

Российская академия наук
Отделение энергетики, машиностроения, механики и процессов
управления РАН
Научный совет РАН по механике конструкций из композиционных
материалов
ФГБУН Институт прикладной механики РАН
ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН
ФГБУ Московский авиационный институт (Национальный
исследовательский университет)
Московский физико-технический институт (Государственный
университет)

МЕХАНИКА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ И СИСТЕМ

СБОРНИК ТРУДОВ
2-й Всероссийской научной конференции
(17 – 19 декабря 2013 года, г. Москва)

Том 3.

МОСКВА

«Механика наноструктурированных материалов и систем».
Сборник трудов 2-й Всероссийской научной конференции в 3-х томах. Том 3.
Москва, 17 – 19 декабря 2013 г. – М.: ИПРИМ РАН, 2013. – 162 с.

В том 3 Сборника трудов конференции включены работы участников конференции, доложенные на секциях: «Аэро-, гидромеханика и реология структурно сложных сред» и «Вычислительные методы механики наноструктурированных и гетерогенных сред».

Составители сборника:

Карнет Ю.Н., Муковникова И.И., Яновский Ю.Г.

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной механики Российской академии наук, 2013

Том 3
СОДЕРЖАНИЕ

<i>Аэро-, гидромеханика и реология структурно сложных сред</i>	5
Связь характеристик структуры поверхности гетерогенных систем с физико-механическими свойствами и скоростью перемещения в них наночастиц	
Валиев Х.Х., Науменко В.Ю., Снегирева Н.С.....	6
Реология сланцев: транспорт газовой фазы в нанопорах керогена	
Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Саваторова В.Л., Талонов А.В.....	15
К гидромеханике структурных сред в коллекторе с проницаемыми стенками	
Исмаилов Р.Ш., Гахраманов П.Ф., Исмаилова Ш.Г., Гулиев Э.Ф.....	25
Анализ процесса коагуляции коллоидных частиц в омагниченном водном потоке	
Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.....	33
Коагуляция наночастиц в постоянном магнитном поле	
Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.....	39
Микроструктура микропузырьковой газожидкостной среды	
Левин Ю.К., Попов В.В.....	46
<i>Вычислительные методы механики наноструктурированных и гетерогенных сред</i>	51
Параметрический метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений термоупругости с быстроосциллирующими коэффициентами	
Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н.....	52
Метод мелкозернистого параллелизма в моделировании перколяционных структур	
Гергега А.Н., Остапкевич М.Б.....	69
Исследование закономерностей влияния физико-химических характеристик углерод-углеродного материала на механические свойства	
Долгодворов А.В., Докучаев А.Г., Чекалкин А.А.....	75
Влияние характеристик вискерсов на эффективный продольный модуль сдвига композиционных материалов, армированных вискеризованными волокнами	
Лурье С.А., М. Минат.....	82
О масштабозависимых моделях стержней в градиентной теории упругости	
Лурье С.А., Попова Е.И., Лыкосова Е.Д., Бабайцев А.В.....	89
Построение аналитического корректирующего решения с согласованной кинематикой в задаче об изгибе ортотропной полосы со статическими условиями на продольных краях	
Лурье С.А., Харченко К.Д., Лыкосова Е.Д.....	96

Нестандартные задачи механики деформируемого твердого тела и итерационный метод их решения	
Пестренин В.М., Пестренина И.В., Ландик Л.В.....	104
Регрессионно-тензорное моделирование оптимальных процессов многофакторных когнитивных систем	
Русанов В.А., Агафонов С.В., Данеев А.В., Лямин С.В.....	119
Гиперболические модели в механике гетерогенных сред. Разработка, анализ и приложение	
Суров В.С., Березанский И.В., Степаненко Е.Н.....	134
Квантово-механическое моделирование оптимальных физико- механических свойств клеев на основе эпоксидных связующих	
Яновский Ю.Г., Никитина Е.А., Никитин С.М., Карнет Ю.Н.....	149

Аэро-, гидромеханика и реология структурно сложных сред

СВЯЗЬ ХАРАКТЕРИСТИК СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ С ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ И СКОРОСТЬЮ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ В НИХ НАНОЧАСТИЦ

Валиев Х.Х.¹, Науменко В.Ю.², Снегирева Н.С.¹

¹*ФБГУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия*

²*Российский национальный исследовательский медицинский университет
им. Н.И.Пирогова, г. Москва, Россия*

РЕЗЮМЕ

Полимерные пористые пленки, являющиеся основой динамических биологически активных композиционных материалов, изучены методами атомно-силовой микроскопии, физико-механических испытаний и кинетики движения водных коллоидов наночастиц магнетита. Обсуждается корреляция наблюдаемых свойств.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование пространственной организации композиционных материалов как результата технологии их формирования и связи показателей структуры с функциональными возможностями материалов – интересная научная задача. Среди последних характеристик важны не только прочность, эластичность и другие механические характеристики исследуемых материалов. Важны возможности переноса жидких сред в столь сложных по структуре материалах, в том числе коллоидных растворов и других наносистем, что делает композиционный материал способным к перераспределению вносимых в них биологически активных соединений. Это позволяет выделить среди гетерогенных структурированных сред особую группу динамических композиционных материалов и требует изучения их строения в процессе перемещения в них наносистем.

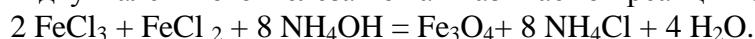
Среди таких композиционных материалов [1,2] одно из важных мест занимают биологически активные наноконпозиционные материалы [3]. К ним относятся материалы, состоящие из пористой полимерной основы, в которой находятся либо иммобилизованные препараты (например, лекарственные препараты), либо движущиеся реагенты, например конъюгированные с наночастицами золота антитела и антигены в иммунохроматографических тест – полосках [4]. В связи с этим при конструировании биосенсоров представляет большой интерес вопрос об оптимизации выбора материалов, участвующих в их работе. При этом необходимо решать множество взаимосвязанных задач биомеханики. К ним относится анализ прочности пористых мембран, выбор оптимальных по диаметру пор заготовок, состоящих из основы и с соединенной с ней мембраной, определение эффективности и скорости движения аналита и прочих характеристик подобного изделия. При разработке биологических и физиологических процессов, например методов диагностики и воздействия гипертермии на раковые клетки [5], задача усложняется, то есть возникает необходимость прогнозирования возможности наночастиц двигаться в сложном капиллярном пространстве живой ткани с контролем их размеров. При подготовке партий таких наночастиц, например магнетита, должна быть

обеспечена их определенная концентрация, высокая чувствительность с достаточно высокой скоростью продвижения в сложном по структуре материале. Здесь важно также установление вероятности агломерации наночастиц, и контроль эффективности их действия на онкологические клетки экспериментального животного.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В данной работе использованы мембраны "Владипор" (г. Владимир, Россия) с эффективными диаметрами пор 0,20 мкм, 0,45 мкм, 0,65 и 1,00 мкм, как модели наиболее близких по размеру значений диаметров протоков в тканях животных. Топография поверхности этих мембран исследовалась с помощью атомно-силового микроскопа easyScan (Nanosurf, Швейцария), работавшего в контактном режиме на воздухе при комнатной температуре. Использовалась дополнительная защита АСМ от внешних возбуждений с помощью динамического антивибрационного столика TS-150.

Испытания физико-механических свойств мембран проводились на универсальной разрывной машине UTS-10 (Ulm, Германия). Выбранный в качестве действующего нановещества сложный оксид железа – магнетит Fe_3O_4 , был получен химическим методом при осаждении щелочью из водного раствора солей трех и двухвалентного железа по так называемой реакции Элмора:



Стабилизация размера (порядка 2–50 нм) наночастиц магнетита в водных коллоидах достигается добавлением специального поверхностно-активного вещества, при интенсивном перемешивании раствора, что создает возможность использования его в медицинских целях. Скорость движения наночастиц наблюдали с помощью разработанной в ИПРИМ РАН установки.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

АСМ исследования выявили характерные особенности структуры поверхности микропористых капроновых мембран Владипор с эффективными диаметрами пор 0, 2 мкм, 0, 45 мкм, 0, 65 мкм. На рис.1-4 приведены снимки поверхности этих мембран. Слева – топография, справа – трехмерное изображение. Сканируемые площади охватывали диапазон от 105 до 0.500 мкм². Анализ снимков выявил довольно регулярную структуру пор исследованных мембран. Форма самих пор при этом существенно отличается от чисто сферической, часто она резко анизотропная. Подсчитанные на основе данных АСМ средние размеры пор поверхности согласуются с данными изготовителя. Анализ изображений позволяет прогнозировать возможность проникновения наночастиц в капилляры пористых пленок и в межклеточные пространства экспериментальных животных, что весьма важно для гипертермии.

В качестве образцов для испытания физико-механических свойств мембран на универсальной разрывной машине были изготовлены полоски 100x10 мм (в соответствии с нормативными документами [6]) из мембран, исследовавшихся методом АСМ. Для испытаний в увлажненном состоянии, мембраны одни сутки выдерживались в дистиллированной воде. При установке образцов в пневматические зажимы испытательной машины UTS-10 концы влажных образцов оборачивали смоченной водой хлопчатобумажной тканью во избежание высыхания. Растяжение проводили при постоянной скорости 20 мм/мин.

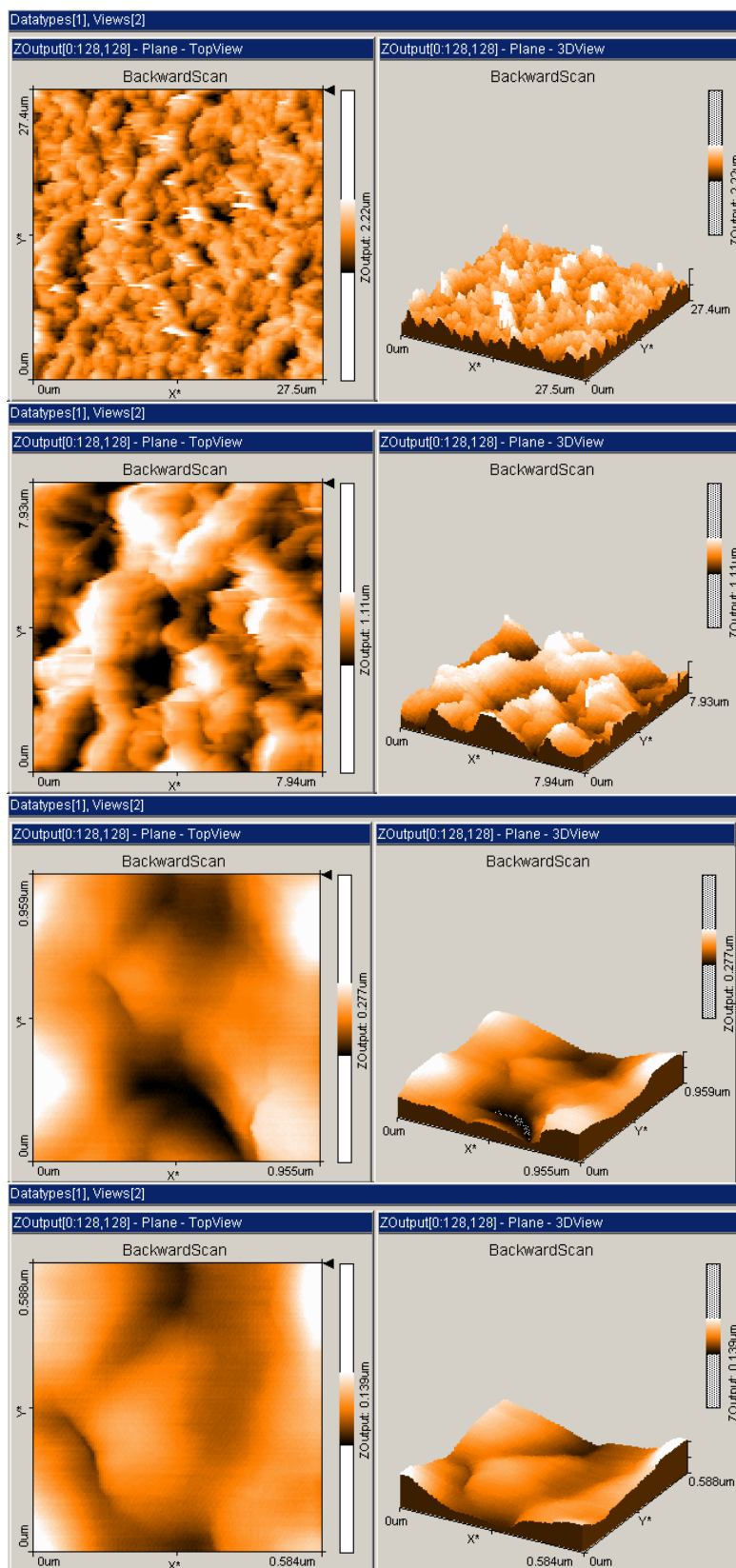


Рис.1. АСМ изображение поверхности капроновой мембраны (Владипор). Номинальный диаметр пор 0.2 мкм.

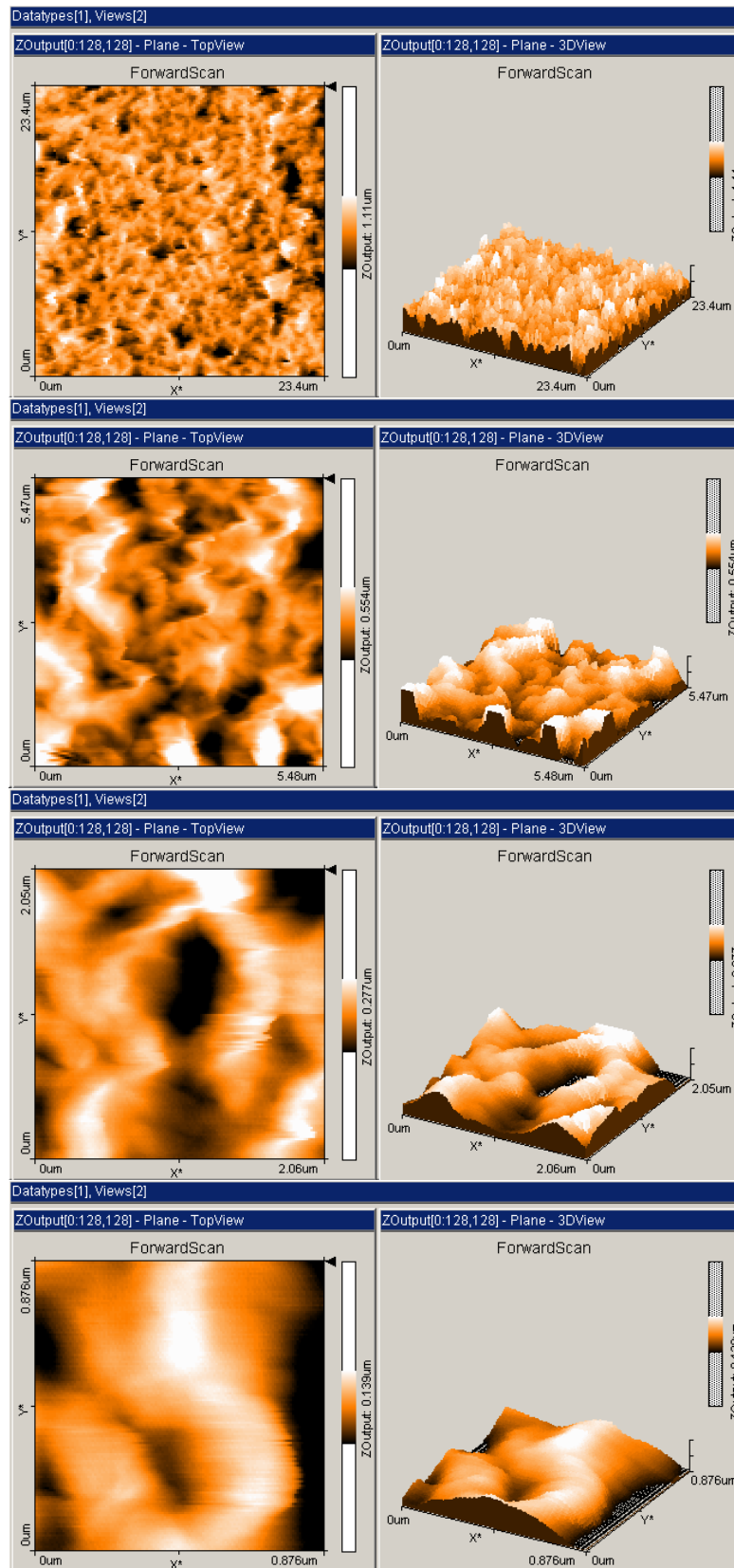


Рис.2. АСМ изображение поверхности капроновой мембраны (Владипор). Номинальный диаметр пор 0.2 мкм. Обратная сторона.

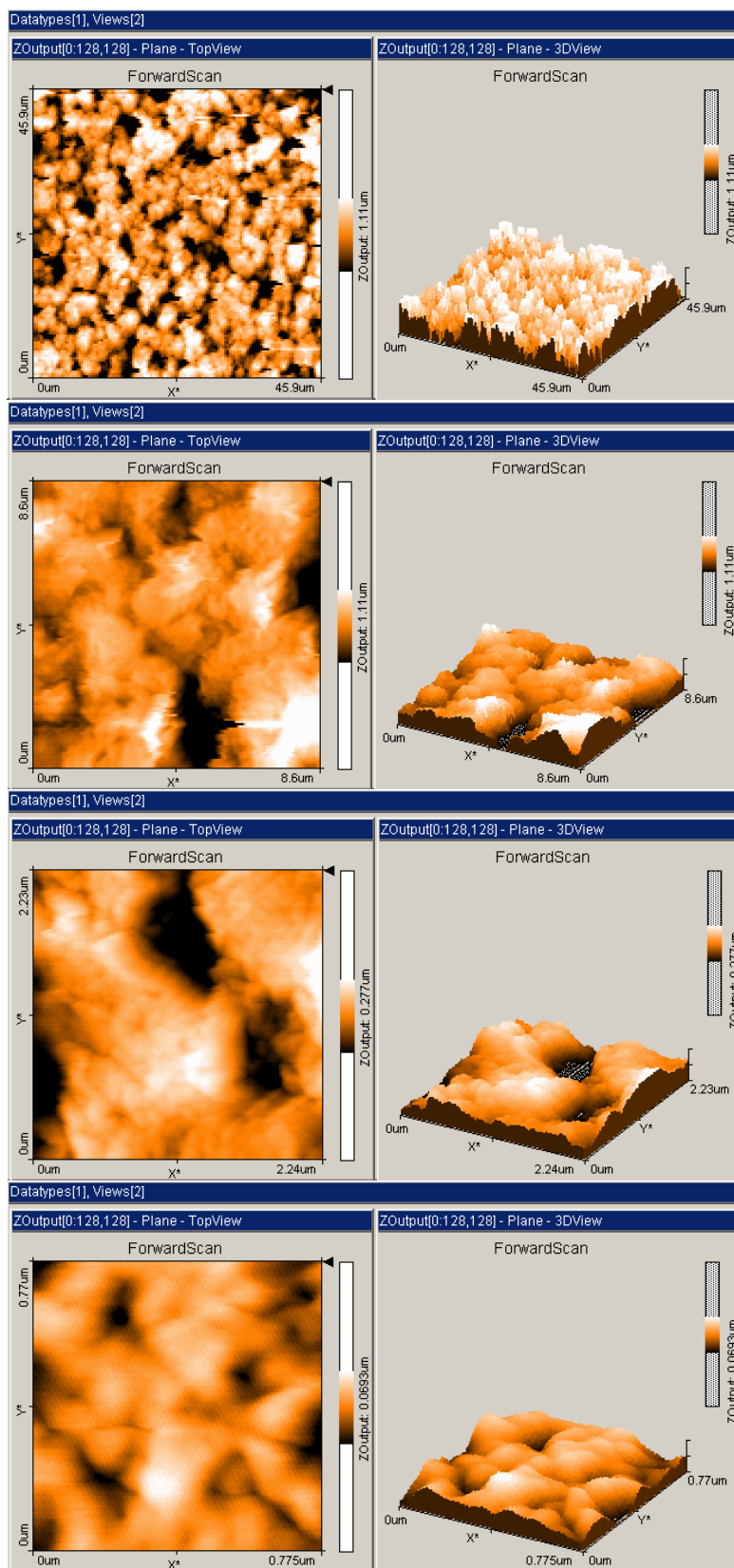


Рис.3. АСМ изображение поверхности капроновой мембраны (Владипор). Номинальный диаметр пор 0.45 мкм.

