанням апроксимацій найменших рухомих квадратів опрацьовано схему застосування безсіткового методу для розв'язування та дослідження відповідних задач математичної фізики.

В основі кількісного розрахунку конкретних елементів конструкцій та приладів лежать математичні моделі механіки суцільного середовища. При побудові таких моделей важливим є питання їх адекватності тілам, поведінку яких вони описують. Відомо, що закономірності поведінки твердих тіл суттєво залежать від властивостей і характеристик приповерхневих областей [1, 4]. Врахування приповерхневих явищ є особливо важливим при описі тонких плівок та волокон, різного роду розмірних ефектів, у тому числі межі міцності, тощо.

При описі приповерхневої неоднорідності в сучасній літературі широко використовуються методи нелокальної теорії пружності [9] та локально градієнтної термомеханіки [2, 3, 5]. В основу другого підходу покладено основні принципи термодинаміки нерівноважних процесів. Тому, порівняно з першим підходом, локально градієнтний дозволяє зрозумілим чином враховувати вплив на механічну поведінку тіл полів різної фізичної природи. На основі моделей, побудованих в рамках такого підходу, проведено широкий комплекс досліджень та показано, зокрема, що ці моделі описують розмірний ефект межі міцності та її залежність від температури і домішок. Більшість досліджень у цьому напрямку проведено на прикладі одновимірних задач для тіл канонічної форми. Тому важливим і актуальним питанням є розробка чисельних методів локально градієнтної термомеханіки.

Основні співвідношення локально градієнтної термопружності. Розглядаємо деформівне тверде тіло, у якому за базові процеси приймаємо процеси деформування та теплопровідності. Ці процеси повинні справджувати рівняння балансу повної енергії, імпульсу, ентропії та маси, які у локальній формі при нехтуванні конвективною складовою похідної за часом мають вигляд [3, 5]

$$\frac{\partial E}{\partial \tau} = \vec{\nabla} \cdot \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{v} - T \vec{j}_s + H \frac{\partial \vec{\pi}_m}{\partial \tau} \right),$$

$$\frac{\partial (\varrho \vec{v})}{\partial \tau} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}, \qquad \frac{\partial S}{\partial \tau} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_s + \sigma_s, \qquad \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\varrho - \vec{\nabla} \cdot \vec{\pi}_m \right) = 0, \tag{1}$$

де E — повна енергія, яку приймаємо сумою внутрішньої U та кінетичної K енергій, $\hat{\sigma}$ — тензор напружень Коші, $\vec{v}, \vec{j}_s, \vec{\pi}_m$ — вектори швидкості, потоку ентропії та зміщень маси, ϱ, H, T, S — густина маси, хімічний потенціал, температура та ентропія, σ_s — виробництво ентропії, τ — час. Якщо ввести у розгляд енергію $F = U - TS - \varrho H - \vec{\pi}_m \cdot \vec{\nabla} \eta$, то на основі (1) можна записати

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} = \hat{\sigma} : \frac{\partial \hat{e}}{\partial \tau} - \vec{\pi}_m \cdot \frac{\vec{\nabla} H}{\partial \tau} - S \frac{\partial T}{\partial \tau} - \varrho \frac{\partial H}{\partial \tau} - T \hat{\sigma}_s - \vec{j}_s \cdot \vec{\nabla} T,$$

де $\hat{e}$ — тензор деформації. Дане співвідношення та принцип Онзагера дозволяють записати такі визначальні рівняння моделі

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad \varrho = -\frac{\partial F}{\partial H}, \quad \vec{\pi}_m = -\frac{\partial F}{\partial(\vec{\nabla} H)}, \quad \hat{\sigma} = \frac{\partial F}{\partial \hat{e}},$$

$$\vec{j}_s = \vec{j}_s\left(-\frac{\vec{\nabla} T}{T}; F\right), \quad \vec{j}_s(0; F) = 0. \qquad (2)$$