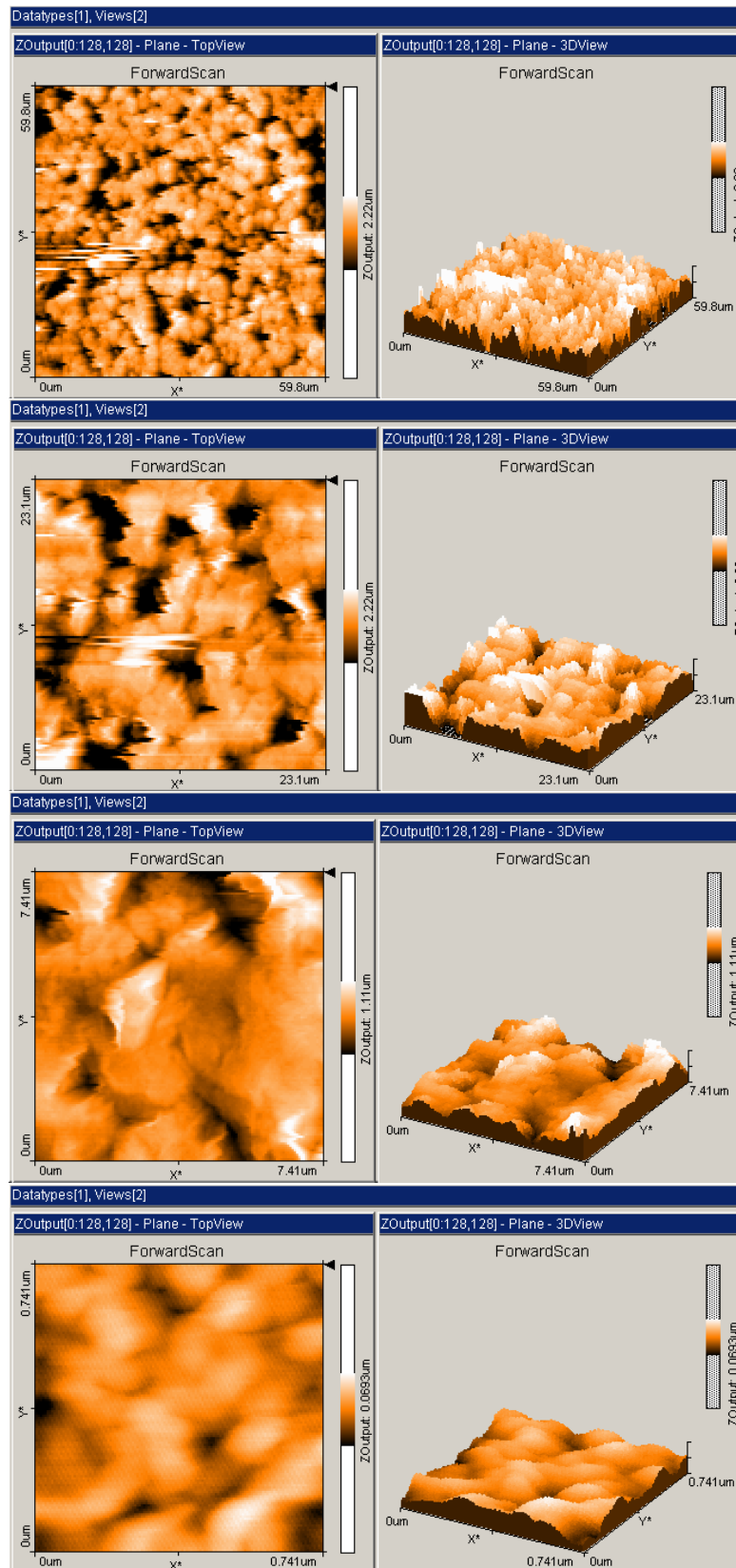


Рис.4. АСМ изображение поверхности капроновой мембраны (Владипор). Номинальный диаметр пор 0.65 мкм.

По полученным экспериментальным данным были построены графики зависимости условного напряжения от удлинения образцов мембран (рис.5,6).

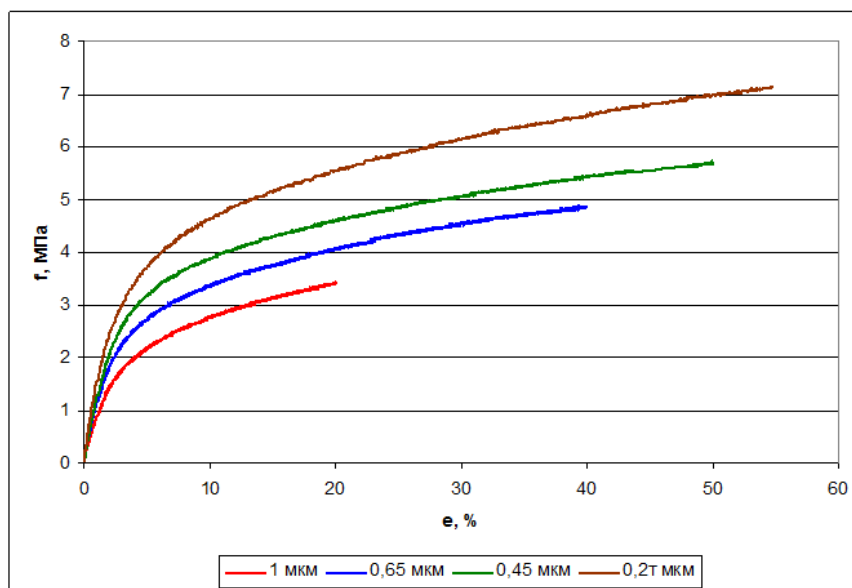


Рис.5. Зависимость условного напряжения от удлинения образцов мембран Владипор в сухом состоянии

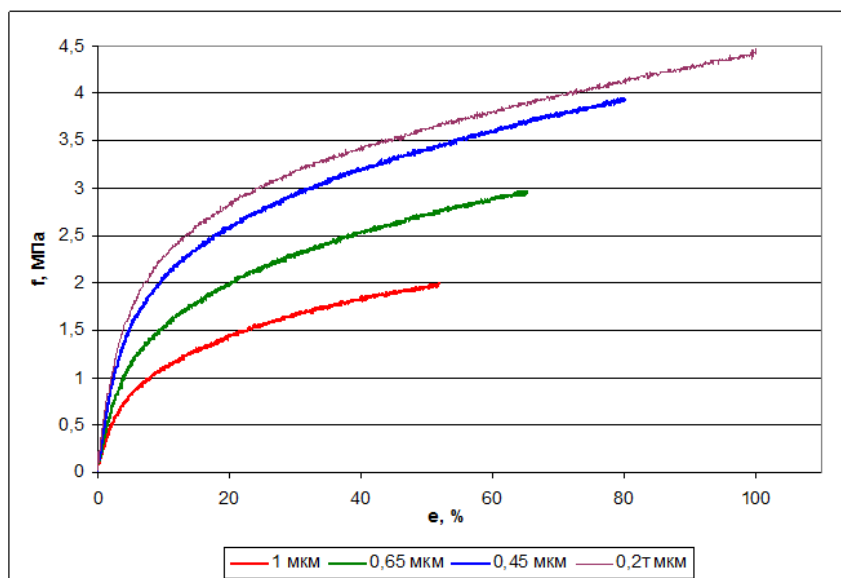


Рис.6. Зависимость условного напряжения от удлинения образцов мембран Владипор во влажном состоянии.

Испытания выявили характерное увеличение (фактически линейное) условной прочности и относительного удлинения при уменьшении размера пор мембран. Как видно из приведенной Табл.1, при увлажнении относительное удлинение всех типов мембран увеличивается почти в 2 раза, по сравнению с удлинением в сухом состоянии. Условная прочность, наоборот, уменьшается при насыщении мембраны водой.

Таблица 1.

Общие характеристики физико-механических испытаний мембран Владипор.

Размер пор, мкм	Относительное удлинение, %		Условная прочность, МПа	
	Сухое состояние	Влажное состояние	Сухое состояние	Влажное состояние
1	20	52	3,4	2,0
0,65	40	65	4,9	3,0
0,45	50	80	5,7	3,9
0,2г	55	100	7,2	4,4

Результаты исследования скорости перемещения водных коллоидных растворов наночастиц магнетита в полимерных пленках Владипор с диаметрами пор 0,2 и 0,45 мкм приведены на рис.7.

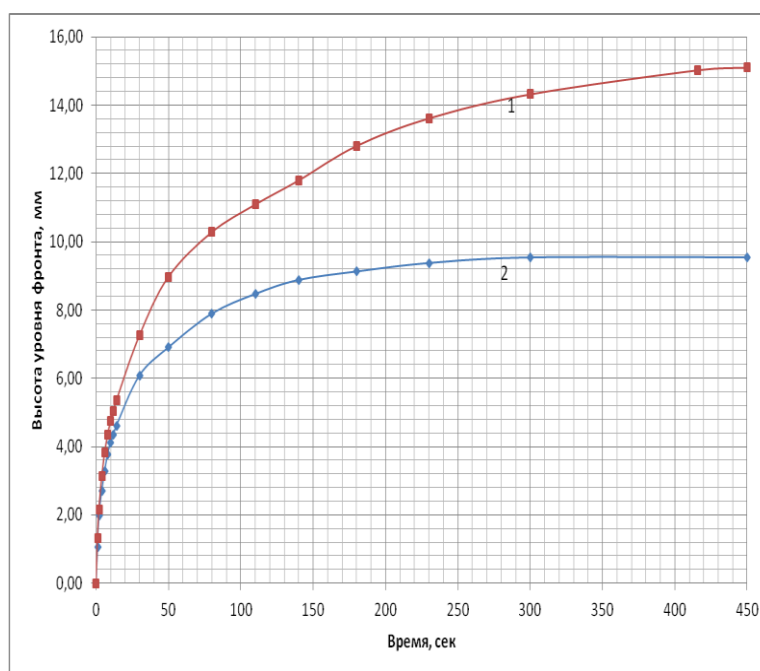


Рис.7. Данные по скорости перемещения водной 25% коллоидной системы наночастиц магнетита в пористых полимерных пленках Владипор: 1 – мембрана 0,2 мкм; 2 – мембрана 0,45 мкм.

Интересно сопоставление всех трех показателей (размеры деталей структуры поверхностных пор, прочности и скорости перемещения водных коллоидов наночастиц магнетита) обоих образцов. В то время как прочность образцов с более плотным строением (диаметр пор 0,20 мкм) выше, чем у образцов с повышенной "рыхлостью" (0,45 мкм), но скорость перемещения наночастиц магнетита больше в последнем. Это весьма важно для конструирования тест-полосок с латеральным движением образцов при уточнении диагноза заболевания [4].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен анализ связи прочностных свойств образцов полимерных пористых пленок с гетерогенной структурой их поверхности и скоростью

перемещения в них водных коллоидных растворов наночастиц магнетита. Полученные результаты важны для корреляции структуры пор поверхности полиамидных мембран Владипор с их физико-механическими свойствами и с особенностями скорости распространения движущихся наночастиц магнетита при моделировании биологических и физиологических процессов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Яновский Ю.Г. Наномеханика и прочность композиционных материалов. – М.: ИПРИМ РАН, 2008.
2. Yanovsky Yu.G., Valiev H.H., Kornev Yu.V. et all. // Int. J. of Nanomechanics, Sci. & Techn. – 2010. – Vol.1. – Iss.3. – P.187-210.
3. Згаевский В.Э., Яновский Ю.Г., Карнет Ю.Н. и др. // Механика композиционных материалов и конструкций. – 1997. – Т.3. – №3. – С.80-87.
4. Yarkov S.P., Shilenko I.V., Valiev H.H., Karnet Yu.N. et all. // J. of Vacuum Science & Technology. B: Microelectronics and Nanometer Structures. – 2009. – Vol.27. – Iss.2. – P.839-842.
5. Бабич А.В., Науменко В.Ю., Шимановский Н.Л. и др. / III-й Евразийский конгресс по медицинской физике и инженерии. «Медицинская физика - 2010». Материалы. – М., 2010. – Т.3. – С.308-310.
6. ГОСТ 29088-91. Материалы полимерные ячеистые эластичные. Определение условной прочности и относительного удлинения при разрыве.

РЕОЛОГИЯ СЛАНЦЕВ: ТРАНСПОРТ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ В НАНОПОРАХ КЕРОГЕНА

Власов А.Н.¹, Волков-Богородский Д.Б.¹, Саваторова В.Л.², Талонов А.В.²

¹ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

В работе исследуется уравнение баланса масс, описывающее транспорт газовой фазы в керогене, который рассматривается как гетерогенный материал с периодической структурой нанопор. В качестве уравнения адсорбции для простоты изложения был выбран закон Генри. Для описания вязкого течения вещества в нанопорах предполагалась справедливость закона Дарси, определяющего скорость течения свободного газа через градиент давления. Давление связывается с концентрацией свободного газа при помощи уравнения Менделеева-Клапейрона. Было показано, что применение метода асимптотического усреднения для рассматриваемой постановки задачи не всегда возможно в классическом его варианте и зависит от соотношения характерных времён протекания процессов диффузии и фильтрации. Для случая, когда такое применение метода асимптотического усреднения возможно, было получено нелинейное усреднённое (макроскопическое) уравнение, позволяющее определять распределение концентрации, давления, и скорости газовой фазы. Коэффициенты усреднённого уравнения (эффективные характеристики) определяются из задачи на ячейке с последующим усреднением соответствующих величин по объёму ячейки периодичности.

В данной работе исследуется транспорт газовой фазы в керогене [1,2], который рассматривается как гетерогенный материал с периодической структурой нанопор. Задача рассматривается в трёхмерной постановке, где все характерные величины являются функциями координаты $x = \{x_1, x_2, x_3\}$ и времени t . В этом случае уравнение баланса масс принимает вид:

$$\phi \frac{\partial C^{(k)}}{\partial t} + (1-\phi) \frac{\partial C^{(s)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\phi D_{ij}^{(k)} \frac{\partial C^{(k)}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left((1-\phi) D_{ij}^{(s)} \frac{\partial C^{(s)}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi v_i C^{(k)}), \quad (1)$$

где величины $C^{(k)}$, $C^{(s)}$ обозначают концентрации свободного и адсорбированного газа, измеряемые соответственно в количестве молей, отнесённых к поровому объёму и количеству молей, приходящихся на объём твёрдой фазы. Тензоры $D^{(k)}$ и $D^{(s)}$ характеризуют диффузионный молекулярный транспорт свободного и адсорбированного газа соответственно. Безразмерной величиной ϕ обозначена пористость керогена, а $v = \{v_1, v_2, v_3\}$ – скорость фильтрации газа.

Для описания вязкого течения газа с вязкостью μ и тензором проницаемости керогена k будем предполагать справедливость закона Дарси, связывающего скорость течения свободного газа v с градиентом давления p :

$$v = -\frac{k}{\mu} \text{grad} p. \quad (2)$$

Давление связывается с концентрацией свободного газа при помощи уравнения состояния:

$$pV = \nu RT, \Rightarrow p = \frac{\nu}{V} RT = C^{(k)} RT. \quad (3)$$

Здесь T – температура, ν – количество молей, R – универсальная газовая постоянная.

Из уравнений (2) и (3) получаем, что:

$$\mathbf{v} = -\frac{k}{\mu} RT \text{grad} C^{(k)} \quad (4)$$

В качестве уравнения адсорбции для простоты изложения будем предполагать выполнение закона Генри (т.е. процессы близки к изотермическим):

$$C^{(s)} = \kappa C^{(k)} = \kappa C, \quad \kappa - \text{const}. \quad (5)$$

В этом случае уравнение (1) упрощается и примет следующий вид:

$$[\phi + (1-\phi)\kappa] \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ [\phi D_{ij}^{(k)} + (1-\phi)\kappa D_{ij}^{(s)}] \frac{\partial C}{\partial x_j} \right\} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi v_i C). \quad (6)$$

Для нахождения решения уравнения (6) воспользуемся методом асимптотического усреднения [1], возможность применения которого обеспечивается выполнением условия пространственного разделения масштабов $\varepsilon = l/L \ll 1$, где l – характерный размер нанопор, а L – характерный глобальный размер.

Для начала обезразмерим наше уравнение, а именно, положим, что:

$$C = C^{(c)} \tilde{C}, \quad D_{ij}^{(k)} = D^{(kc)} \tilde{D}_{ij}^{(k)}, \quad D_{ij}^{(s)} = D^{(sc)} \tilde{D}_{ij}^{(s)}, \quad (7)$$

$$x = l_c \tilde{x}, \quad t = t_c \tilde{t}, \quad \mathbf{v} = v_c \tilde{\mathbf{v}}.$$

В результате уравнение (6) примет следующий обезразмеренный вид:

$$\frac{[\phi + (1-\phi)\kappa]}{t_c} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{t}} = \frac{1}{l_c^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_i} \left\{ [\phi D^{(kc)} \tilde{D}_{ij}^{(k)} + (1-\phi)\kappa D^{(sc)} \tilde{D}_{ij}^{(s)}] \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{x}_j} \right\} + \frac{v_c}{l_c} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_i} (\phi \tilde{v}_i \tilde{C}). \quad (8)$$

Разделим левую и правую части уравнения (8) на $\frac{D^{(kc)}}{l_c^2}$. В результате получим:

$$\frac{[\phi + (1-\phi)\kappa] l_c^2}{t_c D^{(kc)}} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{t}} = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_i} \left\{ [\phi \tilde{D}_{ij}^{(k)} + (1-\phi)\kappa \frac{D^{(sc)}}{D^{(kc)}} \tilde{D}_{ij}^{(s)}] \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{x}_j} \right\} + \frac{v_c l_c}{D^{(kc)}} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_i} (\phi \tilde{v}_i \tilde{C}). \quad (9)$$

Затем, вводя обезразмеренные величины:

$$P = \frac{l_c^2}{D^{(kc)} t_c}, \quad P_D = \frac{D^{(sc)}}{D^{(kc)}}, \quad Pe = \frac{v_c l_c}{D^{(kc)}} \quad (10)$$

и отбрасывая символ «~», уравнение (9) примет вид:

$$[\phi + (1-\phi)\kappa] P \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ [\phi D_{ij}^{(k)} + (1-\phi)\kappa P_D D_{ij}^{(s)}] \frac{\partial C}{\partial x_j} \right\} + Pe \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi v_i C). \quad (11)$$

Определим характерные времена, связанные с диффузией и фильтрацией:

$$t_l^{diff} = \frac{l_c^2}{D}, \quad t_l^{filtr} = \frac{l_c}{v_c}; \Rightarrow Pe = \frac{t_l^{diff}}{t_l^{filtr}}. \quad (12)$$

Затем, полагая, что характерное время диффузии является величиной порядка ε^α по отношению к времени фильтрации, где ε – характерный геометрический масштаб процесса, получим следующие оценки для введенных чисел:

$$P = O(1), \quad P_D = O(1), \quad Pe = O(\varepsilon^\alpha).$$

В результате сделанных выше допущений, обезразмеренное уравнение (11) приводится к виду:

$$[\phi + (1 - \phi)\kappa] \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ [\phi D_{ij}^{(k)} + (1 - \phi)\kappa D_{ij}^{(s)}] \frac{\partial C}{\partial x_j} \right\} + \varepsilon^\alpha \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi v_i C). \quad (13)$$

Следуя методу асимптотического усреднения [3], представим концентрацию свободного газа в виде ряда по малому параметру ε :

$$C_k = C_k^{(0)}(x, \xi, t) + \varepsilon C_k^{(1)}(x, \xi, t) + \varepsilon^2 C_k^{(2)}(x, \xi, t) + \dots \quad (14)$$

Тогда разложение в ряд по малому параметру ε скорости его фильтрации в соответствии с (4) будет иметь вид:

$$v = -\frac{k}{\mu} RT \left(\text{grad} \left(C^{(0)}(x, \xi, t) \right) + \varepsilon \text{grad} \left(C^{(1)}(x, \xi, t) \right) + \varepsilon^2 \text{grad} \left(C^{(2)}(x, \xi, t) \right) + \dots \right) \quad (15)$$

или же в покомпонентной форме:

$$v_i = -\frac{k_{ij}}{\mu} RT \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \dots \right). \quad (15')$$

Здесь в (14), (15) и (15') x и $\xi = \frac{x}{\varepsilon}$ «медленные» и «быстрые» переменные соответственно, которые считаются независимыми; $C^{(i)}(x, \xi, t)$ – периодические по ξ функции со средним значением по ячейке периодичности равным нулю, ($i = 0, 1, 2, \dots$).

Подставляя (14) и (15') в уравнение (13) уравнение (13) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} & [\phi + (1 - \phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} \left[C^{(0)}(x, \xi, t) + \varepsilon C^{(1)}(x, \xi, t) + \varepsilon^2 C^{(2)}(x, \xi, t) + \dots \right] = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ [\phi D_{ij}^{(k)} + (1 - \phi)\kappa D_{ij}^{(s)}] \frac{\partial}{\partial x_j} \left[C^{(0)}(x, \xi, t) + \varepsilon C^{(1)}(x, \xi, t) + \varepsilon^2 C^{(2)}(x, \xi, t) + \dots \right] \right\} - \\ & - \varepsilon^\alpha RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)}(x, \xi, t) + \varepsilon C^{(1)}(x, \xi, t) + \varepsilon^2 C^{(2)}(x, \xi, t) + \dots \right] \times \right. \\ & \left. \times \frac{\partial}{\partial x_j} \left[C^{(0)}(x, \xi, t) + \varepsilon C^{(1)}(x, \xi, t) + \varepsilon^2 C^{(2)}(x, \xi, t) + \dots \right] \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Далее, вводя обозначение $D_{ij} = [\phi D_{ij}^{(k)} + (1 - \phi)\kappa D_{ij}^{(s)}]$ и используя правило дифференцирования сложной функции с учётом того,

что $\frac{\partial}{\partial x_j} = \left(\frac{\partial}{\partial x_j} + \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right) = \left(D_{x_j} + \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right)$, получим:

$$\begin{aligned} & [\phi + (1 - \phi)\kappa] \left[\varepsilon^0 \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, \xi, t) + \varepsilon^1 \frac{\partial}{\partial t} C^{(1)}(x, \xi, t) + \dots \right] = \\ & = \varepsilon^{-2} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} + \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \\
& +\varepsilon^0 \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \\
& +\varepsilon^0 \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \\
& +\varepsilon^1 \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \\
& +\varepsilon^1 \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(3)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(2)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \dots - \\
& -\varepsilon^{\alpha-2} RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)}(x, \xi, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} - \\
& -\varepsilon^{\alpha-1} RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right\} - \tag{17} \\
& -\varepsilon^{\alpha-1} RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\
& -\varepsilon^{\alpha} RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\
& -\varepsilon^{\alpha} RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(2)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\
& -\varepsilon^{\alpha+1} RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(2)} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\
& -\varepsilon^{\alpha+1} RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(2)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(3)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) \right] \right\} - \\
& -\varepsilon^{\alpha+1} RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(2)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(3)} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \dots
\end{aligned}$$

Решение уравнения (17) сводится к решению рекуррентной цепочки дифференциальных уравнений. Для этого необходимо приравнять коэффициенты уравнения (17) при степенях ε , стоящих в левой части, коэффициентам при таких же степенях, стоящих в правой части.

Пусть α принимает значения равные $-1, 0, 1$. При этом в уравнении (17) ограничимся членами, стоящими при степенях $\varepsilon^{-3}, \varepsilon^{-2}, \varepsilon^{-1}$ и ε^0 . Остальные члены уравнения составят его невязку, которая будет иметь порядок $O(\varepsilon)$.

I. Случай $\alpha = -1$.

1. При ε^{-3}

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)}(x, \xi, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} = 0. \quad (18)$$

2. При ε^{-2}

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\ & - RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

3. При ε^{-1}

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} - \\ & - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(2)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\ & - RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (20)$$

4. При ε^0

$$\begin{aligned} & [\phi + (1 - \phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, \xi, t) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} - \\ & - RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(2)} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\ & - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(2)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(3)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) \right] \right\} - \\ & - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(2)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(3)} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (21)$$

II. Случай $\alpha = 0$.

1. При ε^{-2}

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \left[D_{ij} - RT \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} = 0. \quad (22)$$

2. При ε^{-1}

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} - \\
& - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\
& - RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right\} = 0
\end{aligned} \tag{23}$$

3. При ε^0

$$\begin{aligned}
& [\phi + (1 - \phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, \xi, t) = \\
& = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \\
& + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} - \\
& - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(2)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} - \\
& - RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{24}$$

III. Случай $\alpha=1$.

1. При ε^{-2}

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} = 0. \tag{25}$$

2. При ε^{-1}

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} - \\
& - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)}(x, \xi, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{26}$$

3. При ε^0

$$\begin{aligned}
& [\phi + (1 - \phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, \xi, t) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, \xi, t) \right] \right\} + \\
& + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} -
\end{aligned} \tag{27}$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) + C^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(0)} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(0)} \right\}$$

Можно показать, что во всех 3-х случаях соответственно из уравнений (18), (22) и (25) следует независимость концентрации газа $C^{(0)}$ от быстрой переменной, т.е. она является только функцией координат и времени, а именно, принимает вид $C^{(0)}(x, t)$. Это следует из того, что проницаемость есть положительно определённый тензор, концентрация газа в керогене величина положительная и предположения, что концентрация газа является периодической функцией по быстрой переменной.

Таким образом, уравнения (19)-(21), (23), (24) и (26), (27) соответствующие рассматриваемым случаям примут более простой вид.

I. Случай $\alpha = -1$.

1. При ε^{-2}

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right\} = 0 \quad (28)$$

2. При ε^{-1}

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right] \right\} - \quad (29)$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right\} = 0.$$

3. При ε^0

$$[\phi + (1 - \phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) \right] \right\} +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right] \right\} - \quad (30)$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(2)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(3)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} C^{(2)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right\}.$$

II. Случай $\alpha = 0$.

1. При ε^{-1}

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right\} = 0 \quad (31)$$

2. При ε^0

$$[\phi + (1-\phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) \right] \right\} +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)} \right) + C^{(1)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right] \right\} \quad (32)$$

III. Случай $\alpha=1$.

1. При ε^{-1}

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) \right] \right\} = 0 \quad (33)$$

2. При ε^0

$$[\phi + (1-\phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) \right] \right\} +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right] \right\} -$$

$$-RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)} \right) \right] \right\} \quad (34)$$

Анализируя уравнения (28)-(30) и (31), (32) соответственно для случаев $\alpha=-1$ и $\alpha=0$, следует сказать, что они требуют дополнительного серьёзного исследования. Поэтому далее ограничимся рассмотрением только случая когда $\alpha=1$.

Перепишем уравнение (33) в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(1)}(x, \xi, t) \right\} = \frac{\partial}{\partial \xi_i} D_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) \quad (35)$$

Уравнение (35) имеет периодическое по быстрой переменной ξ решение относительно функции $C^{(1)}(x, \xi, t)$, которое представимо в виде:

$$C^{(1)}(x, \xi, t) = N_i(\xi) \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} C^{(0)}(x, t), \quad (36)$$

где $N_i(\xi)$ – периодические по ξ функции со средним по ячейке периодичности $\langle N_i(\xi) \rangle = 0$ ($i=1,2,3$).

Функции $N_i(\xi)$, как это следует из (35), являются обобщёнными решениями уравнения на ячейке:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} (N_k(\xi) - \delta_{kj} \xi_k) \right\} = 0. \quad (37)$$

Далее, подставляя (36) в уравнение (34) получим:

$$\begin{aligned} & [\phi + (1-\phi)\kappa] \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, t) = \\ & = D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} N_k(\xi) \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} C^{(0)}(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} C^{(0)}(x, t) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} C^{(2)}(x, \xi, t) + N_k(\xi) \cdot \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} C^{(0)}(x, t) \right] \right\} - \\ & - RT \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left\{ \phi \frac{k_{ij}}{\mu} \cdot \left[C^{(0)}(x, t) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x_j} C^{(0)}(x, t) + \frac{\partial}{\partial \xi_j} N_k(\xi) \cdot \frac{\partial}{\partial x_k} C^{(0)}(x, t) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (38)$$

Усредняя это уравнение по ячейке периодичности, получим усреднённое уравнение, описывающее транспорт газовой фазы в керогене, который рассматривается как гетерогенный материал с периодической структурой нанопор. Усреднённое уравнение при этом, учитывая периодичность функций

$C^{(2)}(x, \xi, t)$, $N_k(\xi)$ и $\frac{\phi}{\mu} k_{ij}(\xi)$ по быстрой переменной ξ , принимает следующий

вид:

$$\langle \phi + (1-\phi)\kappa \rangle \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, t) = \left\langle D_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} (N_k(\xi) + \delta_{kj} \xi_k) \right] \right\rangle \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} C^{(0)}(x, t) \quad (39)$$

или

$$\hat{\kappa} \frac{\partial}{\partial t} C^{(0)}(x, t) = \hat{D}_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} C^{(0)}(x, t). \quad (40)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$\hat{\kappa} = \langle \phi + (1-\phi)\kappa \rangle$ – эффективный коэффициент Генри;

$$\hat{D}_{ij} = \left\langle D_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} (N_k(\xi) + \delta_{kj} \xi_k) \right\rangle = \left\langle \left[\phi D_{ij}^{(k)} + (1-\phi)\kappa D_{ij}^{(s)} \right] \frac{\partial}{\partial \xi_j} (N_k(\xi) + \delta_{kj} \xi_k) \right\rangle -$$

эффективный тензор диффузии.

В заключение отметим, что реализация метода асимптотического усреднения для рассмотренной в статье постановки задачи не всегда возможна в классическом его варианте и зависит от соотношения характерных времён протекания процессов диффузии и фильтрации. Для случая, когда такое применение этого метода возможно, в результате процедуры асимптотического

усреднения было получено усреднённое (макроскопическое) уравнение диффузии, позволяющее определять распределение концентрации, а значит и давление (3), и скорости газовой фазы (4). Коэффициенты усреднённого уравнения (эффективные характеристики) при этом определяются из задачи на ячейке с последующим усреднением соответствующих величин по объёму ячейки периодичности.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Klinkenberg L.G.* The permeability of porous media to liquid and gases. / In: API Drilling and Production Practice. Paper presented at the American Petroleum Inst. 11th Mid Year Meeting. – Tulsa. Oklahoma, May 1941. – P.200-213.
2. *Fathi E., Akkutlu I.Yu.* Mass transport of adsorbed-phase in stochastic porous medium with fluctuating porosity field and nonlinear gas adsorption kinetics // Transp. Porous Med. – 2012. / 91:5–33 DOI 10.1007/s11242-011-9830-x.
3. *Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П.* Осреднение процессов в периодических средах. – М.: Наука, 1984. – 352 с.

К ГИДРОМЕХАНИКЕ СТРУКТУРНЫХ СРЕД В КОЛЛЕКТОРЕ С ПРОНИЦАЕМЫМИ СТЕНКАМИ

Исмаилов Р.Ш., Гахраманов П.Ф., Исмаилова Ш.Г., Гулиев Э.Ф.

Сумгаитский Государственный Университет, г. Сумгаит, Азербайджан

РЕЗЮМЕ

Рассматривается вывод уравнений гидромеханики структурных сред с переменной массой. Получены системы уравнений движения для вязких и вязкопластичных сред.

1. ВВЕДЕНИЕ

Структурные среды образуют чрезвычайно широкий класс разнообразных систем, общими свойствами которых являются их текучесть и отклонение от закона вязкого трения Ньютона. К ним относятся дисперсные системы - глинистые и цементные растворы, нефтяные эмульсии и парофинозные нефти, коллоидные растворы и суспензии, некоторые смазочные масла и молочные продукты и др. Обычно размеры дисперсных частиц в среде достаточно малы по сравнению с размерами коллектора (трубы, канала), содержащего суспензию, поэтому в некотором смысле можно рассматривать дисперсную систему как сплошную среду.

2. ВЫВОД ОСНОВНЫХ УРАВНЕНИЙ

При математическом описании движения структурных сред в коллекторе (трубе, канале) с проницаемыми стенками (система не является изолированной) законы сохранения записываются в виде уравнений баланса, связывающих скорость изменения «полного количества» соответствующих величины в некотором объеме с потоком этой величины через поверхность, ограничивающую объем и «источниками», действующим внутри объема. Тогда для среды в целом можно написать следующие уравнения баланса массы, импульса и энергии в интегральной форме:

$$\int_v \frac{\partial \rho}{\partial t} dv = - \int_s \rho u_n ds + \int_v q_* dv, \quad (1)$$

$$\int_v \frac{\partial m}{\partial t} dv = - \int_s (m u_n + \vec{\sigma}_n) ds + \int_v (\rho \vec{F} + \vec{u}_* q_*) dv, \quad (2)$$

$$\int_v \frac{\partial E}{\partial t} dv = - \int_s (\rho E u_n - \vec{u} \vec{\sigma}_n + \vec{q}_n^*) ds + \int_v (\rho m \vec{F} + E_* q_*) dv, \quad (3)$$

где $m = \rho \bar{u}$; $E = e + u^2 / 2$; $E_* = e_* + u_*^2 / 2$; ρ, \vec{u} – плотность и вектор скорости среды; $\vec{F}, \vec{\sigma}$ – вектор внешних массовых и поверхностных сил; e, e_* – внутренняя энергия основной и изменяющей массы; q_* – интенсивность изменения массы; \vec{u}_* – вектор скорости изменяющей массы; \vec{q} – вектор теплового потока.

Уравнения движения в интегральной форме (1)-(3) могут быть представлены в виде:

$$\int_V \frac{\partial A}{\partial t} dV = - \int_S B_n dS + \int_V D dV. \quad (4)$$

Здесь величины A, B, D в зависимости от уравнения (1)-(3) могут быть или скалярные, или векторные величины и задаются так:

$$A = \begin{cases} \rho \\ m \\ \rho E \end{cases} \quad B_n = \begin{cases} \rho u_n \\ m u_n - \sigma_n \\ \rho E u_n - \bar{u} \sigma_n + \bar{q}_n^* \end{cases} \quad D = \begin{cases} q_* \\ \rho \vec{F} + \bar{u}_* q_* \\ m \vec{F} + E_* q_* \end{cases} \quad (5)$$

В области непрерывных движений, параметры среды являются функцией координат и времени, поэтому в (4), принимая A, B, D как $f(x, y, z, t)$ и по формуле Гаусса-Остроградского преобразуя интегралы по поверхности S в интегралы по объему V , можем написать:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\text{div} B + D. \quad (6)$$

Из (6) после соответствующих преобразований получим следующие дифференциальные уравнения:

а) переноса массы (при $A = \rho$, $B = \rho \bar{u} = m$, $D = q_*$)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div} m + q_*, \quad (7)$$

б) переноса импульса (при $A = \rho \bar{u} = m$, $B = m \bar{u} - \bar{\sigma}$, $D = \rho \vec{F} + \bar{u}_* q_*$)

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\text{div}(m \bar{u} - \bar{\sigma}) + \rho \vec{F} + \bar{u}_* q_*, \quad (8)$$

в) переноса энергии

(при $A = \rho(e + u^2 / 2) = \rho E$, $B = \rho(e + u^2 / 2) \bar{u} - \bar{u} \bar{\sigma} + \bar{q}_* = mE - \bar{u} \bar{\sigma} + q_*$,

$D = \rho \vec{F} \bar{u} + (e_* + u_*^2 / 2) q_* = m \vec{F} + E_* q_*$)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) = -\text{div}(mE - \bar{u} \bar{\sigma} + \bar{q}_*) + m \vec{F} + E_* q_*. \quad (9)$$

Уравнения (7)-(9) можно представить и в следующем виде:

а) уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = q_*, \quad (10)$$

б) уравнение динамики

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = \rho F_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + (u_{*i} - u_i) q_*, \quad (11)$$

в) уравнение энергии

$$\rho \left(\frac{\partial E}{\partial t} + u_j \frac{\partial E}{\partial x_j} \right) = \rho (F_i u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij} u_i) - \frac{\partial q_i^*}{\partial x_j} + (E_* - E_i) q_*, \quad (12)$$

где $E = e + u^2 / 2 = c_v T + u^2 / 2$; $E_* = e_* + u_*^2 / 2 = c_v T_* + u_*^2 / 2$; T, T_* – температуры текучих сред и источников (или стоков) массы; c_v – теплоемкость среды при постоянном объеме.

Из системы дифференциальных уравнений движения потока среды с переменной массой (10)-(12), при отсутствии внешних источников (стоков)

массы $q_* = 0$, импульса $(u_{*i} - u_i)q_* = 0$ и энергии $(E_{*i} - E_i)q_* = 0$, легко получить известные уравнения гидромеханики [1,6].

Дифференциальные уравнения динамики, баланса энергии и вещества (10)-(12) в потоках среды с переменной массой относились к произвольным средам. В полученных уравнениях функции \vec{F} , q_* , \vec{u}_* , E_* обычно известны. Искомые функции ρ , \vec{u} , σ_{ij} , \vec{q}^* . Таким образом, неизвестных больше, чем уравнений (10)-(12). Общих уравнений гидродинамики (10)-(12) недостаточно для получения замкнутой системы уравнений, т.к. в них нет информации о самой среде. Поэтому необходимо ввести модели среды, которые в некоторой степени отражали бы действительные свойства среды и были бы достаточно удобны для получения замкнутой системы уравнений. Во всех моделях рассматриваемых ниже, считается, что тензор напряжений симметричен $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ и среда подчиняется закону теплопроводности Фурье $\vec{q}^* = -\lambda \text{grad}T$ (где λ – коэффициент теплопроводности, T – температура).

Многочисленными исследованиями [2-4] установлено, что поведение структурированных сред в общем случае нельзя описать какой-нибудь одной реологической моделью. Поэтому для их описания могут быть использованы различные реологические модели в зависимости от условий задачи и возможности математической реализации получаемых уравнений.

3. МОДЕЛИ ВЯЗКОПЛАСТИЧНЫХ СРЕД

В общем случае механические свойства структурно сложных сред закону Ньютона о вязкостном трении не подчиняется [2-4], так как при их течении утрачивается свойство пропорциональности между приложенной нагрузкой (напряжением сдвига) и вызываемой ею деформацией (скоростью сдвига). В большинстве случаев реологическое состояние структурных сред описывается моделью неньютоновских сред.

Основной характеристикой неньютоновских сред являются кривые течения (реограммы), изображающие график зависимости между градиентом скорости (или скоростью сдвига) и возникающим в ней касательным напряжением. Кривые течения (реограммы) ньютоновских сред (например, низкомолекулярных сред, светлых и легких нефтей) носит линейный характер, а неньютоновских сред весьма многообразны и в общем случае их реограммы нелинейно. Особый интерес представляют неньютоновские среды, в которых наряду с вязкостью проявляются также пластические свойства, заключающиеся в наличии некоторого предельного напряжения сдвига, после достижения, которого возникает течение среды. Исследования А.Х.Мирзаджанзаде, З.П. Шульмана и др. показали, что многие неньютоновские среды обладают вязкопластичными свойствами. В этом случае тензор напряжений неньютоновских вязкопластичных несжимаемых сред имеет вид [3,4]:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}, \quad \tau_{ij} = 2B\varepsilon_{ij}, \quad (13)$$

где p – давление, δ – символ Кронекера, $\varepsilon_{ij} = 0,5(u_{i,j} + u_{j,i})$.

Здесь для линейно вязкопластичной среды (по А.Х.Мирзаджанзаде):

$$B = \left(\eta + \frac{\tau_0}{A} \right), \quad (14)$$

а для нелинейно - вязкопластичной среды (по З.П. Шульману):

$$B = \left(\eta^{1/m} + \frac{\tau_0^{1/n}}{A^{1/m}} \right)^n A^{\frac{n-1}{m}}, \quad (15)$$

где τ_0 – предельное напряжение сдвига (или предел текучести), η – структурная вязкость, n и m – коэффициенты, A - интенсивность скоростей деформации:

$$A = \left[2(u_{i,i})^2 + (u_{i,j} + u_{j,i})^2 \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Уравнение теплового потока (по закону теплопроводности Фурье) имеет вид:

$$q_i^* = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (17)$$

С учетом (13)-(17) система уравнений гидромеханики нелинейно вязкопластичной несжимаемой среды с внешним источником (или стоком) массы имеет вид:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} &= q_* \\ \rho \frac{du_i}{dt} &= \rho F_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2B \varepsilon_{ij}) + (u_{*i} - u_i) q_* \\ \rho \frac{dE}{dt} &= \rho (F_i u_i) - \frac{\partial}{\partial x_i} (P u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (2B u_i \varepsilon_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) (E_* - E) q_* \quad (18) \\ E &= c_v T + u^2 / 2, \quad E_* = c_v T_* + u_*^2 / 2, \quad \varepsilon_{ij} = 0,5 (u_{i,j} - u_{j,i}) \\ B &= \left(\tau + \frac{\tau_0}{A} \right) A^{\frac{n-1}{m}}, \quad A = \left[2(u_{i,i})^2 + (u_{i,j} + u_{j,i})^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

где c_v – теплоемкость среды при постоянном объеме; T и T_* – температуры текучих сред и источников (стоков); λ – коэффициент теплопроводности.

Из системы уравнений (18) при отсутствии внешних источников (стоков) массы можно получить известные уравнения движения неньютоновских вязкопластичных несжимаемых сред установленные А.Х. Мирзаджанзаде, З.П. Шульманом и др.

3. МОДЕЛЬ ВЯЗКИХ СРЕД

В ряде случаев для математического описания дисперсных систем (суспензии, растворов, светлых нефтепродуктов) может быть эффективно применена модель квазигомогенной среды. При этом дисперсионная смесь рассматривается как однородная среда с некоторой эффективной сдвиговой вязкостью η . В случае малой концентрации взвешенных частиц φ в потоках среды, эффективная сдвиговая вязкость η , может быть определен по формуле Эйнштейна [2] $\eta = \eta_0 (1 + 2,5\varphi)$, где η_0 - сдвиговая вязкость несущей среды. Течение такой среды качественно совпадает с течением гомогенных сред, у которых компоненты тензора напряжения связаны с компонентами тензора скоростей деформации линейно по известному закону, называемому обобщенным законом Ньютона. Для вязкой несжимаемой среды, можно написать следующие выражения:

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} -p + 2\eta \frac{\partial U_i}{\partial x_i}, & \text{при } i = j \\ \eta \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right), & \text{при } i \neq j \end{cases} \quad (19)$$

$$e = cT, \quad e_* = cT_*, \quad q^* = -\lambda \nabla T. \quad (20)$$

Здесь c – коэффициент теплоемкости (в несжимаемой вязкой среде $c_v = c$); T, T_* – температуры основной и присоединяемой (или отсоединяемой) массы среды; λ – коэффициент теплопроводности.

Подставляя выражения (19) и (20) в систему уравнений (10)-(12) и учитывая, что для несжимаемой среды ρ, η, c, λ – величины постоянные, можем написать [5]:

$$\begin{aligned} \nabla \bar{u} &= q; \\ \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} &= \bar{F} - \frac{1}{\rho} \text{grad } P + \nu \nabla^2 \bar{u} + (\bar{u}_* - u_*) q; \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) T &= a \nabla^2 T + \frac{2\nu}{c} \varepsilon_{ij}^2 + [(T_* - T) + k] q; \end{aligned} \quad (21)$$

где $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$; $k = \frac{1}{2c} [(\bar{u}_* - \bar{u})^2 - 2p]$; ν – коэффициент кинематической вязкости, $\nu = \eta / \rho$; a – коэффициент, $\bar{a} = \lambda / \rho c$; $q = q_* / \rho$. В (21) последнее уравнение есть уравнение внутренней (тепловой) энергии.