Конкретизація визначальних співвідношень пов'язана з конкретизацією енергії F. Приймемо її квадратичною функцією у просторі збурень базових параметрів відносно їх початкових значень $\hat{e} = \hat{e} - 0$, $\theta = T - T_*$, $\eta = H - H_*$, $\vec{\nabla}\eta = \vec{\nabla} H - 0$ у вигляді

$$F = F_* - TS_* - H\varrho_* + \mu\hat{e} : \hat{e} + \frac{1}{2}\lambda e^2 - (3\lambda + 2\mu)(\alpha_t\theta - \alpha_m\eta)e -$$

$$\frac{c_v}{2T_*}\theta^2 + \frac{1}{2}b_m\eta^2 + b_{mt}\eta\theta + \frac{1}{2}\gamma_m\left(\vec{\nabla}\eta\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\eta\right), \qquad (3)$$

де $\mu, \lambda, \alpha_t, \alpha_m, c_v, b_m, b_{mt}, \gamma_m$ — характеристики матеріалу, $e = \hat{e} : \hat{I}, \hat{I}$ — одиничний тензор. Підставляючи (3) в (2), одержуємо рівняння стану у явному вигляді

$$\hat{\sigma} = 2\mu\hat{e} + [\lambda e - (3\lambda + 2\mu)(\alpha_t\theta - \alpha_m\eta)]\hat{I},$$

$$S = S_* + \frac{c_v}{T_*}\theta + (3\lambda + 2\mu)\alpha_t e - b_{mt}\eta,$$

$$\varrho = \varrho_* - b_{mt}\theta - (3\lambda + 2\mu)\alpha_m e - b_m\eta, \qquad \vec{\pi}_m = -\gamma_m\vec{\nabla}\eta.$$

Ця система рівнянь разом з кінетичним рівнянням, яке приймаємо у загальноприйнятому для термопружного тіла вигляді $\vec{j}_s = -\lambda_s\frac{\vec{\nabla} T}{T}$, складає повну систему визначальних співвідношень.

Якщо за ключові функції вибрати вектор переміщення $\vec{u}$, температуру θ та хімічний потенціал η, то ключову лінеаризовану систему рівнянь моделі можна записати у вигляді

$$\mu\nabla^2\vec{u} + (\lambda + \mu)\vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{u}\right) - (3\lambda + 2\mu)\left(\alpha_t\vec{\nabla}\theta - \alpha_m\vec{\nabla}\eta\right) = \varrho_*\frac{\partial^2\vec{u}}{\partial\tau^2},$$

$$c_v\frac{\partial\theta}{\partial\tau} - b_{mt}T_*\frac{\partial\eta}{\partial\tau} + (3\lambda + 2\mu)T_*\frac{\partial(\vec{\nabla}\cdot\vec{u})}{\partial\tau} - \lambda_s\nabla^2\theta = 0,$$

$$\nabla^2\eta - \kappa^2\eta - \kappa_t^2\theta - \kappa_u^2\vec{\nabla}\cdot\vec{u} = 0,$$

де $\kappa^2 = b_m/\gamma_m$, $\kappa_u^2 = (3\lambda + 2\mu)\alpha_m/\gamma_m$, $\kappa_t^2 = b_{tm}/\gamma_m$.

Зазначимо, що третє рівняння цієї системи є наслідком закону збереження маси, а хімічний потенціал можна ототожнити з енергією взаємодії.

Варіаційне формулювання задачі. У класичному підході застосування проекційних методів, у тому числі методу скінченних елементів, базується на мінімізації відповідного функціоналу. Зупинимося на варіаційному формулюванні задач для ізотермічного наближення $(\theta = 0)$.

Розглянемо функціонал

$$R = \int\limits_V \left[\frac{\mu}{2}\left(\vec{\nabla}\otimes\vec{u}\right) : \left(\vec{\nabla}\otimes\vec{u}\right) + \frac{\mu}{2}\left(\vec{\nabla}\otimes\vec{u}\right) : \left(\vec{\nabla}\otimes\vec{u}\right)^T + \frac{\lambda}{2}\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{u}\right)^2 +\right.$$

$$(3\lambda + 2\mu)\, \alpha_m \eta \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \frac{\gamma_m}{2} \vec{\nabla}\eta \cdot \vec{\nabla}\eta + \frac{b_m}{2}\eta^2 \Big] dV -$$

$$\int\limits_{\partial V} \vec{\sigma}_a \cdot \vec{u} d\Sigma - \int\limits_{\partial V} \gamma_m (\nabla\eta)_a \eta d\Sigma, \qquad (4)$$

де $(V), (\partial V)$ — область та поверхня розглядуваного тіла; $\vec{\sigma}_a$ — заданий на поверхні тіла вектор зусиль; $(\nabla\eta)_a$ — задана на поверхні тіла, нормальна до цієї поверхні складова градієнта хімічного потенціалу; індексом „T" відзначено транспонування; $\otimes$ — символ діадного добутку.