Система (21) является основным уравнением гидромеханики вязкой несжимаемой среды с переменной массой. Из них, при отсутствии внешних источников (или стоков) массы $q = 0$, импульса $(\bar{u}_* - \bar{u}) q = 0$ и энергии $[(T_* - T) + k] q = 0$, как частный случай из них можно получить [6] известные уравнения движения Навье-Стокса:

$$\nabla \bar{u} = 0, \quad \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} = \bar{F} - \frac{1}{\rho} \text{grad } P + \nu \nabla^2 \bar{u} \quad (22)$$

и уравнение теплопроводности в вязкой несжимаемой среде:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) T = a \nabla^2 T + \frac{2\nu}{c} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)^2 \quad (23)$$

Анализ систем уравнений движения вязкой несжимаемой среды с переменной массой (21) показывает, что они образуют систему пяти уравнений для отыскания $\bar{u}(u_x, u_y, u_z)$, P и T (остальные величины, т.е. $q, \nu, a, c, T_*, u_*, F$ входящие в систему уравнений (21) являются заданными).

Таким образом, дифференциальные уравнения движения, выведенные на основе общих законов сохранения, устанавливают связь между временным и пространственным изменениями скорости, давления, температуры в любой точке среды, в которой происходит процесс переноса вещества. Их изучение дает возможность построить теорию ряда физических явлений и решать множество инженерно-физических задач. Эти уравнения имеют бесчисленное множество

частных решений. При решении конкретной задачи необходимо из всех этих решений выбрать то, которое удовлетворяет некоторым дополнительным условиям, вытекающим из его физического смысла. Такими дополнительными условиями чаще всего являются так называемые начальные и граничные условия. Начальные условия задаются только при изучении нестационарных процессов и заключается в том, что для некоторого момента времени $t = t_0$ (обычно полагают $t = 0$) должно быть известна функция, например $u|_{t=0} = u(x, y, z)$, $P|_{t=0} = P(x, y, z)$ и $T|_{t=0} = T(x, y, z)$ пространственных координат. Наряду с начальными условиями, необходимо поставить и граничные условия. При условии переноса вязкой среды с источником или стоком массы (т.е. при наличии вдува или отсоса вещества через стенку) граничные условия на проницаемых поверхностях отличаются от соответствующих условий на непроницаемой стенке. В этом случае нормальная составляющая скорости на поверхности не равна нулю и определяются по заданному массовому расходу через стенку $(\rho u_n)_\omega = f(s, t)$, где $f(s, t)$ – заданная функция, характеризующая массовую скорость вдува или отсоса вещества через стенку, индекс ω относится к параметрам на стенке. Условия скольжения (т.е. касательная составляющая скорости) на стенке:

$$(u_\tau)_\omega = \left(\lambda_* \frac{\partial u_\tau}{\partial n} \right)_\omega, \quad (24)$$

где коэффициент λ_* пропорционален проницаемости материала стенки или характерному размеру пор. Последнее выражение имеет такой же вид, как и условие скольжения на стенке в теории разреженного газа, где величина λ_* означает длину свободного пробега молекул. При $\lambda_* \rightarrow 0$ выражение (24) переходит в обычное условия прилипания для касательной составляющей скорости. В некоторых условиях можно принимать $(U_\tau)_\omega = U_*$, где U_* – динамическая скорость.

В качестве теплового граничного условия могут быть задана температура стенки (граничное условие первого рода), тепловой поток через стенку (граничное условие второго рода), плотность теплового потока за счет теплопроводности (граничное условие третьего рода) и теплообмен поверхности тела с окружающей средой (граничное условие четвертого рода). Кроме рассмотренных граничных условий встречаются и другие граничные условия, с которыми приходится иметь дело при рассмотрении различных задач.

Таким образом, математическая задача, имеющая своей целью описать действительность, должна удовлетворять следующим основным требованиям: 1) решение должно существовать, 2) решение должно быть единственным и 3) решение должно быть устойчивым. Это значит, что малые изменения любого из поставленной задачи должны вызывать соответственно малые изменения решения.

Задача, удовлетворяющая всем трем требованиям, называется корректно поставленной задачей. Решить краевую задачу – значит найти все функции, удовлетворяющие данному дифференциальному уравнению и данным краевым условиям. Для различных частных случаев доказательства теорем существования и единственности для краевых задач на примере переноса теплоты

(теплопроводности) имеются. Однако в самом общем виде доказательств этих теорем пока нет. Поскольку при решении различных теплофизических задач существование решения вытекает из самой постановки задачи, то можно предполагать существование решения и его единственность доказанным для изучаемых краевых задач.

Разрабатывая математическую модель процесса, происходящего в макроскопической среде, после постановки краевых условий необходимо перейти к математическому исследованию процесса. Для этого необходимо получить решение краевой задачи - точное или приближенное.

При точном решении краевых задач движения среды встречаются большие математические трудности. Точное решение удается получить при упрощенной постановке задачи для наиболее несложных моделей среды. На практике приходится иметь дело с течением среды в области сложной геометрии, с неравномерным распределением скорости, давления и температуры. Все это приводит к необходимости применения численных методов и решения задач на современных ЭВМ, выполняющих достаточно больших (свыше сотни тысяч) операций в секунду.

Анализируя последовательность численных решений методом конечных разностей, можно отметить следующие этапы. Область непрерывного изменения аргументов заменяется конечным множеством точек (узлов), называемый сеткой. Вместо функции непрерывного аргумента рассматривается функция дискретного аргумента, определенная в узлах сетки и называемая сеточной функцией.

Производные, входящие в дифференциальный оператор, аппроксимируются разностными отношениями, дифференциальные уравнения при этом заменяются системой алгебраических уравнений (разностным уравнением). Краевые условия также заменяются разностными краевыми условиями для сеточной функции.

После осуществления такой процедуры приходим к алгебраической системе уравнений. Тем самым задача о численном решении исходного дифференциального уравнения сводится к задаче о нахождении решения полученной алгебраической системы.

Несмотря на большие разнообразия методов конечных разностей, наиболее эффективным для приложений является, по мнению авторов, метод однородной разностной схемы [7], устойчивые на любых доступных сетках и пригодны при одних и тех же вычислительных алгоритмах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из балансовых уравнений массы, импульса и энергии получены уравнения гидромеханики вязких и вязкопластичных сред с внешним источником (или стоком) массы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дейч М.Е., Зарянкин А.Е. Гидрогазодинамика. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 384 с.
2. Мирзаджанзаде А.Х. и др. Гидравлика в бурении и цементовании нефтяных и газовых скважин. – М.: Недра, 1977. – 230 с.
3. Огибалов П.М., Мирзаджанзаде А.Х. Нестационарные движения вязкопластичных сред. – М.: МГУ, 1977. – 373 с.

4. *Шульман З.П.* Конвективный теплоперенос реологически сложных жидкостей. – М.: Энергия, 1975. – 352 с.
5. *Исмайлова Ш.Г., Гаджиева Г.Ф., Гахраманов П.Ф., Исмаилов Р.Ш.* Основные уравнения гидромеханики сплошных гетерогенных сред с переменной массой / IV-й Всерос. симпозиум «Механика композиционных материалов и конструкций». – М.: ИПРИМ РАН, 2012. – Т.1. – С.165-173.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Гидродинамика. – М.: Наука, 1986. – 736 с.
7. *Гахраманов П.Ф.* Конечно-разностные схемы. – Баку, 2004. – 225 с.

АНАЛИЗ ПРОЦЕССА КОАГУЛЯЦИИ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ В ОМАГНИЧЕННОМ ВОДНОМ ПОТОКЕ

Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Рассмотрен процесс коагуляции коллоидных частиц в омагниченном водном потоке, пересыщенном солями жесткости. Показано, что при постоянстве термодинамических условий процесс коагуляции критических зародышей сопровождается гомогенной генерацией новых критических зародышей для поддержания их равновесной концентрации. С учетом этого уточнена формула Смолуховского для оценки изменения концентрации зародышей различного порядка в ходе коагуляции. Определено количественное влияние предлагаемого уточнения на конечный результат в условиях известного натурального эксперимента.

1. ВВЕДЕНИЕ

Обсуждение вопросов, связанных с эффективностью магнитной обработки воды (МОВ) до сих пор не потеряло своей актуальности. Это объясняется тем, что годовой ущерб, причиняемый накипью, составляет в общемировых масштабах многие миллиарды долларов. Как известно, например, в теплоэнергетике каждый миллиметр осадка на стенке нагревательного котла снижает мощность нагрева на 5%. Поэтому внимание к способности магнитного поля снижать накипь в различных энергоустановках появилось в 1945 году, когда бельгийский инженер Вернмейрен оформил патент на свою установку. С тех пор началось активное применение магнитных полей для обработки жидкостей не только в теплоэнергетике, но и в самых различных областях.

Однако долгое время наука не могла понять причины проявления этих эффектов, поскольку вода, казалось бы, не обладает магнитными свойствами. В 70-х годах прошлого века в СССР была сделана попытка широкого промышленного внедрения МОВ, однако результат был нестабилен и достойного распространения методы МОВ не получили. Надо признать объективную закономерность такого результата, поскольку в то время не были достаточно востребованы либо не развиты необходимые фундаментальные основы – коллоидная химия, нанотехнологии. Вместе с тем в мире промышленный интерес к устройствам МОВ существует, что подтверждается, например, патентной базой США [1], предоставляющей около 200 патентов по запросу «magnetic water treatment».

2. РОЛЬ ТЕОРИИ ДЛФО ПРИ АНАЛИЗЕ ЭФФЕКТА МОВ

Начало фундаментальным исследованиям в данной области положено в 1938-1941 гг. в трудах Б.В. Дерягина и Л.Д. Ландау. Эти идеи были развиты в опубликованной в Амстердаме монографии Фервея и Овербека (1948 г.), где была представлена теория стабильности лиофобных коллоидов, называемая ДЛФО по именам авторов. Согласно теории ДЛФО [2,3] в воде коллоидные

частицы, в целом нейтральные, несут на себе электрические заряды - окружены двойным электрическим слоем (ДЭС).

На рис.1 показано, что центральное ядро 1 коллоидной частицы окружено плотным слоем 2 положительных зарядов, слоем Штерна. Электрическое поле слоя Штерна удерживает вокруг коллоидной частицы компенсирующий слой отрицательных зарядов, «противоионов» – диффузный слой 3. Эти противоионы взвешены в воде, притянуться к слою Штерна им мешает энергия теплового движения kT и окружающие ядро частицы молекулы-диполи воды.

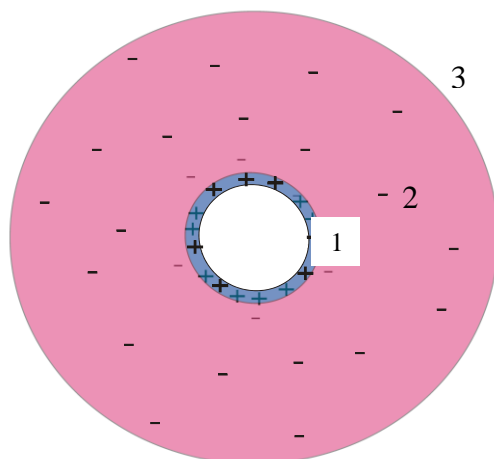


Рис.1. Строение коллоидной частицы.

Суммарная энергия взаимодействия коллоидных частиц с двойным электрическим слоем (ДЭС) определяется суперпозицией энергий лондоновского притяжения и кулоновского отталкивания. Иными словами, коллоидные частицы в растворе взаимодействуют друг с другом, причем силы кулоновского отталкивания зарядами диффузного слоя преобладают над силами молекулярного притяжения, чем обеспечивается устойчивость коллоидного раствора.

Показательно, что только спустя полвека в работах Гамаюнова [4,5] была впервые установлена связь эффекта МОВ с теорией ДЛФО. Была рассчитана величина деформации двойного электрического слоя коллоидных частиц магнитным полем, которая дает начало их коагуляции в пересыщенном водном растворе.

Работы [6,7] также подтверждают, что при уменьшении толщины ДЭС кулоновское отталкивание «побеждает» силами молекулярного притяжения и коллоидный раствор теряет стабильность – в нем начинается коагуляция. Как показано на рис.2, магнитное поле сжимает заряженную оболочку вокруг коллоидных частиц за счет сил Лоренца.

Для проведения численных оценок мы обратились к эксперименту [8], проведенному коллективом польских ученых на крупномасштабной ТЭЦ в 1985-1990гг, где был зафиксирован выигрыш в снижении накипи в 30 раз. Таким образом, в дальнейшем численные оценки будут проводиться при условиях упомянутого эксперимента, где магнитный аппарат представлял собой стальную цилиндрическую трубу с коаксиально вмонтированными в нее встречно ориентированными цилиндрическими магнитами. Будем считать, что критическими зародышами являются частицы $CaCO_3$ с потенциалообразующими ионами Ca^{2+} и $CaHCO_3^+$ и противоионами HCO_3^- [7].

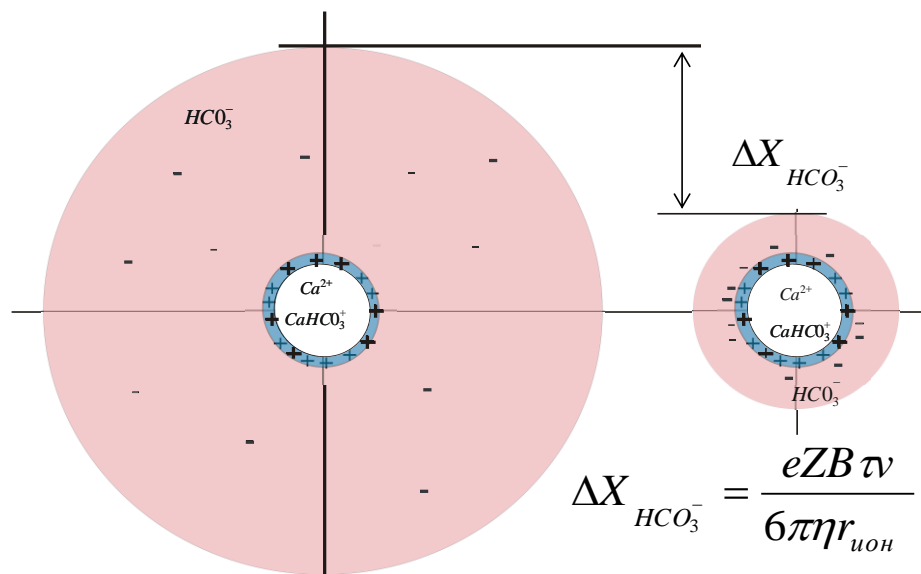


Рис.2. Уменьшение толщины двойного электрического слоя коллоидной частицы в магнитном поле. e – элементарный заряд, Z – степень ионизации гидрокарбоната HCO_3^- , η – динамическая вязкость воды при температуре T , τ – время нахождения воды в магнитном поле, B и v – магнитная индукция и скорость воды внутри магнитного аппарата, соответственно, $r_{ион}$ – ионный радиус гидратированного иона HCO_3^- .

Для анализируемого нами эксперимента: $Z=1$, $\eta=10^{-3}$ кг/(м·с), $T=300$ К, $\tau=0.1$ с, $Bv\tau \approx 0,25 \frac{В \cdot с}{м}$, $r_{ион}=0.4$ нм [9].

3. АНАЛИЗ ПРОЦЕССА КОАГУЛЯЦИИ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ В ОМАГНИЧЕННОМ ВОДНОМ ПОТОКЕ

В работах [6,10,11] была представлена модель МОВ, согласно которой цепочка физических эффектов, приводящих к снижению накипи, начинается именно с деформации ДЭС, рассчитанной в теории Гамаюнова. Для выявления значимости предлагаемых уточнений (а именно, теории Смолуховского) подробнее остановимся на рассмотрении процесса коагуляции коллоидных частиц в водном потоке после его омагничивания. Опишем интенсивность процесса коагуляции для получения количественных оценок с последующим анализом их адекватности.

Как известно, в растворе, пересыщенном солями жесткости, имеются коллоидные частицы критического радиуса с равновесной концентрацией n_0 и система находится в динамическом равновесии. [12]. Частицы меньшего размера быстро растворяются, а большего – имеют меньшую вероятность гомогенной нуклеации, к тому же, быстро укрупняясь, выпадают в осадок. Равновесная концентрация n_0 однозначно определяется термодинамическими характеристиками раствора (температурой, пересыщением). Напомним, что порядком коагуляции k называется количество критических зародышей, объединенных в одну частицу. В ходе коагуляции на каждом последующем ее этапе к частице добавляется очередной критический зародыш. Размеры частиц

при $k > 1$ больше критического, и на их поверхности начинают кристаллизоваться растворенные молекулы солей жесткости. При этом поток солей жесткости переключается на поверхность взвешенных частиц, что, в конечном итоге, приводит к уменьшению накипи на стенках. Для количественной оценки накипеобразования, очевидно, необходимо знать распределение взвешенных в водном потоке частиц по размерам.

Теория быстрой коагуляции Смолуховского предлагает следующее выражение для расчета изменения во времени концентрации первичных, вторичных и т.д. коллоидных частиц $n_k(t)$ [3]:

$$n_k(t) = \frac{n_0 \cdot \left(\frac{t}{\tau}\right)^{k-1}}{\left(1 + \frac{t}{\tau}\right)^{k+1}}, \quad k=1, 2, 3 \dots, \quad (1)$$

где n_0 – начальная концентрация частиц, а т.н. время коагуляции определяется формулой:

$$\tau = \frac{3\eta W}{4k_B T n_0}, \quad (2)$$

где W – коэффициент замедления, величина обратная вероятности коагуляции при столкновениях частиц.

Зависимость (1) предполагает, что концентрация первичных частиц непрерывно уменьшается вследствие их коагуляции. Однако при рассмотрении кинетики фазовых переходов в [12] полагали, что раствор в стабильных термодинамических условиях должен поддерживать равновесную концентрацию критических зародышей. Убыль их количества в ходе коагуляции неизбежно должна сопровождаться восполнением их концентрации до равновесного значения за счет гомогенной нуклеации новых частиц в объеме пересыщенного раствора. Эта поправка необходима для реального отображения процесса, т.к. появление новых зародышей увеличивает поверхность взвеси и также вносит вклад в противонакипный эффект.

Уточненная формула для расчета изменения концентрации коллоидных частиц $n_k(t)$ учитывает восполнение концентрации первичных (критических) зародышей и имеет следующий вид [6]:

$$n_k(t) = n_0 \cdot \left(\frac{t}{\tau + t}\right)^{k-1} \quad k=1,2,3,\dots, \quad (3)$$

где $n_1(t) = n_0 = const$.

При сопоставлении выражений (1) и (2) получим поправочный коэффициент:

$$K_1 = \left(1 + \frac{t}{\tau}\right)^2, \quad (4)$$

который учитывает увеличение концентрации критических зародышей в пересыщенном коллоидном растворе после МОВ и утраты им устойчивости.

Для количественной оценки концентрации зародышей построим зависимость $\tau(W)$ на рис.3.

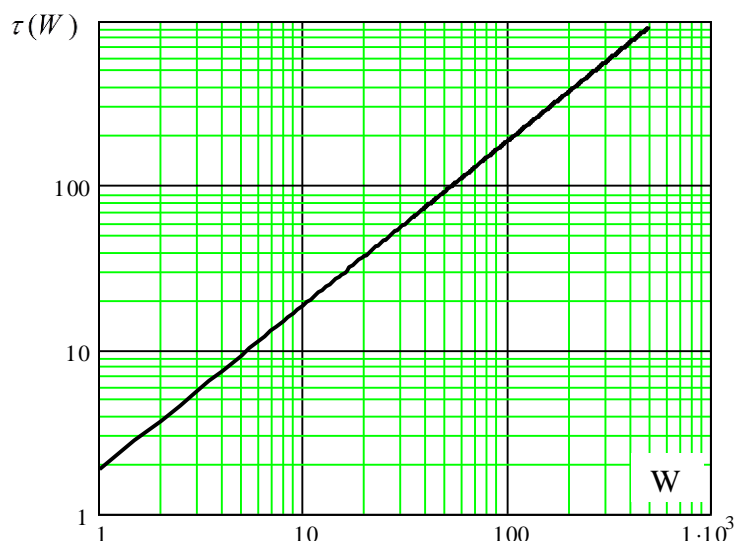


Рис.3. График зависимости (2) времени коагуляции от коэффициента замедления $\tau(W)$.

На рис.4 приведен график зависимости поправочного коэффициента от времени коагуляции $K_1(\tau)$, согласно выражению (4).

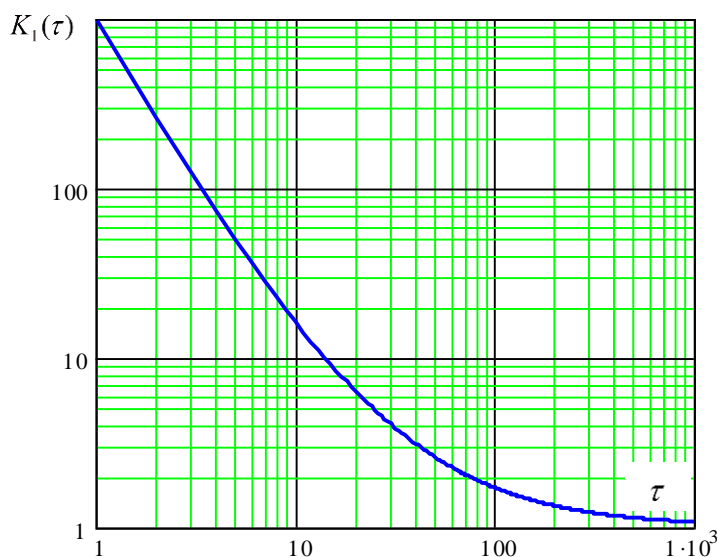


Рис.4. График зависимости (4) поправочного коэффициента от времени коагуляции $K_1(\tau)$.

Было учтено, что время прохождения водного потока по трубе эксперименте [8] составляет 30с. Также принято значение концентрации $n_0=10^{17}$. При вероятности коагуляции 0.1-0.01, что соответствует значениям W в диапазоне (10 ... 100), время коагуляции лежит в диапазоне (10 ... 100)с. Из графика рис.4 следует, что поправочный коэффициент имеет величину $K_1=2-20$. Отсюда следует вывод, что учет гомогенной генерации в ходе столкновения коллоидных частиц в пересыщенном растворе может вносить существенные отклонения в оценки коагуляции по теории Смолуховского. Таким образом, предложенная поправка является необходимым и существенным уточнением теории Смолуховского.

Кроме того, следует учесть, что вновь рожденные критические зародыши не успевают сформировать двойной электрический слой и для них коэффициент замедления $W=1$. Из графиков рис.3,4 видно, что для таких частиц поправочный коэффициент $K_1(\tau) \gg 1$, что говорит о возрастании значения указанной поправки с течением времени, по мере накопления вновь сформированных зародышей в ходе их гомогенной генерации в пересыщенном водном потоке при его омагничивании.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С учетом постоянства термодинамических условий в процессе коагуляции критических зародышей определено влияние гомогенной генерацией новых критических зародышей на концентрацию коллоидных частиц различного размера. Предложена уточненная формула для оценки изменения концентрации зародышей различного порядка в ходе коагуляции. Определено количественное влияние предлагаемого уточнения на конечный результат в условиях известного натурного эксперимента. Отмечено, что наибольшее влияние предлагаемой поправки распространяется на вновь рожденные критические зародыши, для которых значение поправочного коэффициента может достигать нескольких сотен.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сайт Базы данных патентного ведомства США: <http://uspto.gov>.
2. Дерягин Б.В., Чураев Н.В., Муллер В.М. Поверхностные силы. – М.: Наука, 1985. – 398 с.
3. Наука о коллоидах. Т.1. Необратимые процессы. / Под ред. Кройта. Г.Р. – М.: Иностранная литература, 1955. – 538 с.
4. Гамаюнов Н.И. Коагуляция суспензий после магнитной обработки//Журнал прикладной химии. 1983. Т.56. №5. С.1038-1047.
5. Гамаюнов Н.И. Воздействие постоянного магнитного поля на движущиеся растворы и суспензии// Коллоидный журнал. 1994. Т.56. №2. С.290-298.
6. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. Влияние коагуляции коллоидных частиц на снижение накипеобразования при магнитной обработке воды в теплоэнергетических устройствах// Теплоэнергетика. 2011. №7. С.13-16.
7. Kozic V., Lipus L.C. Magnetic water treatment for a less tenacious scale // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 2003. V.43. P. 1815-1819.
8. Szkatula A, Balanda M., Kopes M. Magnetic treatment of industrial water. Silica activation // The Europ. Phys. J. – Appl. Phys. 2002. V.18. P. 41-49.
9. Dean J.A. Lange's Handbook of Chemistry. McGraw-Hill, Inc. 1999.
10. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. Механизм снижения накипи при магнитной обработке воды в теплоэнергетических устройствах // Теплоэнергетика. 2013. №3. С.74-77.
11. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. Модель процесса осаждения накипи в теплоэнергетических установках с магнитной обработкой воды. Сб. трудов IV Всероссийского симпозиума "Механика композиционных материалов и конструкций", 4 - 6 декабря 2012г, М.: ИПРИМ РАН, 2012г. Т.1. С.174-181.
12. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика (Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.10). – М.: Наука, 1979. – 528 с.

КОАГУЛЯЦИЯ НАНОЧАСТИЦ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Кошоридзе С.И., Левин Ю.К.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Для наноразмерных коллоидных частиц впервые теоретически исследован эффект снижения их электрокинетического потенциала после прохождения раствора через статическое магнитное поле. Полученные результаты имеют прикладное значение, повышая точность количественной оценки интенсивности коагуляции в объеме коллоидного раствора, приводящей, в конечном итоге, к уменьшению накипи на стенках теплообменных труб.

Для борьбы с накипеобразованием в технике используют обработку водного потока магнитным полем, что просто реализуется и экономично в эксплуатации. Однако до сих пор нет общепринятой физической теории, достаточно полно объясняющей механизм наблюдаемого явления.

В ряде работ [1-5] была развита теория, согласно которой статическое магнитное поле может вызвать потерю устойчивости коллоидного раствора и способствовать коагуляции коллоидных частиц. Данная теория авторами была применена для объяснения эффекта снижения накипи в теплоэнергетических устройствах [6,7]. Суть теории в том, что, в роли коллоидных частиц выступают зародышевые кристаллы $CaCO_3$ критических размеров – порядка нанометров [6]. Такие кристаллы с равной вероятностью могут исчезнуть или продолжать расти. Однако после магнитной обработки воды начинается их коагуляция: они укрупняются, становятся “надкритическими” и продолжают расти за пределами магнитного аппарата за счет осаждения на них молекул накипеобразователя $CaCO_3$. Таким образом, эффект магнитной обработки воды объясняется как результат переориентации потока накипеобразователя со стенок на дисперсные частицы (эти последние выводятся из потока путем седиментации), в результате чего масса накипи на стенки труб уменьшается. Таким образом, снижение накипи в результате магнитной обработки зависит от интенсивности стимулированной ею коагуляции в объеме водного потока.

Согласно теории ДЛФО интенсивность коагуляции зависит от уменьшения электрокинетического потенциала коллоидных частиц [8], а также от времени прохождения воды через трубу. В работах [1-5] рассматривались коллоидные частицы микронных размеров, при этом зона влияния двойного электрического слоя (ДЭС), определяемая длиной Дебая, имела размеры порядка нескольких нанометров. В этих условиях имелась возможность упрощенного анализа – в приближении теории плоского ДЭС на границе слоя Штерна и диффузного слоя коллоидной частицы. Там же были получены формулы, связывающие изменение электрокинетического потенциала с параметром магнитного аппарата $Bv\tau$ (B – индукция магнитного поля, v – скорость течения воды, τ – время нахождения воды в магнитном поле). Однако при рассмотрении наноразмерных коллоидных частиц [6,7], со сферической симметрией электростатического поля приближение однородного поля может оказаться неприемлемым.

Целью настоящей работы является уточнение электрокинетического потенциала и вероятности коагуляции [1-5] для наноразмерных частиц, поведение которых рассматривается при количественном расчете уменьшения накипи в теплоэнергетических установках [6,7].

Рассмотрим коллоидную частицу $CaCO_3$ радиуса a с положительным зарядом. На рис.1 показаны потенциалообразующие, или коионы Ca^{2+} , $CaHCO_3^+$ и противоионы HCO_3^- [5]. Обозначим через σ_d плотность поверхностного заряда на границе штерновского и диффузионного слоев этой частицы.

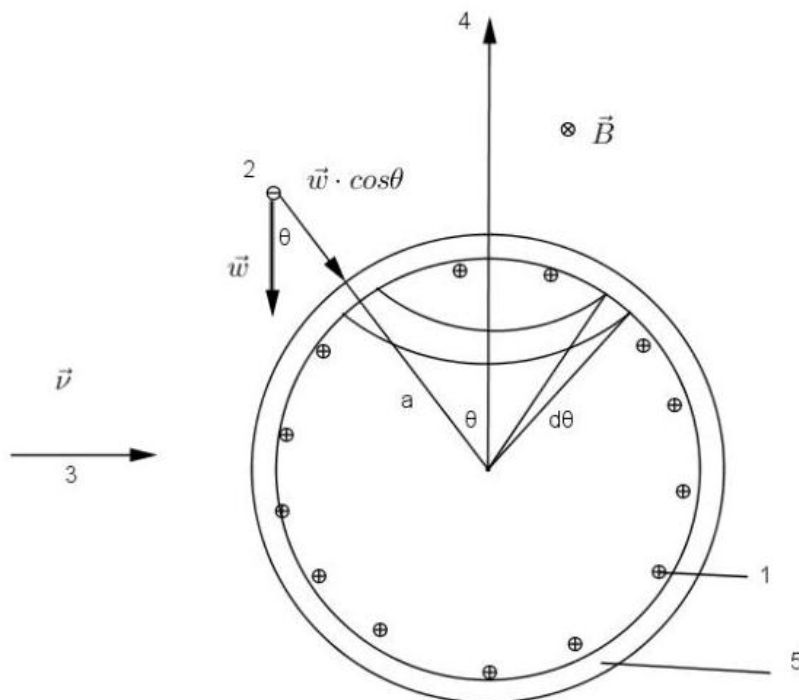


Рис.1. Схема захвата положительной коллоидной частицей $CaCO_3$ отрицательных противоионов под действием силы Лоренца в водном потоке внутри магнитного аппарата. Обозначения: 1 – потенциалообразующие ионы Ca^{2+} , $CaHCO_3^+$; 2 – противоионы HCO_3^- ; 3 – скорость воды; 4 – полярная ось; 5 – слой Штерна.

Магнитное поле перпендикулярно течению воды в трубе. Под действием силы Лоренца противоионы, несущие заряд $|zF|$ (в расчете на моль), перемещаются к верхней полусфере коллоидной частицы с дрейфовой скоростью $w = \lambda v B$ под углом θ к ее радиусу ($0 \leq \theta \leq \pi/2$), где z – степень ионизации противоиона, F – число Фарадея. Подвижность λ противоионов связана с коэффициентом диффузии D формулой Эйнштейна:

$$D = \frac{RT\lambda}{zF}, \quad (1)$$

где R – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура. Мольная концентрация противоионов на границе штерновского и диффузионного слоев вычисляется по формуле Больцмана:

$$c_d = c \cdot \exp\left(\frac{Fz\psi_d}{RT}\right), \quad (2)$$

где c – мольная концентрация противоионов вдали от коллоидной частицы, ψ_d – электростатический потенциал на границе штерновского и диффузионного слоев, который почти во всех теоретических работах приравнивается к электрокинетическому потенциалу коллоидной частицы. Далее обозначим через β отношение числа адсорбированных противоионов к общему числу, переместившихся в слой Штерна. Для применяемых на практике магнитных полей значение β не зависит от времени.

Сферический пояс, изображенный на рис.1, имеет площадь:

$$dS = 2\pi a^2 \sin \theta \cdot d\theta.$$

Плотность тока противоионов на этот элемент поверхности равна:

$$J = \beta \lambda F z c_d v B \cdot \cos \theta.$$

Отрицательный заряд, поступающий в штерновский слой верхней половины коллоидной частицы за единицу времени равен по модулю:

$$\int J \cdot dS = 2\pi a^2 \cdot \beta \lambda F c_d z v B \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cdot \cos \theta \cdot d\theta = \pi a^2 \cdot \beta \lambda F c_d z v B. \quad (3)$$

Этот поток противоионов вызывает уменьшение положительного заряда на границе штерновского и диффузионного слоев. В расчетах ниже пренебрежем толщиной штерновского слоя по сравнению с размером коллоидных частиц. Из-за хаотического вращения частицы можно считать, что с течением времени натекающий заряд равномерно распределяется по всей сфере, по полной площади которой осуществлено усреднение плотности заряда. В итоге получим кинетическое уравнение:

$$\frac{d\sigma_d(t)}{dt} = -0.25 \beta \lambda F z c \cdot \exp\left(\frac{F z \psi_d(t)}{RT}\right) v B, \quad (4)$$

связывающее скорость убыли удельного поверхностного заряда в слое Штерна с электрокинетическим потенциалом. Время t изменяется на отрезке $[0, \tau]$.

Как уже отмечалось, в работах [3,4] анализ для частиц микронного размера проводился в приближении плоской поверхности частиц (для плоского ДЭС и, соответственно, для однородного электрического поля) и в предположении простой связи между поверхностной плотностью заряда и электрокинетическим потенциалом [3,4]:

$$\sigma_d = 2\sqrt{2\varepsilon_0 \varepsilon RT c} \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{F z \psi_d}{2RT}\right), \quad (5)$$

где ε_0 – электрическая постоянная, а ε – относительная диэлектрическая проницаемость воды. После подстановки (5) в (4) и интегрирования получается аналитическое соотношение, позволяющее, рассчитать изменение электрокинетического потенциала от времени нахождения t в магнитном аппарате:

$$\operatorname{sh}\left(\frac{F z \psi_d(t)}{2RT}\right) - \operatorname{ch}\left(\frac{F z \psi_d(t)}{2RT}\right) - \operatorname{sh}\left(\frac{F z \psi_d}{2RT}\right) + \operatorname{ch}\left(\frac{F z \psi_d}{2RT}\right) = -\frac{1}{10.65} \chi \beta \lambda B v t. \quad (6)$$

Здесь $\chi = \sqrt{\frac{2F^2 z^2 c}{\varepsilon_0 \varepsilon RT}}$ – обратная длина Дебая, ψ_d – начальное значение потенциала,

$\psi_d(t)$ – ее значение после нахождения в магнитном поле в течение времени t .

Формула, похожая на (6), впервые была получена в [2], однако она не была

усреднена по полярному углу θ . Как уже отмечалось, для наноразмерных частиц необходим учет неоднородности электрического поля и формула (6) неприменима. Поэтому для нахождения связи между σ_d и ψ_d нужно задачу решать для сферически симметричного распределения электростатического потенциала в диффузионном слое (для простоты расчетов ниже будем считать валентности ко- и противоионов равными. Это допущение упрощает расчеты и согласно [8-9] не вносит существенных погрешностей в результаты). Соответствующее уравнение имеет вид:

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \cdot \frac{d}{dr} \psi(r) \right) = \frac{2czF}{\varepsilon_0 \varepsilon} \operatorname{sh} \left(\frac{zF\psi(r)}{RT} \right) \quad (7)$$

с граничными условиями:

$$\psi(a) = \psi_d; \quad \psi(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{d\psi}{dr} \Big|_{r \rightarrow \infty} = 0. \quad (8)$$

Задача (7)-(8) решалась численно: для каждого значения ψ_d находилась плотность поверхностного заряда на границе слоя Штерна:

$$\sigma_d = -\varepsilon_0 \varepsilon \cdot \frac{d\psi}{dr} \Big|_{r=a} \quad (9)$$

и строилась пошаговая зависимость:

$$\sigma_d = f(\psi_d), \quad (10)$$

которая затем аппроксимировалась полиномами. На рис.2 приводятся результаты численного решения системы (7)-(10).

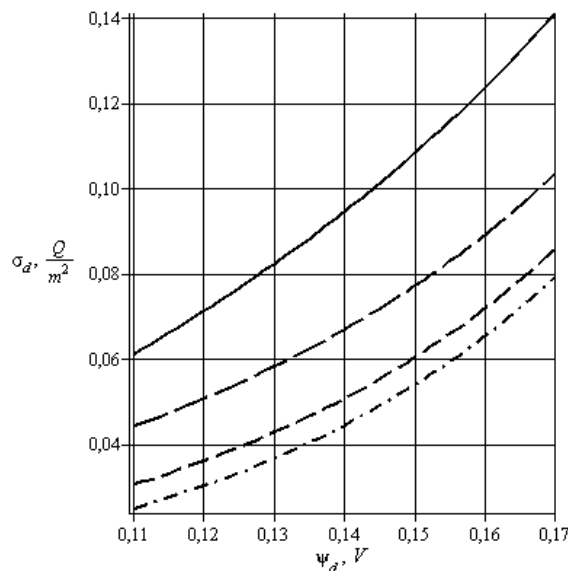


Рис.2. Зависимость поверхностной плотности заряда коллоидной частицы от ее электрокинетического потенциала $\sigma_d = f(\psi_d)$ при различных значениях эффективного радиуса a . Сплошная линия: $a = 1 \text{ нм}$, длинный штрих: $a = 3 \text{ нм}$, короткий штрих: $a = 10 \text{ нм}$, штрих-пунктир: $a = 100 \text{ нм}$.

В расчетах принималось: $c = 2.4 \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{М}^3}$; $z=1$; $T = 300 \text{ К}$; $\varepsilon = 81$.

Видно, что для больших размеров коллоидных частиц ($a \geq 100 \text{ нм}$) численный расчет и аналитическая формула (5) дают одинаковый результат, а при меньших радиусах приближение плоского ДЭС уже не справедливо.

Уравнение (4) можно переписать как нелинейное уравнение первого порядка:

$$\frac{d\sigma_d(t)}{d\psi_d(t)} \cdot \frac{d\psi_d(t)}{dt} = -0.25\beta\lambda Fz c \cdot \exp\left(\frac{Fz\psi_d(t)}{RT}\right) \nu B. \quad (11)$$

Численное решение (11) позволяет получить искомую зависимость электрокинетического потенциала $\psi_d(\tau) \equiv \psi_{d,m}$ в конце магнитной обработки в течение времени τ от первоначального его значения ψ_d (рис.3).

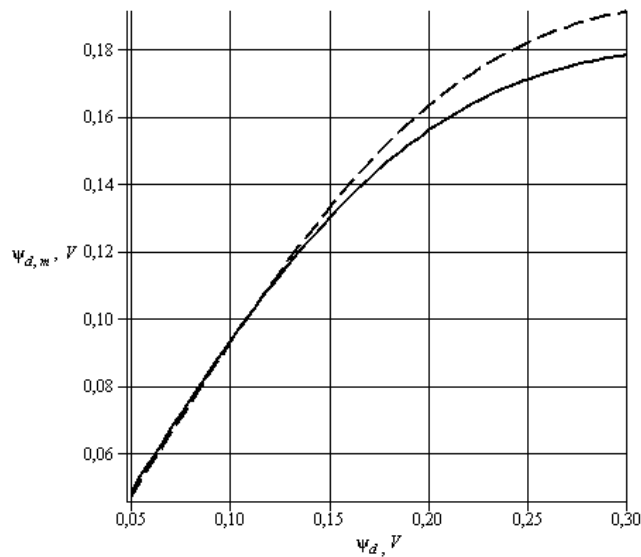


Рис.3. Зависимость электрокинетического потенциала коллоидной частицы $\psi_{d,m}$ после магнитной обработки в течение времени τ от первоначального его значения ψ_d . Расчетные параметры; $a = 3 \text{ нм}$; $B = 0.25 \text{ Тл}$; $\nu = 0.5 \frac{\text{М}}{\text{с}}$; $D = 10^{-6} \text{ м}^2 / \text{с}$; $\tau = 0.3 \text{ с}$; $\beta = 1$. Остальные параметры такие же, как на рис.2. Сплошная кривая – расчет по формулам (11) для сферически симметричного двойного слоя, штриховая – расчет по формуле (6) для плоского двойного слоя.

Рассчитав величину $\psi_{d,m}$, находим важный для теории коагуляции параметр – коэффициент замедления:

$$W = 2 \int_2^{\infty} \frac{\exp\left[\frac{E(s)}{k_B T}\right]}{s^2} ds, \quad (12)$$

где $E(s)$ – потенциальная энергия взаимодействия сферических коллоидных частиц [8], $s=L/a$, L – расстояние между их центрами, k_B – постоянная Больцмана. Время коагуляции прямо пропорционально величине W [9]. График зависимости коэффициента замедления W от исходного электрокинетического потенциала ψ_d .

приведен на рис.4, где сплошная кривая отображает функцию $W(\psi_d)$, а штриховая – сложную функцию $W(\psi_{d,m}(\psi_d))$.

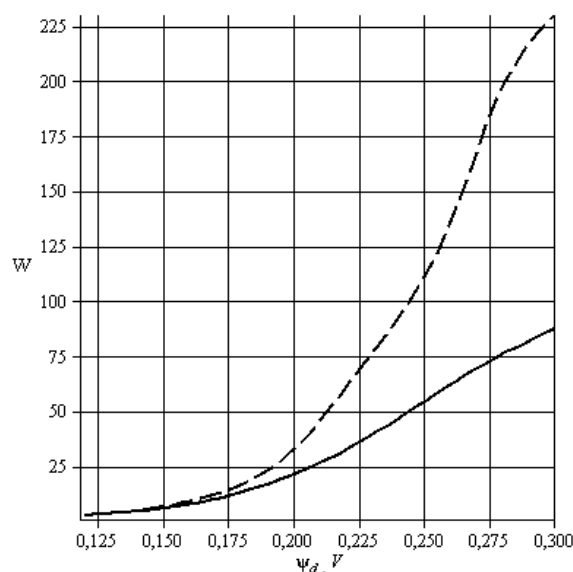


Рис.4. Зависимость значения коэффициента замедления W от исходного электрокинетического потенциала ψ_d после магнитной обработки. Сплошная линия – расчет по формуле (11), штрих – по формуле (6). Расчетные параметры те же, что и на рис.2,3.

Из графика рис.4, видно, что чем выше начальный электрокинетический потенциал частицы ψ_d , тем больше погрешность приближенного расчета по (6). Согласно рис.4 точный расчет дает для вероятности коагуляции $1/W$ более высокое значение, чем приближенный.