Умова екстремуму функціоналу $\delta R = 0$ приводить до системи рівнянь локально градієнтної статичної пружності

$$\mu \nabla^2 \vec{u} + (\lambda + \mu)\, \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}\right) + (3\lambda + 2\mu)\, \alpha_m \vec{\nabla}\eta = 0,$$

$$\gamma_m \nabla^2 \eta - b_m \eta - (3\lambda + 2\mu)\, \alpha_m \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$$

та природних граничних умов

$$\vec{n} \cdot \left\{ \mu \left[\vec{\nabla} \otimes \vec{u} + \left(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}\right)^T \right] + \left[\lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + (3\lambda + 2\mu)\, \alpha_m \eta \right] \hat{I} \right\} = \vec{\sigma}_a, \;\; \vec{n} \cdot \vec{\nabla}\eta = (\nabla\eta)_a.$$

Тут $\vec{n}$ — одинична зовнішня до поверхні тіла нормаль.

Порівнюючи функціонал (4) з поданням енергії F для ізотермічного наближення та враховуючи відоме співвідношення Коші для тензора деформації, приходимо до висновку, що, аналогічно як і у випадку класичної теорії пружності, він є суперпозицією енергії F та „роботи сил", заданих на поверхні тіла.

Апроксимація рухомими найменшими квадратами. Сформульовану вище варіаційну задачу розв'язуємо, використовуючи „безсітковий" метод [6-8]. Для цього невідомі компоненти вектора переміщень та хімічний потенціал апроксимуємо рухомими найменшими квадратами [10]. Дискретизуємо область V, тобто задаємо множину n вузлів та відповідні вузлові координати $\mathbf{x}_i$, $i = \overline{1,n}$. Невідомі величини у точці $\mathbf{x}$ подаємо у вигляді

$$u_i^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{l} p_j(\mathbf{x}) a_{ij}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{a}_i(\mathbf{x}), \qquad i = \overline{1,3},$$

$$\eta^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{l} p_j(\mathbf{x}) b_i(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{b}(\mathbf{x}), \qquad (5)$$

де індексом h відзначено наближені значення компонент вектора переміщення та хімічного потенціалу в точці $\mathbf{x}$; $\mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = \{p_1(\mathbf{x}), p_2(\mathbf{x}), ..., p_l(\mathbf{x})\}$, $\mathbf{a}_i^T(\mathbf{x}) = \{a_{i1}(\mathbf{x}), a_{i2}(\mathbf{x}), ..., a_{il}(\mathbf{x})\}$, $\mathbf{b}^T(\mathbf{x}) = \{b_1(\mathbf{x}), b_2(\mathbf{x}), ..., b_l(\mathbf{x})\}$; $p_i(\mathbf{x})$ — степеневі одночлени, що є компонентами поліноміального базису; l — кількість компонент базису. Зазначимо, що для квадратичної апроксимації базисом є

$$\mathbf{p}^T(x, y, z) = \left\{1, x, y, z, xy, yz, xz, x^2, y^2, z^2\right\}, \quad l = 10.$$

Для визначення коефіцієнтів $a_{ij}(\mathbf{x}), b_i(\mathbf{x})$ використаємо ідею методу найменших квадратів. Для цього запишемо зважені дискретні норми, що є мірою відхилення між реальними та апроксимованими значеннями

$$J_{u_i} = \sum_k w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \left(u_i^h(\mathbf{x}_k) - u_{ik}\right)^2 =$$

$$\sum_k w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_k)\left(\sum_{j=1}^{l} p_j(\mathbf{x}_k)a_{ij}(\mathbf{x})-u_{ik}\right)^2, \qquad (6)$$

$$J_\eta=\sum_k w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_k)\left(\eta^h(\mathbf{x}_k)-\eta_k\right)^2=\sum_k w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_k)\left(\sum_{j=1}^{l} p_j(\mathbf{x}_k)b_j(\mathbf{x})-\eta_k\right)^2,$$

де $w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_k)$ — вагова функція з фінітною областю визначення (найчастіше це сфера з центром у точці $\mathbf{x}$, яку називають також областю основи точки $\mathbf{x}$); x_k — координати біжучого вузла, що належить області основи точки $\mathbf{x}$; u_{ik},η_k — фіктивні значення шуканих величин у вузлі k. При цьому термін „фіктивний" використовується, оскільки u_{ik},η_k не є вузловими значеннями апроксимацій у вузлі k, тобто $u_i^h(\mathbf{x}_k)\neq u_{ik}$, $\eta^h(\mathbf{x}_k)\neq\eta_k$.