Полученные результаты позволят уточнить механизм магнитной обработки воды и приблизить к реальным значениям оценку противонакипной эффективности на его основе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гамаюнов Н.И. Коагуляция суспензий после магнитной обработки // Журнал прикладной химии. – 1983. – Т.56. – №5. – С.1038-1047.
2. Гамаюнов Н.И. Укрупнение частиц в водных потоках при воздействии скрещенных электрических и магнитных полей // Журнал прикладной химии.- 1984. – Т.57. – №9. – С.1963-1968.
3. Гамаюнов Н.И. Воздействие постоянного магнитного поля на движущиеся растворы и суспензии // Коллоидный журнал. – 1994. – Т.56. – №2. – С.290-298.
4. Lipus L.C., Kropе J., Crepinsek L. Dispersion destabilization in magnetic water treatment // J. Colloid and Interface Science. – 2001. – Vol.236. – P.60-66.
5. Kozic V., Lipus L.C. Magnetic water treatment for a less tenacious scale // J. of Chemical Information and Computer Sciences. – 2003. – Vol.43. – P.1815-1819.
6. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. Влияние коагуляции коллоидных частиц на снижение накипеобразования при магнитной обработке воды

- в теплоэнергетических устройствах // Теплоэнергетика. – 2011. – №7. – С.13-16.
7. Кошоридзе С.И., Левин Ю.К. Механизм снижения накипи при магнитной обработке воды в теплоэнергетических устройствах // Теплоэнергетика. – 2013. – №3. – С.74-77.
 8. Verwey E.J., Overbeek J.Th.G. Theory of the stability of lyophobic colloids. – Elsevier Inc., 1948. – 205 p.
 9. Наука о коллоидах. Т.1. Необратимые процессы. / Под ред. Кройта. Г.Р. – М.: Иностранная литература, 1955. – 538 с.

МИКРОСТРУКТУРА МИКРОПУЗЫРЬКОВОЙ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ СРЕДЫ

Левин Ю.К., Попов В.В.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

В работе экспериментально исследуется распределение микропузырей по размерам в водо-воздушной среде. Построена гистограмма распределения пузырей по интервалам их диаметра. На основе этой гистограммы моментным методом получено аналитическое выражение для функции плотности вероятности распределения микропузырей по диаметрам. Показано, что средний радиус пузырей среды равен 23 мкм.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование пузырьковых сред является важным и актуальным, т.к. они широко распространены в природе и активно используются в технике. При этом открывается широкий спектр научных проблем – от рассмотрения динамики отдельных пузырей с учетом их гидродинамического взаимодействия, до построения общей динамики пузырьковых сред в целом [1,2]. Одной из важных и часто возникающих на практике задач здесь до сих пор остается проблема повышения дисперсности газовой составляющей – переход к использованию высокодисперсных сред с микроскопическими размерами пузырей. Это обусловлено тем, что при уменьшении размеров пузырей возрастает удельная поверхность контакта газа с жидкостью и одновременно снижается скорость всплытия из-за действия выталкивающей силы Архимеда, т.е. время контакта фаз на единице высоты аппарата. В результате чего в такой высокодисперсной газожидкостной среде процессы тепло-массообмена будут протекать более интенсивно.

В 1990 г. в Секторе механики неоднородных сред при Президиуме АН СССР коллективом ученых под руководством академика В.В. Струминского был разработан новый метод создания высокодисперсных микропузырьковых газожидкостных сред [3]. Использование этого метода на практике позволило впервые получить газожидкостную пузырьковую среду с рекордно мелкими размерами газовых пузырей с диаметрами от единиц до десятков микрон. Экспериментальное исследование таких сред показало, что они обладают целым рядом уникальных гидрофизических свойств: они существенно стабильнее (в смысле расслоения жидкости и газа), чем все известные до них газожидкостные среды и обладают текучестью, аналогичной текучести обычных (т.е. однофазных) жидкостей; распространение звуковых и ударных волн в них сопровождается значительным поглощением; благодаря высокой удельной поверхности контакта газа с жидкостью и низкой скорости всплытия микропузырей, с их помощью можно эффективно растворять в жидкостях различные газы и газовые смеси; их коэффициент объемной вязкости имеет аномально высокое значение по сравнению с их сдвиговой вязкостью [более детально см.4-11].

Целью настоящей работы является экспериментальное измерение распределения пузырей по размерам в водо-воздушной микропузырьковой среде

при газосодержании $\varphi = V_2 / (V_1 + V_2) \approx 0.01 \div 0.02$, здесь и далее индексы 1 и 2 характеризуют жидкость и газ, соответственно.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Схема установки, на которой проводились эксперименты, представлена на рис.1, на котором: 1 – источник света, 2 – линза конденсора осветителя, 3 – прозрачная кювета с микропузырьковой средой, 4 – тонкая прозрачная пленка, 5 – измерительный микроскоп *Micros MC400* с веб камерой *SAM V200*.

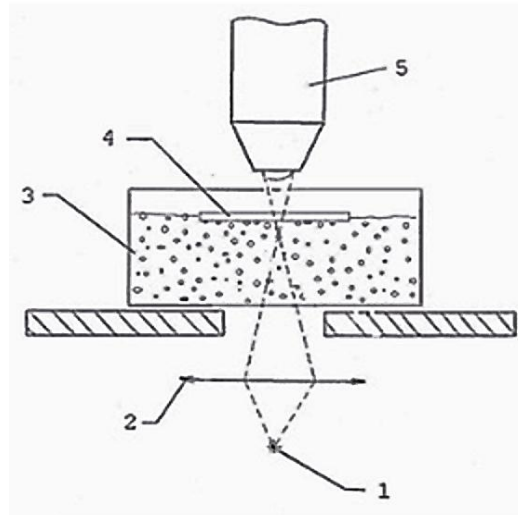


Рис.1. Схема эксперимента по фотографированию микропузырей.

3. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Эксперимент проводился следующим образом. Небольшая проба микропузырьковой среды отбиралась из рабочего объема установки, в которой она создавалась с помощью специального микродисперсора [4,5], и подавалась в кювету 3 непосредственно под прозрачную пленку 4. После того, как инжестрированные пузыри собирались под пленкой, проводилось их фотографирование через оптический микроскоп 5, оборудованный веб камерой *SAM V200*. Время, необходимое для всплытия всех пузырей пробы определялось экспериментально по серии фотографий, снимаемых через заданные промежутки времени и составляло от 30 до 60 секунд. Полученные таким образом снимки затем обрабатывались в программе *CorelDraw*, путем прямого измерения их диаметров в пикселях и, с учетом масштабного множителя, последующего перевода в размерные величины – в данном случае в микроны. Типичная фотография, полученная в одном из таких экспериментов, приведена на рис.2.

Обработка результатов этого эксперимента показала, что имеющееся в исследуемой водо-воздушной микропузырьковой среде распределение пузырей по размерам, хорошо описывается функцией плотности вероятностей вида $f(d) = Cd^a e^{-bd}$. Неизвестные параметры распределения C , a и b определялись из условий равенства первых двух начальных моментов гистограммы

и аппроксимирующей ее функции $f(d)$: $m_1 = \int_0^{\infty} \xi f(\xi) d\xi = 46$,
 $m_2 = \int_0^{\infty} \xi^2 f(\xi) d\xi = 2488$, с использованием нормировки $\int_0^{\infty} f(\xi) d\xi = 1$.

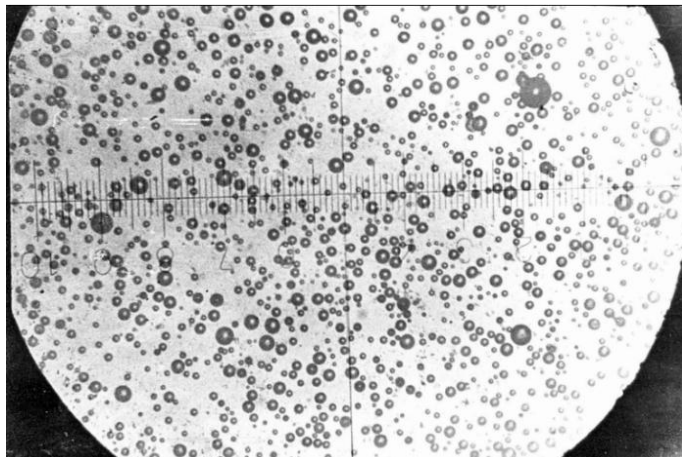


Рис.2. Микрофотография воздушных микропузырей в воде, одно мелкое деление шкалы составляет 36 мкм.

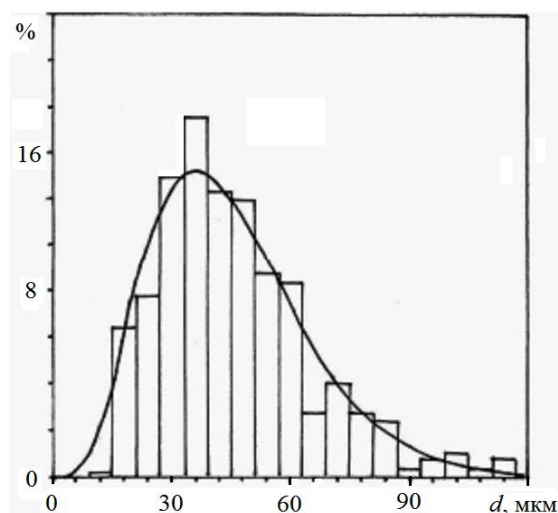


Рис.3. Гистограмма распределения пузырей по интервалам диаметров. Сплошная линия – аппроксимирующая гистограмму аналитическая функция плотности вероятностей, вида $f(d) = Cd^a e^{-bd}$, где C , a и b – параметры распределения, d – диаметр пузырей в мкм.

Вычисленные значения неизвестных параметров распределения при этом составило $C=6.47 \cdot 10^{-7}$, $a=4.01$, $b=0.11$. Видно, что вычисленные значения параметров $f(d)$ лежат близко к значениям $a=4$ и $b=1/10$, которые можно рекомендовать как наиболее подходящие при проведении аналитических расчётов (теоретических исследований) с использованием $f(d)$ и разработке общей теории таких сред.

Другие статистические характеристики гистограммы такие, как дисперсия (смещенная) $D = \int_0^{\infty} (\xi - m_1)^2 f(\xi) d\xi$, коэффициент асимметрии $A = M_3 / M_2^{3/2}$ и эксцесса $E = M_4 / M_2^2 - 3$, составили $D=414$, $A=0.89$, $E=1.19$. Здесь

$M_k = E[(X - m_1)^k]$ – k -й центральный момент случайной величины X .

Вычисленный из гистограммы средний диаметр пузырей равен 46 мкм. Поскольку коэффициенты асимметрии A и эксцесса E функции $f(d)$ больше нуля – функция $f(d)$ не симметрична относительно своего максимума, у нее более вытянут правый по отношению к максимуму участок кривой распределения. При этом нормальное распределение с аналогичными значениями моментов имеет менее острый (более плоский) пик, чем функция $f(d)$.

ВЫВОДЫ

В работе экспериментально исследовано распределение микропузырей по размерам в водо-воздушной среде при объёмном газосодержании (1÷2)%. Построена гистограмма распределения микропузырей по интервалам диаметра. На основе этой гистограммы моментным методом получено аналитическое выражение для функции плотности вероятности распределения микропузырей по диаметру – $f(d) = Cd^a e^{-bd}$, где $C = const$, $a=4$, $b=1/10$, d – диаметр пузырей в мкм. Средний радиус пузырей среды при этом составил 23 мкм.

ЛИТЕРАТУРА

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред, ч.1-2. – М.: Наука, 1987. – 464 с., 360 с.
2. Гуськов О.Б. К вопросу об эффективной вязкости разбавленной эмульсии газовых пузырьков // ПММ. – 2013. – Т.70. – №6.– С.242-252.
3. Струминский В.В. Микропузырьковая газожидкостная среда // Докл. АН СССР. – 1990. – Т.310. – №6.– С.1323-1326.
4. Попов В.В. Микропузырьковая газожидкостная среда / Дисс. на соиск. ст. канд. физ.-мат. наук. – Долгопрудный: МФТИ, 1991. – 111 с.
5. Попов В.В. Микропузырьковая газожидкостная среда / Автореферат дисс. на соиск. ст. канд. физ.-мат. наук. – Долгопрудный: МФТИ, 1991. – 18 с.
6. Бошнятов Б.В., Попов В.В. Об измерении газосодержания микродисперсных газожидкостных сред акустическим методом / В сб.: Гидродинамические проблемы технологических процессов. Под ред. акад. В.В.Струминского. – М.: Наука, 1988. – С.211-215.
7. Bosheniatov B.V., Popov V.V. Acoustic measurement of the gas content (void fraction) of dispersions of very small gas bubbles in liquids // Fluid Mechanics – Soviet Research. – 1990. – Vol.19. – N2. – P.112-117.
8. Бошнятов Б.В., Попов В.В. Затухание низкочастотных звуковых волн в микропузырьковой газожидкостной среде // Фундаментальные исследования. – 2009. – №3. – С.99-102.
9. Бошнятов Б.В., Попов В.В., Семянистый А.В. Численное моделирование коалесценции пузырьков, всплывающих в невозмущенной жидкости / Межд. конференция «Потоки и структуры в жидкостях: Физика геосфер». Тезисы докладов. – М.: Изд-во МГУ, 2009. – С.38-41.
10. Бошнятов Б.В., Попов В.В. Нерезонансный механизм поглощения звука в микропузырьковой водо-воздушной среде / Всеросс. конференция «Механика композиционных материалов и конструкций, структурно сложных и гетерогенных сред». Сборник трудов. – М.: ИПРИМ РАН, 2010. – С.61-68.

11. *Левин Ю.К., Попов В.В.* Распространение звука низких частот в воде с газовыми пузырями / IV-й Всеросс. симпозиум «Механика композиционных материалов и конструкций». Сборник трудов. – М.: ИПРИМ РАН, 2012. – Т.1. – С.194-202.

**Вычислительные методы механики
наноструктурированных
и гетерогенных сред**

ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ МЕТОД АСИМПТОТИЧЕСКОГО УСРЕДНЕНИЯ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ ТЕРМОУПРУГОСТИ С БЫСТРООСЦИЛЛИРУЮЩИМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н.

ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

В работе развивается метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений термоупругости с быстроосциллирующими коэффициентами. В отличие от традиционного подхода, при асимптотическом анализе уравнений вводится ещё дополнительный набор параметров, соответствующих нелинейным зависимостям свойств материала от напряжений и температуры. Процедура усреднения сформулирована таким образом, что функции быстрых переменных рассматриваются в параметрическом пространстве. В работе развивается двухуровневая схема решения задач механики структурно-неоднородных материалов, основанная на аналитико-численном и конечно-элементном подходе к задачам для функций быстрых и медленных переменных.

ВВЕДЕНИЕ

В работе развивается метод асимптотического усреднения [1-3] для нелинейных уравнений термоупругости с быстроосциллирующими коэффициентами, соответствующими структурно-неоднородным материалам с нелинейными свойствами, имеющими внутреннюю микроструктуру, обусловленную наличием периодической системы включений с промежуточным межфазным слоем. В отличие от традиционного подхода к методу асимптотического усреднения, помимо двух типов переменных – быстрых и медленных – при асимптотическом анализе уравнений вводится ещё дополнительный набор параметров, соответствующий нелинейным зависимостям свойств материала от напряжений и температуры. Соответственно функции быстрых переменных рассматриваются в параметрическом пространстве. В результате эффективные характеристики структурно-неоднородного материала имеют нелинейную диаграмму, для расчёта которой требуется эффективный метод решения задачи на ячейке периодичности при множественном варьировании дополнительного набора параметров.

Для решения нелинейного усредненного уравнения для функций медленных переменных применяется метод конечных элементов [4,5]. Для решения вспомогательных задач на ячейке для функций быстрых переменных применяется специальный аналитико-численный метод, являющийся вариантом метода наименьших квадратов на блочной структуре, основанный на аппроксимациях решения функциями формы высокого порядка, точно воспроизводящими все условия сопряжения на границах раздела фаз [6,7]. В целом, такой метод решения задачи усреднения нелинейных уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами является весьма эффективным и позволяет с высокой точностью определять как глобальные (с нелинейными свойствами усредненного материала), так и локальные (например, внутренние микронапряжения) характеристики неоднородной среды.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается задача нелинейной термоупругости (см. также [8]) в структурно-неоднородной области, образованной включениями сферической или цилиндрической формы с промежуточным межфазным слоем (рис.1,2). Предполагается, что в случае включений цилиндрической формы образующая направлена в одну сторону и параллельна оси Z ; предполагается также, что структура неоднородностей имеет периодический характер с периодом ε , хотя при этом типовой представительный элемент периодической структуры (рис.1) может иметь произвольную и довольно сложную нерегулярную структуру. Заметим также, что каждое включение и каждый межфазный слой в пределах представительного элемента периодической структуры (см. рис.1,2) имеет свои индивидуальные характеристики.

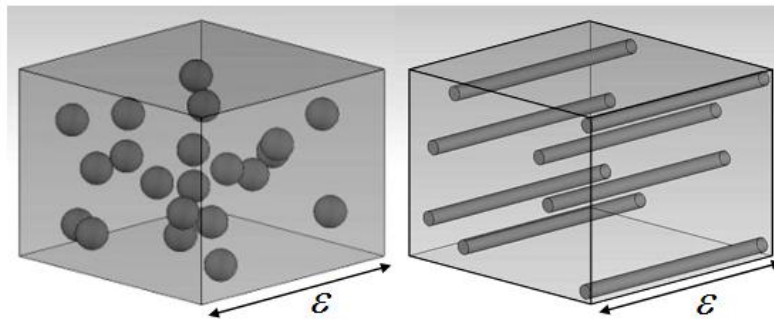


Рис.1. Типовой представительный элемент периодической структуры.

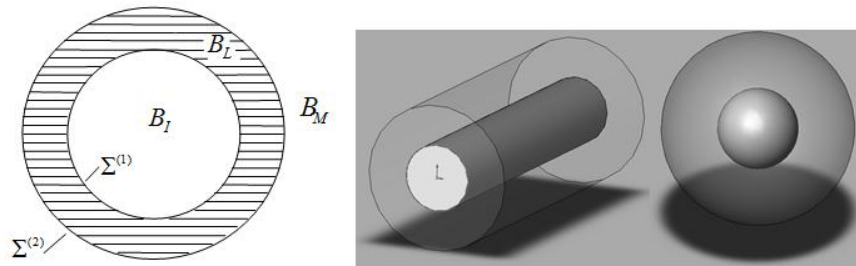


Рис.2. Включения цилиндрической и сферической формы с межфазным слоем.

Будем предполагать, что в определяющих соотношениях между тензором напряжений σ_{ij} , деформаций ε_{ij} , тепловым потоком Q_i и температурой T , описывающих физический процесс нелинейной термоупругости, материальные константы (тензоры упругих модулей c_{ijkl} , теплопроводности κ_{ij} и теплового расширения α_{ij}) могут зависеть от температуры и двух инвариантов тензора напряжений, и имеют следующий вид:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}(x/\varepsilon, T, \theta, q)(\varepsilon_{kl} - T \alpha_{kl}(x/\varepsilon, T)) =, \quad (1.1)$$

$$Q_i = -\kappa_{ij}(x/\varepsilon, T) \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (1.2)$$

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}, \quad \alpha_{ij} = \alpha_{ji}, \quad \kappa_{ij} = \kappa_{ji},$$

где $\theta = I_1(T_\sigma)$ – первый инвариант тензора напряжений T_σ , $q = \sqrt{3I_2(D_\sigma)}$ – интенсивность напряжений, $I_2(D_\sigma)$ – второй инвариант девиатора напряжений D_σ . Зависимость от переменной x/ε вызвана скачкообразной переменностью термомеханических характеристик на расстояниях порядка ε .

В случае изотропии термомеханических свойств материалов, определяющих структурно-неоднородную среду, константы в (1.1), (1.2) имеют следующую структуру:

$$\begin{aligned} c_{ijkl} &= \mu(x/\varepsilon, T, \theta, q)(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il}) + \lambda(x/\varepsilon, T, \theta, q)\delta_{ij}\delta_{kl}, \\ \alpha_{ij} &= \alpha(x/\varepsilon, T)\delta_{ij}, \quad \kappa_{ij} = \kappa(x/\varepsilon, T)\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера, λ – первый параметр Ляме, μ – модуль сдвига или второй параметр Ляме, α – коэффициент линейного теплового расширения, κ – коэффициент теплопроводности.

В рамках квазистатической модели термоупругости температура определяется из уравнения теплопроводности:

$$\rho(x/\varepsilon, T)c(x/\varepsilon, T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa_{ij}(x/\varepsilon, T)\frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + h, \quad (1.4)$$

с начальными условиями в момент времени $t = 0$:

$$T(x, 0) = \varphi(x), \quad (1.5)$$

где ρ – плотность, c – удельная теплоёмкость материала (зависящие от температуры), а напряжения (1.1) подчиняются условиям статического равновесия:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + F_i = 0. \quad (1.6)$$

На межфазных границах допускаются контактные условия различного типа: идеальный контакт при теплопередаче:

$$[T] = [Q_m] = 0, \quad x \in \Sigma_\varepsilon^{(1)} \cup \Sigma_\varepsilon^{(2)}; \quad (1.7)$$

идеальный контакт, или контакт с проскальзыванием для напряжений и перемещений:

$$[u_i] = [p_i] = 0, \quad x \in \Sigma_\varepsilon^{(1)} \cup \Sigma_\varepsilon^{(2)}, \quad (1.8)$$

$$[u_{(n)}] = 0, \quad p_{i(s)} = 0, \quad x \in \Sigma_\varepsilon^{(1)} \cup \Sigma_\varepsilon^{(2)}. \quad (1.9)$$

Здесь u_i – перемещения, p_i – напряжения на поверхности $\Sigma_\varepsilon^{(1)}$ или $\Sigma_\varepsilon^{(2)}$, соответственно $u_{(n)}$ и $p_{i(s)}$ – перемещения в направлении нормали (внешней к области включения или межфазного слоя на поверхностях $\Sigma_\varepsilon^{(1)}$ и $\Sigma_\varepsilon^{(2)}$) и касательные поверхностные напряжения, $[\cdot]$ – скачок функций на межфазных границах.