У матричній формі (6) має вигляд

$$J_{u_i}=(\mathbf{P}\mathbf{a}_i-\mathbf{u}_i)^T\,\mathbf{W}(\mathbf{x})\,(\mathbf{P}\mathbf{a}_i-\mathbf{u}_i)\,,\;\; J_\eta=(\mathbf{P}\mathbf{b}-\mathbf{h})^T\,\mathbf{W}(\mathbf{x})\,(\mathbf{P}\mathbf{b}-\mathbf{h})\,, \qquad (7)$$

де $\mathbf{u}_i^T=\{u_{i1},u_{i2},...,u_{in}\}$, $\quad\mathbf{h}^T=\{\eta_1,\eta_2,...,\eta_n\}$,

$$\mathbf{P}=\left\{\begin{array}{cccc} p_1(\mathbf{x}_1) & p_2(\mathbf{x}_1) & ... & p_l(\mathbf{x}_1)\\ p_1(\mathbf{x}_2) & p_2(\mathbf{x}_2) & ... & p_l(\mathbf{x}_2)\\ . & . & . & .\\ p_1(\mathbf{x}_n) & p_2(\mathbf{x}_n) & ... & p_l(\mathbf{x}_n)\end{array}\right\},$$

$$\mathbf{W}(\mathbf{x})=\left\{\begin{array}{cccc} w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1) & 0 & ... & 0\\ 0 & w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_2) & ... & 0\\ . & . & . & .\\ 0 & 0 & ... & w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_n)\end{array}\right\}.$$

З умов стаціонарності функціоналів (7) одержуємо системи рівнянь для визначення $\mathbf{a}_i,\mathbf{b}$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x})\mathbf{a}_i(\mathbf{x})=\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{u}_i,\qquad \mathbf{A}(\mathbf{x})\mathbf{b}(\mathbf{x})=\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{h}, \qquad (8)$$

де $\mathbf{A}(\mathbf{x})=\mathbf{P}^T\mathbf{W}(\mathbf{x})\mathbf{P}$, $\mathbf{B}(\mathbf{x})=\mathbf{P}^T\mathbf{W}(\mathbf{x})$.

Підставляючи розв'язки (8) в (5), одержуємо апроксимаційну схему рухомих найменших квадратів

$$u_i^h(\mathbf{x})=\mathbf{N}^T(\mathbf{x})\mathbf{u}_i,\qquad \eta^h(\mathbf{x})=\mathbf{N}^T(\mathbf{x})\mathbf{h}, \qquad (9)$$

де $\mathbf{N}^T(\mathbf{x})=\{N_1(\mathbf{x}),N_2(\mathbf{x}),...,N_n(\mathbf{x})\}$, $N_i(\mathbf{x})=w(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)\mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_i)$.

Використовуючи у функціоналі (4) представлення (9), з умов стаціонарності функціоналу одержуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\mathbf{K}_u\mathbf{u}+\mathbf{Q}\mathbf{h}=\mathbf{f}_u,\qquad \mathbf{K}_\eta\mathbf{h}+\mathbf{u}^T\mathbf{Q}=\mathbf{f}_\eta,$$