Рассмотрение различных контактных условий позволяет получить верхнюю и нижнюю оценку для эффективных термомеханических характеристик

структурно-неоднородных материалов в случае потери идеальных адгезионных свойств на межфазных границах включений.

Заметим также, что в рассматриваемой модели может отсутствовать промежуточный слой B_L , и тогда контакт между включениями и матрицей происходит непосредственно по поверхности $\Sigma_\varepsilon^{(1)} = \Sigma_\varepsilon^{(2)}$ с контактными условиями (1.7)-(1.9).

2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА АСИМПТОТИЧЕСКОГО УСРЕДНЕНИЯ

В соответствии со структурой определяющих соотношений (1.1)-(1.3) введём “быстрые” и “медленные” переменные, связанные операцией дифференцирования зависимых переменных, и набор параметров, определяющий нелинейные зависимости в соотношениях (1.1)-(1.3):

$$\xi = x/\varepsilon, \quad x = (x_1, x_2, x_3), \quad \frac{\partial}{\partial x_k} = \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_k} + D^k, \quad D^k = \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad (2.1)$$

$$\mathbf{p} = (T, \theta, q). \quad (2.2)$$

Перепишем уравнения (1.4), (1.6) в дивергентном виде с матричными коэффициентами с набором быстрых переменных и параметров:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} - \alpha_j T \right) \right) + \mathbf{F} = 0, \quad (2.3)$$

$$\rho(\xi) c(\xi) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + h, \quad (2.4)$$

$$A_{ij} = \{c_{ijkl}\}, \quad \alpha_i = \{\alpha_{ij}\}, \quad \mathbf{u} = \{u_i\}, \quad \mathbf{F} = \{F_i\}.$$

Контактные условия (в данном случае – условия идеального контакта) также переписываются в дивергентном виде с матричными коэффициентами:

$$[\mathbf{u}] = \left[A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} - \alpha_j T \right) n_i \right] = 0, \quad [T] = \left[\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i \right] = 0. \quad (2.5)$$

Решение уравнений (2.3)-(2.5) в периодической среде с размером ячейки периодичности ε ищется в виде асимптотических разложений по функциям быстрых ξ и медленных x переменных:

$$\mathbf{u}(x) = \hat{\mathbf{u}}(x, \xi, \mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l \mathbf{u}^{(l)}(x, \xi, \mathbf{p}), \quad (2.6)$$

$$T(x) = \hat{T}(x, \xi, \mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l T^{(l)}(x, \xi, \mathbf{p}). \quad (2.7)$$

При этом по быстрым переменным выполняется условие периодичности с периодом равным 1, поскольку материальные коэффициенты в уравнениях (1.1), (1.2) при фиксированном \mathbf{p} фактически зависят только от быстрых переменных ξ и являются периодическими.

Быстрые и медленные переменные разделяются в процессе построения асимптотики с помощью формулы дифференцирования зависимых переменных (2.1); при этом уравнения (2.3)-(2.5) преобразуются в свои асимптотические ряды. Приведём члены этих рядов с точностью до $O(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-2} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi_j} \right) + \varepsilon^{-1} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} - \boldsymbol{\alpha}_j T \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi_j} \right) \right\} + \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} - \boldsymbol{\alpha}_j T \right) \right) + \mathbf{F} = 0, \\ \varepsilon^{-2} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial \xi_j} \right) + \varepsilon^{-1} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial \xi_j} \right) \right\} + \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + h - \rho(\xi) c(\xi) \frac{\partial T}{\partial t} = 0. \end{aligned}$$

Приведём также асимптотические разложения с точностью до $O(\varepsilon)$ для контактных условий:

$$\begin{aligned} [\mathbf{u}] &= \left[\varepsilon^{-1} A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi_j} n_i + A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} - \boldsymbol{\alpha}_j T \right) n_i \right] = 0, \\ [T] &= \left[\varepsilon^{-1} \kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i + \kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i \right] = 0. \end{aligned}$$

Необходимым условием асимптотического равенства с точностью до членов порядка $O(\varepsilon)$ является требование равенства нулю членов порядка $O(\varepsilon^{-2})$ и $O(\varepsilon^{-1})$ и, соответственно, выполнение уравнений для оставшихся членов порядка $O(1)$. Это определяет структуру асимптотических разложений (2.6), (2.7) первого порядка:

$$\mathbf{u}^{(0)}(x, \xi, \mathbf{p}) = \mathbf{V}(x), \quad T^{(0)}(x, \xi, \mathbf{p}) = T_0(x), \quad (2.8)$$

$$\mathbf{u}^{(1)}(x, \xi, \mathbf{p}) = N_i(\xi, \mathbf{p}) D^i \mathbf{V}(x) + \mathbf{m}(\xi, \mathbf{p}) T_0(x), \quad (2.9)$$

$$T^{(1)}(x, \xi, \mathbf{p}) = n_i(\xi, \mathbf{p}) D^i T_0(x). \quad (2.10)$$

Здесь $N_i(\xi, \mathbf{p})$, $\mathbf{m}(\xi, \mathbf{p})$ и $n_i(\xi, \mathbf{p})$ функции быстрых переменных в параметрическом пространстве (соответственно матричные, векторные и скалярные функции), периодические с периодом 1 по всем направлениям.

Форма представления (2.9), (2.10) определяет уравнения для функций быстрых переменных в классе периодических функций:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (N_i + \xi_i E)}{\partial \xi_j} \right) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi_j} - \boldsymbol{\alpha}_j \right) \right) = 0, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (n_i + \xi_i)}{\partial \xi_j} \right) = 0. \quad (2.12)$$

Также из граничных условий на межфазных поверхностях получаем контактные условия для функций быстрых переменных (в случае идеального контакта):

$$[N_i] = \left[A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (N_i + \xi_i E)}{\partial \xi_j} n_i \right] = 0, \quad [\mathbf{m}] = \left[A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi_j} n_i \right] = 0, \quad (2.13)$$

$$[n_i] = \left[\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (n_i + \xi_i)}{\partial \xi_j} n_i \right] = 0. \quad (2.14)$$

Требование разрешимости возникающих на каждом шаге уравнений в классе периодических функций по быстрым переменным приводит к необходимости “усреднения” по периоду всех членов асимптотического равенства в разложении уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами. В результате для функций медленных переменных $V(x)$ и $T_0(x)$ остаётся асимптотическое уравнение, в котором все осциллирующие члены заменяются их средними по периоду:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(N_j + \xi_j E)}{\partial \xi_k} \right\rangle \frac{\partial V}{\partial x_j} + \left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial m}{\partial \xi_k} - \alpha_k \right) \right\rangle T_0 \right) + \langle F \rangle = 0, \quad (2.15)$$

$$\langle \rho(\xi) c(\xi) \rangle \frac{\partial T_0}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left\langle \kappa_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(n_j + \xi_j)}{\partial \xi_k} \right\rangle \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right) + \langle h \rangle. \quad (2.16)$$

Здесь $\langle f \rangle$ означает среднее значение по объёму представительной ячейки (среднее по периоду):

$$\langle f(\xi) \rangle = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 f(\xi) d\xi. \quad (2.17)$$

Форма представления уравнений (2.15), (2.16) имеет вид усреднённых уравнений термоупругости с эффективными термомеханическими характеристиками, определяемыми функциями быстрых переменных в параметрическом пространстве:

$$\hat{A}_{ij} = \left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(N_j + \xi_j E)}{\partial \xi_k} \right\rangle, \quad \hat{\alpha}_j = -\hat{A}_{ij}^{-1} \left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial m}{\partial \xi_k} - \alpha_k \right) \right\rangle, \quad (2.18)$$

$$\hat{\kappa}_{ij} = \left\langle \kappa_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(n_j + \xi_j)}{\partial \xi_k} \right\rangle, \quad \hat{C} = \langle \rho(\xi) c(\xi) \rangle. \quad (2.19)$$

Здесь $\hat{A}_{ij} = \{\hat{c}_{ijkl}\}$ – эффективная матрица определяющая тензор жёсткости структурно-неоднородного материала, $\hat{\alpha}_j = \{\hat{\alpha}_{ij}\}$ – эффективный тензор теплового расширения, $\hat{\kappa}_{ij}$ – эффективный тензор теплопроводности, \hat{C} – эффективная теплоёмкость структурно-неоднородного материала. В этих характеристиках сохраняется зависимость от параметра \mathbf{p} , поэтому формулы (2.18), (2.19) определяют алгоритм нахождения нелинейной диаграммы свойств эффективного материала.

3. ДВУХУРОВНЕВАЯ СХЕМА

Разделение быстрых и медленных переменных, формализованное в уравнениях (2.11)-(2.14) и (2.15)-(2.16) представляет собой, по сути, двухуровневую схему решения задач термоупругости для неоднородных материалов с периодической структурой. На первом этапе решается задача для функций быстрых переменных, и определяются эффективные характеристики периодической среды, на втором этапе решается полноценная задача термоупругости с нелинейными характеристиками. Каждая из этих задач имеет свою специфику.

Для решения внешней задачи термоупругости применяется метод конечных элементов, реализованный в программном комплексе UWay [4,9]. Особенностью этого комплекса является объектно-ориентированный подход в программировании алгоритмов. Это позволяет наращивать в программе такие модели и такую стратегию конечно-элементных расчётов, которые максимально учитывают специфику решаемых задач. Данный программный комплекс в основном ориентирован на решение нелинейных задач геомеханики, геокриологии и композитных материалов. В частности, в программе UWay развивается конечно-элементный подход для решения нелинейных задач (2.15)-(2.16).

Для решения внутренней задачи (2.11)-(2.14) в классе периодических функций быстрых переменных, имеющих свою специфику, развивается отдельный блочный аналитико-численный метод, основанный на точных аппроксимациях решения в подобластях-блоках (метод ВСМ [10]).

4. АППРОКСИМИРУЮЩАЯ СИСТЕМА ФУНКЦИЙ ДЛЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ И СФЕРИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ

Уравнения (2.11) в классе периодических функций разбиваются на ряд векторных задач для однородного уравнения, которые трактуются как напряжённо-деформируемое состояние в представительной ячейке, определяемой условиями “периодического скачка” некоторых компонент вектора перемещений в заданном направлении, и контактными условиями (2.13), определяющими непрерывность (или некоторый скачок) для перемещений и напряжений на межфазных границах. Аналогично для задачи (2.12), (2.14)-трактуемой как распределение тепла в ячейке при определенных условиях “периодического скачка” по температуре.

Действительно, обозначив i -й вектор-столбец матрицы $N_i + \xi_i E$ через u_i , мы получим для i -й компоненты вектора перемещений u_i единичный скачок в направлении i_1 -й оси, периодические условия для остальных направлений и компонент, а также условие непрерывности перемещений и напряжений на межфазных границах.

Аналогично, вектор-функция $u = m - \alpha_j \xi_j$ имеет “периодический скачок” в каждом направлении ξ_j , равный $-\alpha_j^{(M)}$, и заданные скачки для перемещений и напряжений на межфазных границах.

Обозначив $n_i + \xi_i$ через Φ , мы получим задачу стационарного распределения тепла в представительной ячейке при условии непрерывности температуры Φ и поверхностного теплопотока $Q_n = -\kappa_{ij} \Phi_{,j} n_i$ на межфазных границах, вызванное единичным скачком температуры в направлении i_1 -й оси и периодическими условиями для остальных направлений.

В случае структурно-неоднородного материала, составленного из изотропных компонент, и наполненного частицами сферической или цилиндрической формы, могут быть предложены явные аналитические конструкции решения задачи на ячейке периодичности, точно учитывающие

контактные условия на межфазных границах в рамках метода радиальных множителей, аналитически учитывающего геометрическую форму включений [6].

Заметим, что общее решение однородного уравнения Ляме для изотропного материала может быть представлено через вспомогательные потенциалы, удовлетворяющие уравнению Лапласа [11]:

$$\mathbf{u}(P) = \frac{\mathbf{f}(P)}{\mu} + \frac{\nabla(\phi - \mathbf{r}\mathbf{f})}{4\mu(1-\nu)}, \quad \nabla^2 \mathbf{f}(P) = 0, \quad \nabla^2 \phi(P) = 0, \quad (3.1)$$

где P – точка в пространстве, \mathbf{r} – радиус-вектор из начала координат в точку P , \mathbf{f} – векторный гармонический потенциал, ϕ – скалярный гармонический потенциал.

Сформулируем метод радиальных множителей для стационарного уравнения теплопроводности. Для этого с каждым слоем (а также с включением и матрицей) свяжем набор базисных потенциалов, построенных с помощью некоторого однородного гармонического полинома $f_n^{(0)}$ степени n и функции $\chi_n(r)$, зависящей от радиальной координаты, сферической $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$, или цилиндрической $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$, соответственно для включений сферической или цилиндрической формы:

$$\Phi_1(P) = f_n^{(0)}(P), \quad \Phi_2(P) = \chi_n(r) f_n^{(0)}(P), \quad (3.2)$$

где $\chi_n(r) = r^{-2n-1}$ для сферических; $\chi_n(r) = r^{-2n}$, при $n \neq 0$ и $\chi_0(r) = \ln(r)$ для цилиндрических включений.

Заметим, что потенциалы (3.2) являются гармоническими, и поэтому могут служить базисом для построения решения, отвечающего необходимым условиям контакта на межфазных границах. Соберем все потенциалы, определяющие решение уравнения (2.12), (2.14) в областях B_I , B_L и B_M (мы рассматриваем изотропный материал):

$$\Phi(P) = A_0 f_n^{(0)}(P), \quad P \in B_I, \quad (3.3)$$

$$\Phi(P) = A_1 f_n^{(0)}(P) + B_1 \chi_n(r) f_n^{(0)}(P), \quad P \in B_L, \quad (3.4)$$

$$\Phi(P) = f_n^{(0)}(P) + B_2 \chi_n(r) f_n^{(0)}(P), \quad P \in B_M. \quad (3.5)$$

На основе этих представлений получаем систему четырех уравнений для четырех неизвестных коэффициентов A_0 , A_1 , B_1 , B_2 , отвечающую четырем контактными условиям (2.14) на межфазных границах $r = r_1$ и $r = r_2$:

$$A_0 = A_1 + B_1 \chi_n(r_1), \quad A_1 + B_1 \chi_n(r_2) = 1 + B_2 \chi_n(r_2),$$

$$\kappa_I A_0 = \kappa_L A_1 - \frac{n+1}{n} \kappa_L B_1 \chi_n(r_1),$$

$$\kappa_L A_1 - \frac{n+1}{n} \kappa_L B_1 \chi_n(r_2) = \kappa_M - \frac{n+1}{n} \kappa_M B_2 \chi_n(r_2).$$

Здесь вторая группа уравнений соответствует условию непрерывности поверхностного теплопотока и записана для случая сферических координат. Для цилиндрических координат эти уравнения имеют несколько иной вид:

$$\kappa_I A_0 = \kappa_L A_1 - \kappa_L B_1 \chi_n(r_1), \quad \kappa_L A_1 - \kappa_L B_1 \chi_n(r_2) = \kappa_M - \kappa_M B_2 \chi_n(r_2), \quad n \neq 0,$$

$$\kappa_I A_0 = \kappa_L A_1 - \kappa_L B_1, \quad \kappa_L A_1 - \kappa_L B_1 = \kappa_M - \kappa_M B_2, \quad n = 0.$$

Итак, соотношения (3.3)-(3.5) определяют некоторую систему функций, удовлетворяющую необходимым контактными условиям и задаваемую

гармоническим полиномом $f_n^{(0)}(P)$, имеющим смысл асимптотики на бесконечности: $\Phi(P) \rightarrow f_n^{(0)}(P)$, $P \rightarrow \infty$. Эта система функций является полной в классе функций “с периодическим скачком”, т.е. она может быть использована для аппроксимации функций быстрых переменных (2.12), (2.14).

Отдельные степени свободы в (3.3)-(3.4) задаются системой комплекснозначных гармонических полиномов $\Phi_n^m(P)$, построенных с помощью метода квазиразделения переменных на основе функций $\psi_0(w) = w^m$ и $U_0(z) = z^{n-m}$ (см. [6,12,13]):

$$\Phi_n^m(P) = \sum_p \frac{(-1)^p \bar{w}^p}{4^p p!} \psi_0^{(-p)}(w) U_0^{(2p)}(z), \quad \psi_0(w) = w^m, \quad U_0(z) = z^{n-m}. \quad (3.6)$$

Здесь n – степень однородного гармонического полинома $\Phi_n^m(P)$, m – “угловая” степень осцилляций по координате $\varphi = \arctg(y/x)$, плоскому случаю соответствует $n = m$. Общее число вещественных степеней свободы в (3.6) при фиксированном n равно $(n+1)^2$, а при $n = m$ равно $2m+1$.

Для стационарного уравнения Ляме в каждом слое вводится система четырех базисных потенциалов на основе представления Папковича-Нейбера (3.1) и некоторого векторного гармонического полинома $f_n^{(0)}$:

$$f_1(P) = f_n^{(0)}(P), \quad f_2(P) = \chi_n(r) f_n^{(0)}(P), \quad (3.7)$$

$$f_3(P) = \nabla \operatorname{div}(\chi_n f_n^{(0)}), \quad f_4(P) = \hat{\chi}_n(r) \nabla \operatorname{div}(\chi_n f_n^{(0)}), \quad (3.8)$$

где $\hat{\chi}_n(r) = r^{2n+5}$ для сферических включений, $\hat{\chi}_n(r) = r^{2n+4}$ для цилиндрических включений.

Соберем все потенциалы, определяющие решение классического уравнения Ляме в областях B_I , B_L и B_M на основе представления (3.1) для изотропного материала. В результате получим:

$$f(P) = f_n^{(I)} + C_0 \hat{\chi}_n \nabla \operatorname{div}(\chi_n \hat{f}_n^{(L)}), \quad P \in B_I, \quad (3.9)$$

$$f(P) = f_n^{(L)} + A_1 \chi_n \hat{f}_n^{(L)} + B_1 \nabla \operatorname{div}(\chi_n \hat{f}_n^{(L)}) + C_1 \hat{\chi}_n \nabla \operatorname{div}(\chi_n \hat{f}_n^{(L)}), \quad P \in B_L, \quad (3.10)$$

$$f(P) = f_n^{(M)} + A_2 \chi_n \hat{f}_n^{(M)} + B_2 \nabla \operatorname{div}(\chi_n \hat{f}_n^{(M)}) + C_2 \nabla \operatorname{div}(\chi_n \hat{f}_n^{(L)}), \quad P \in B_M. \quad (3.11)$$

Анализируя граничные уравнения контакта (2.13) с помощью (3.1), запишем входящие в них перемещения и поверхностные напряжения на границе сферической области радиуса r с вектором нормали \mathbf{n} в следующем виде через гармонический векторный потенциал (3.9)-(3.11):

$$\mathbf{u}(P) = \frac{\mathbf{f}}{\mu} - \frac{\nabla(\mathbf{r} \mathbf{f})}{4\mu(1-\nu)},$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{u}) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial n} + \mathbf{n} \nabla \mathbf{f} + \frac{\nu \mathbf{n} \operatorname{div} \mathbf{f}}{1-\nu} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{\partial \nabla(\mathbf{r} \mathbf{f})}{\partial n}. \quad (3.12)$$

Далее заметим, что при дифференцировании функций с радиальным множителем происходит повышение порядка граничного полинома за счёт операции дифференцирования произведения полинома и поправочного

множителя:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\chi(r) \mathbf{f}(P)) = \chi(r) \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{f}(P) + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \chi(r) x_i \mathbf{f}(P).$$

Из этой формулы получаем основные дифференциальные соотношения, используемые в представлении Папковича-Нейбера при выводе контактных уравнений на межфазных границах:

$$\operatorname{div}(\chi \mathbf{f}) = \chi \operatorname{div} \mathbf{f} + (\mathbf{r} \mathbf{f}) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \chi(r), \quad \nabla(\chi \mathbf{r} \mathbf{f}) = \chi \nabla(\mathbf{r} \mathbf{f}) + \mathbf{r}(\mathbf{r} \mathbf{f}) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \chi(r),$$

$$\nabla \operatorname{div}(\chi \mathbf{f}) = \left\{ \chi \nabla \operatorname{div} \mathbf{f} + [\nabla(\mathbf{r} \mathbf{f}) + \mathbf{r} \operatorname{div} \mathbf{f}] \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \chi(r) + \mathbf{r}(\mathbf{r} \mathbf{f}) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 \chi(r) \right\}.$$

Отсюда следует, что в граничные уравнения контакта войдут следующие операторы с некоторыми постоянными коэффициентами:

$$\nabla \operatorname{div} \hat{\mathbf{f}}_n, \quad \nabla(\mathbf{r} \hat{\mathbf{f}}_n), \quad \mathbf{r} \operatorname{div} \hat{\mathbf{f}}_n, \quad \mathbf{r}(\mathbf{r} \hat{\mathbf{f}}_n).$$

Из них первый имеет порядок $n-2$, второй и третий – порядок n , последний – порядок $n+2$. Форма представления потенциала (3.9)-(3.11) позволяет компенсировать слагаемые порядка $n+2$ в граничных уравнениях для скачка перемещений и напряжений (3.12) за счёт подбора коэффициентов $C_0, A_1, B_1, C_1, A_2, B_2, C_2$. В результате в граничных уравнениях остаются полиномы порядка n и $n-2$, которые обнуляются за счёт выбора функций $\mathbf{f}_n^{(I)}, \mathbf{f}_n^{(L)}, \hat{\mathbf{f}}_n^{(L)}$ и $\hat{\mathbf{f}}_n^{(M)}$ (четыре векторных условия – четыре векторных функции).