де $\mathbf{K}_{ukj}=\int\limits_V(\mathbf{B}_1\mathbf{N}_k)^T\,\mathbf{D}_1\mathbf{B}_1\mathbf{N}_j dV$, $\mathbf{Q}_{kj}=\int\limits_V(3\lambda+2\mu)\,\alpha_m(\mathbf{B}_2^T\mathbf{N}_k)^T N_j dV$, $K_{\eta ij}=\int\limits_V\left(b_m N_iN_j+\gamma_m N_i\mathbf{B}_2^T\mathbf{B}_2N_j\right)dV$, $\mathbf{f}_{uk}=\int\limits_{\partial V}\mathbf{N}_k\vec{\sigma}_a^T d\Sigma$, $f_{\eta i}=\int\limits_{\partial V}\gamma_m(\nabla\eta)_a N_i d\Sigma$,

$$\mathbf{B}_1=\left\{\begin{array}{ccc} \partial/\partial x_1 & 0 & 0\\ 0 & \partial/\partial x_2 & 0\\ 0 & 0 & \partial/\partial x_3\\ \partial/\partial x_2 & \partial/\partial x_1 & 0\\ 0 & \partial/\partial x_3 & \partial/\partial x_2\\ \partial/\partial x_3 & 0 & \partial/\partial x_1\end{array}\right\},\qquad \mathbf{B}_2=\left\{\begin{array}{c}\partial/\partial x_1\\ \partial/\partial x_2\\ \partial/\partial x_3\end{array}\right\},$$

$$\mathbf{D}_1 = \left\{ \begin{array}{cccccc} \lambda+2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{array} \right\}, \quad \mathbf{N}_k = \left\{ \begin{array}{ccc} N_k & 0 & 0 \\ 0 & N_k & 0 \\ 0 & 0 & N_k \end{array} \right\}.$$

Таким чином, розв'язування варіаційної задачі зведено до знаходження невідомих коефіцієнтів $\mathbf{u}_i$, $\mathbf{h}$ з системи алгебраїчних рівнянь. Їх кількість залежить від кількості вузлів дискретизації області V.

1. *Бартенев Г. М., Зуев Ю. С.* Прочность и разрушение высокоэластических материалов. – М.-Л.: Химия. – 1964. – 388 с.
2. *Бурак Я., Грицина О., Нагирный Т., Червинка К.* Поверхностные напряжения в слое. Влияние температуры и примесей на прочность // Проблемы прочности. – 2000. – № 6. – С. 35-43.
3. *Бурак Я. Й., Нагирный Т. С.* Математическое моделирование локально-градиентных процессов в инерционных термомеханических системах // Прикл. механика. – 1992. – **28**, № 12. – С. 3-23.
4. *Комник Ю. Ф.* Физика металлических пленок. – М.: Атомиздат. – 1979. – 264 с.
5. *Нагірний Т. С.* Поверхневі напруження в шарі. Поверхневий натяг та міцність шару // Мат. методи та фіз.–мех. поля. – **42**, № 4. – С. 111-115.
6. *Atluri S. N., Zhu T.* A new meshless local Petrow-Galerkin (MLPG) approach in computantional mechanics // Comput. Mech. – 1999. – 24. – P. 348-372.
7. *Belytschko T., Krongauz Y., Organ D., Fleming M., Krysl P.* Meszless Methods: An overview and recent developments // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. – 1996. – 139. – P. 3-47.
8. *Duarte C. A., Oden J. T.* H $_p$ clouds – A meshless method to solve boundary-value problems // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. – 1996. – 139. – P. 237-262.
9. *Eringen A. C., Edelen D. G.* On Nonlocal Elasticity // Int. J. Eng. Sci. – 1972. – **10**. – P. 233-248.
10. *Lankaster P., Salkauskas K.* Surfaces generated by moving least-square methods // Math. Comput. – 1981. – 37. – P. 141-158.

К ЧИСЛЕННОМУ РЕШЕНИЮ ВАРИАЦИОННЫХ ЗАДАЧ ЛОКАЛЬНО ГРАДИЕНТНОЙ МЕХАНИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АППРОКСИМАЦИЙ ПОДВИЖНЫХ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Сформулированы основные соотношения локально градиентной термоупругости и с использованием аппроксимаций подвижных наименьших квадратов разработана схема применения безсеточного метода для решения и исследования соответствующих задач математической физики.

TO THE NUMERICAL SOLVING OF LOCAL GRADIENTALITY MECHANICS VARIATIONAL PROBLEMS WITH USING MOVING LEAST–SQUARE APPROXIMATIONS

The base relations of local gradientality mechanics are formulated. The meshless method for solving the corresponding problems of mathematical physics with using moving least–squares approximations is proposed.

Центр математичного моделювання
Ін-ту прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,
Політехніка Опольська,
Університет Зеленогурський, Польща

Отримано
07.10.03