Таким образом, форма представления решений задачи (2.11), (2.13) в виде (3.1), (3.6), (3.9)-(3.11) позволяет построить полную систему функций с числом степеней свободы $(n+1)^2$ или $2m+1$ (для плоского случая), точно удовлетворяющую уравнениям и контактными условиям (2.11), (2.13), которая используется для аппроксимации условий периодического скачка для функций быстрых переменных.

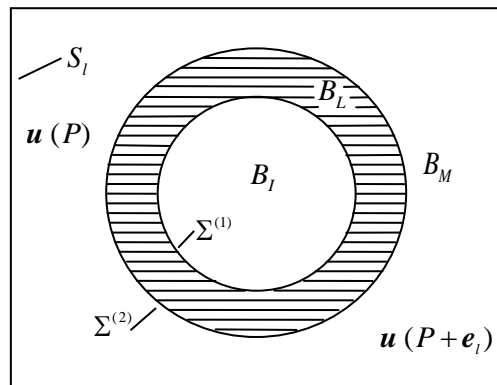


Рис.3. Аппроксимация условий периодического скачка.

Аппроксимация функций быстрых переменных на базисной системе функций осуществляется при помощи функционала наименьших квадратов, с использованием которого осуществляется сшивка поверхностных напряжений \mathbf{p} и перемещений \mathbf{u} на противоположных гранях единичной ячейки (см. рис.3) с учетом условий периодического скачка:

$$F = \sum_l \left(\left\| \mathbf{u}(P + \mathbf{e}_l) - \mathbf{u} + \mathbf{e}_i \delta_{il} \xi_l \right\|_{L_2(S_l)}^2 + \left\| \mathbf{p}(P + \mathbf{e}_l) - \mathbf{p} \right\|_{L_2(S_l)}^2 \right). \quad (3.13)$$

Аппроксимация решения задачи на ячейке соответствует аппроксимации базисного гармонического полинома $f_n^{(0)}(P)$ в методе радиальных множителей рядами по полиномам (3.6):

$$f_n^{(0)}(P) = \operatorname{Re} \sum_{m=0}^n \left\{ \mathbf{A}_n^m \Phi_n^m(P) + \mathbf{B}_n^m \bar{\Phi}_n^m(P) \right\}. \quad (3.14)$$

Минимизация функционала (3.13) на системе функций $\{f_n^{(0)}\}$, $n = 0, 1, \dots, M$ обеспечивает аппроксимацию условий периодического скачка на границе и приводит к плотно заполненной системе линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов $\{\mathbf{A}_n^m, \mathbf{B}_n^m\}$:

$$T \mathbf{X} = \mathbf{H}, \quad \mathbf{X} = \{\mathbf{A}_n^m, \mathbf{B}_n^m\}.$$

5. АППРОКСИМАЦИЯ ВКЛЮЧЕНИЙ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ

Построенные в п.4 системы специальных функций используется для аппроксимации решений задачи (2.11)-(2.14) на ячейке с многослойным включением сферической или цилиндрической формы (см. рис.2,3). Для аппроксимации решений с включениями произвольной формы, или с множеством включений, нерегулярным образом распределенных в ячейке (см. рис.1,4), используется блочный вариант метода наименьших квадратов [6,12,13].

Для этого область решения разбивается на множество блоков в соответствии с фазами материала B_l, B_L, B_M (рис.4), или в соответствии с распределением включений по принципу: каждое включение помещается в отдельный блок; т.е. рассматривается блочная структура подобластей, пересекающихся только по своей границе: $\bar{G} = \cup \bar{B}_k, B_k \cap B_l = \emptyset, k \neq l$.

При решении задач на ячейке периодичности температура $\Phi(P)$ и вспомогательные потенциалы f и ϕ из представлений (3.1) представляются в виде суперпозиции базисных систем функций в каждом блоке.

Аппроксимация условий периодического скачка для $\mathbf{u}(P)$ или $\Phi(P)$, а также сшивка перемещений, поверхностных сил, температур и теплоточков и на границе между блоками осуществляется с помощью блочного варианта функционала метода наименьших квадратов (см. [12]):

$$F_k = \sum_l \left(\left\| \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_l \right\|_{L_2(S_{kl})}^2 + \left\| \mathbf{p}(\mathbf{u}_k) - \mathbf{p}(\mathbf{u}_l) \right\|_{L_2(S_{kl})}^2 \right). \quad (5.1)$$

Для блоков, примыкающих к границе ячейки периодичности (см. рис.5), эти функционалы имеют следующий вид:

$$F_k = \left\| \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_j^- - \mathbf{e}_i \xi_i \right\|_{L_2(S_k)}^2 + \left\| \mathbf{p}(\mathbf{u}_k) - \mathbf{p}(\mathbf{u}_j^-) \right\|_{L_2(S_k)}^2 + \sum_l \left(\left\| \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_l \right\|_{L_2(S_{kl})}^2 + \left\| \mathbf{p}(\mathbf{u}_k) - \mathbf{p}(\mathbf{u}_l) \right\|_{L_2(S_{kl})}^2 \right), \quad (5.2)$$

$$F_j = \left\| \mathbf{u}_j - \mathbf{u}_k^+ + \mathbf{e}_i \xi_i \right\|_{L_2(S_j)}^2 + \left\| \mathbf{p}(\mathbf{u}_j) - \mathbf{p}(\mathbf{u}_k^+) \right\|_{L_2(S_j)}^2 + \sum_l \left(\left\| \mathbf{u}_j - \mathbf{u}_l \right\|_{L_2(S_{jl})}^2 + \left\| \mathbf{p}(\mathbf{u}_j) - \mathbf{p}(\mathbf{u}_l) \right\|_{L_2(S_{jl})}^2 \right). \quad (5.3)$$

Здесь S_k и S_j – границы блоков B_k и B_j , примыкающие к параллельным сторонам ячейки и связанные между собой условием параллельного переноса вдоль соответствующей координатной оси, \mathbf{u}_k^+ и \mathbf{u}_j^- соответствующие значения локальных функций на границах S_k и S_j , $S_{kl} = \partial B_k \cap \partial B_l$, $S_{jl} = \partial B_j \cap \partial B_l$.

Для температурной задачи функционалы записываются аналогично, обеспечивая шивку температуры и поверхностного теплопотока на границе блоков.

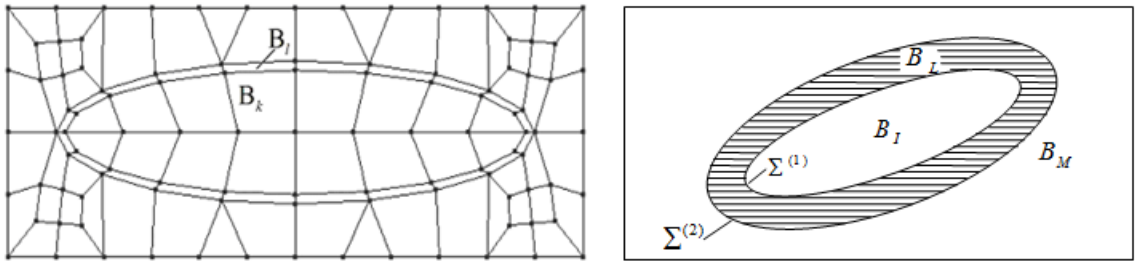


Рис.4. Разбиение ячейки периодичности на систему подобластей-блоков.

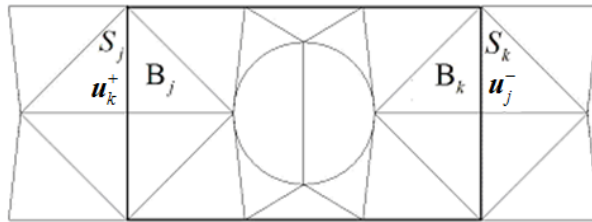


Рис.5. Аппроксимация условий “периодического скачка” на блочной структуре.

Минимизация системы функционалов (5.1) по норме приводит к блочной системе линейных уравнений:

$$F(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0) \rightarrow \min, \quad F(\mathbf{u}) = \max_k F_k, \quad (5.4)$$

$$T_k \mathbf{X}_k + \sum_l T_{kl} \mathbf{X}_l = \mathbf{H}_k, \quad k=1, 2, \dots, N. \quad (5.5)$$

Блочная система линейных алгебраических уравнений (5.5) для неизвестных коэффициентов в блоках $\mathbf{X}_k = \{ \mathbf{A}_n^{(k)m}, \mathbf{B}_n^{(k)m} \}$ имеет разреженную структуру и плотно заполненные матрицы-блоки T_k и T_{kl} . Здесь T_k – матрица Грама аппроксимирующей системы функций, T_{kl} – матрицы, составленные из скалярных произведений аппроксимирующих функций смежных блоков, \mathbf{H}_k – вектор граничных условий в блоке.

Основным моментом в блочном методе наименьших квадратов является необходимость решения системы линейных алгебраических уравнений, структура которой соответствует структуре блочного разбиения исходной области [14,15]. Поскольку система линейных уравнений имеет блочно-разреженную структуру

с плотными блоками-подматрицами, то здесь естественным образом возникает два уровня вычислений: интенсивные вычисления с плотными подматрицами на уровне общей памяти и относительно независимые вычисления между блоками на уровне распределенной памяти. Такая организация вычислений позволяет эффективно использовать неоднородную структуру организации памяти в современных кластерных системах. Интенсивные вычисления с плотными подматрицами распараллеливаются на основе потоков вычислений с использованием общей памяти или графических процессоров. А относительно независимые вычисления с блочно разреженной структурой распараллеливаются по распределенной памяти с помощью MPI.

6. ЧИСЛЕННЫЕ ПРИМЕРЫ

В соответствии с изложенным в п.2 параметрическим методом асимптотического усреднения эффективные характеристики материалов с нелинейной диаграммой свойств определяются по формулам (2.11)-(2.14), полагая зависимости от нелинейных факторов параметрическими. На рис.6 приведен пример расчета эффективной нелинейной диаграммы состояния структурно-неоднородного материала, составленного из композиции кремний/медь в случае включений сферической и цилиндрической формы при коэффициенте объемного наполнения меди $c_i = 0.3$ в диапазоне температур $200^\circ K - 1000^\circ K$, а также верхняя и нижняя оценка (вилка Фойгта-Рейсса).

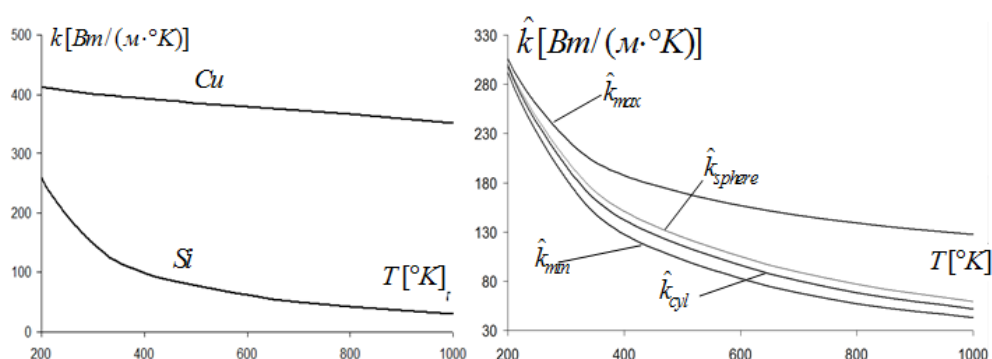


Рис.6. Эффективные теплофизические характеристики периодических структур.

Блочный метод наименьших квадратов применяется для оценки эффективных характеристик в случае плотной упаковки включений, произвольной геометрии включений, или в случае сложной структуры ячейки. На рис.7 представлены примеры расчёта теплотокота $Q_1 = \kappa \partial(N_1 + \xi_1) / \partial \xi_1$ в ячейке с нерегулярным расположением включений цилиндрической формы с промежуточным межфазным слоем; приведённые коэффициенты теплопроводности матрицы, слоя и включения: $\kappa_M = 1$, $\kappa_L = 0.01$, $\kappa_I = 20$, радиус включений $r = 0.3\varepsilon$, где ε – расстояние между центрами включений.

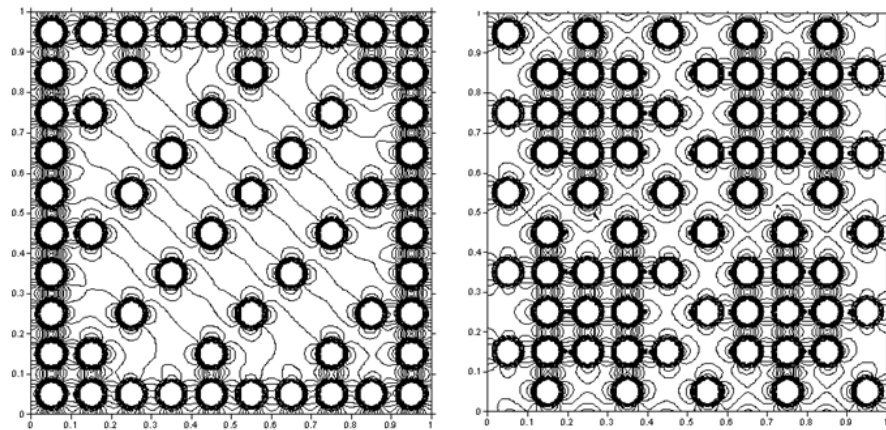


Рис.7. Примеры распределения теплоточка в ячейке с нерегулярным расположением включений.

Аппроксимация на основе системы функций аналитически точно учитывающей контактные условия на межфазной границе позволяет построить с высокой степенью точности распределение микронапряжений в ячейке. На рис.8 представлен пример расчёта главных растягивающих напряжений σ_3 для функций быстрых переменных в ячейке с включением сферической формы с условием единичного периодического скачка в направлении ξ_3 .

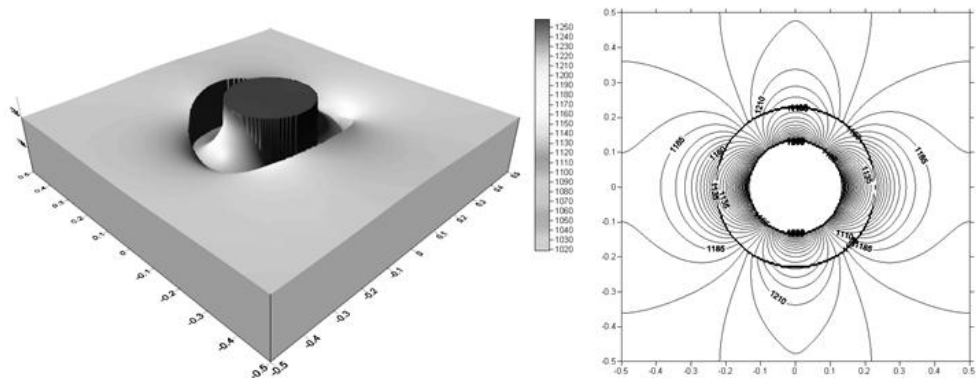


Рис.8. Распределение микронапряжений в ячейке с включением и межфазным слоем.

В расчёте упругие характеристики (модули Юнга и коэффициенты Пуассона) матрицы, слоя и включения принимались соответственно следующими: $E_M = 135$ МПа, $E_I = 1500$ МПа, $E_L = 1000$ МПа, $\nu_M = 0.4999$ (почти несжимаемая матрица), $\nu_I = \nu_L = 0.3$, (см. [16]). Коэффициент объёмного наполнения и относительная ширина межфазного слоя в расчётах были соответственно равны: $c_i \approx 0.007$, $l \approx 0.08R$, где R – радиус включения.

Системы функций первого порядка, аналитически точно учитывающие контактным условиям на межфазной границе и соответствующие гармоническому полиному $f_n^{(0)}(P)$ первого порядка ($n=1$), позволяют выполнить оценку эффективных термомеханических характеристик с помощью самосогласованной модели четырех сферических или цилиндрических тел (см. [17]), поскольку представляют в аналитическом виде решение необходимой вспомогательной

задачи для многослойного включения в бесконечной матрице. В результате получаем следующие формулы.

Эффективный объёмный модуль \hat{K}_H для сферических включений с межфазным слоем ($K = 2\mu/3 + \lambda$) имеет вид:

$$\hat{K}_H = K_M + \frac{c K_D}{1 + (1-c) K_D / \left(K_M + \frac{4\mu_M}{3} \right)}, \quad c = c_I + c_L,$$

$$K_D = \frac{(K_I - K_M) - (1-c_0) \left[1 + (K_M - K_L) / \left(K_L + \frac{4\mu_L}{3} \right) \right] (K_I - K_L)}{1 + (1-c_0) (K_I - K_L) / \left(K_L + \frac{4\mu_L}{3} \right)}, \quad c_0 = c_L / c,$$

где K_I , K_L , K_M – соответственно объёмный модуль деформации включения, межфазного слоя и матрицы; c – объёмная доля включений с учётом межфазного слоя; $c_0 = (r/(r+l))^3$ – относительная объёмная доля включений внутри области, занимаемой включением и межфазным слоем; c_I , c_L , c_M – коэффициенты объёмного наполнения для фаз материала, $c_I + c_L + c_M = 1$.

Эффективный плоский модуль \hat{K}_H для цилиндрических включений с межфазным слоем ($K = \mu + \lambda$):

$$\hat{K}_H = K_M + \frac{c K_D}{1 + (1-c) K_D / (K_M + \mu_M)}, \quad c = c_I + c_L,$$

$$K_D = \frac{(K_I - K_M) - (1-c_0) \left[1 + (K_M - K_L) / (K_L + \mu_L) \right] (K_I - K_L)}{1 + (1-c_0) (K_I - K_L) / (K_L + \mu_L)}, \quad c_0 = c_L / c,$$

где K_I , K_L , K_M – соответственно плоский модуль деформации для включения, межфазного слоя и матрицы; c – доля включений с учётом межфазного слоя; $c_0 = (r/(r+l))^2$ – относительная доля включений внутри цилиндрической области, занимаемой включением и межфазным слоем; c_I , c_L , c_M – коэффициенты объёмного наполнения фаз материала для цилиндрического тела, $c_I + c_L + c_M = 1$.

Эффективный коэффициент теплопроводности $\hat{\kappa}_H$ для сферических включений с межфазным слоем:

$$\hat{\kappa}_H = \kappa_M \frac{\left(c_M c_L + (3 - 2c_M) \frac{3c_I + c_L}{2} \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right) + \frac{\kappa_L}{\kappa_I} \left(c_M (3c_I + 2c_L) + (3 - 2c_M) c_L \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right)}{\left(\frac{3 - c_M}{2} c_L + c_M \frac{3c_I + c_L}{2} \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right) + \frac{\kappa_L}{\kappa_I} \left(\frac{3 - c_M}{2} (3c_I + 2c_L) + c_M c_L \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right)}.$$

Эффективный плоский коэффициент теплопроводности $\hat{\kappa}_H$ для цилиндрических включений с межфазным слоем, в плоскости ортогональной образующей цилиндров:

$$\hat{\kappa}_H = \kappa_M \frac{\left(c_M c_L + (2 - c_M)(2c_I + c_L) \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right) + \frac{\kappa_L}{\kappa_I} \left(c_M (2c_I + c_L) + (2 - c_M)c_L \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right)}{\left((2 - c_M)c_L + c_M (2c_I + c_L) \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right) + \frac{\kappa_L}{\kappa_I} \left((2 - c_M)(2c_I + c_L) + c_M c_L \frac{\kappa_L}{\kappa_M} \right)}.$$

Здесь κ_I , κ_L , κ_M – соответственно модули теплопроводности для включения, межфазного слоя и матрицы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен вариант метода асимптотического усреднения для нелинейных уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами на примере уравнений термоупругости. Алгоритм построения асимптотики сформулирован таким образом, что функции быстрых переменных рассматриваются в параметрическом пространстве, определяющем все нелинейные зависимости свойств материала от напряжений и температуры. Для эффективного решения задачи на ячейке для функций быстрых переменных и усредненного нелинейного уравнения в работе развивается двухуровневая схема решения, основанная на аналитико-численном и конечно-элементном подходе к задачам для функций быстрых и медленных переменных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. – М.: Наука. 1984. – 352 с.
2. Победря Б.Е. Механика композиционных материалов. – М.: Изд-во МГУ, 1984. – 336 с.
3. Bensoussan A., Lions J.L., Papanicolaou G. Asymptotic analysis for periodic structures. – Amsterdam: North-Holland Publ. Comp., 1978. – 700 p.
4. Власов А.Н., Потапов В.Н., Яновский Ю.Г. Объектно-ориентированное программирование метода конечных элементов для задач механики неоднородных сред. Часть 1. Идеология объектно-ориентированного подхода и его приложение к методу конечных элементов. // Механика композиционных материалов и конструкций. – 1996. – Т.2. – №1. – С.94-109.
5. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Знаменский В.В., Мнушкин М.Г. Конечно-элементное моделирование задач геомеханики и геофизики // Вестник Московского государственного строительного университета. – 2012. – №2. – С.52-65.
6. Волков-Богородский Д.Б. Применение аналитических расчетов на основе метода блоков в связанных задачах механики сплошных сред / Всеросс. научно-практическая конференция “Инженерные системы - 2008”. Труды. – М.: Изд-во РУДН, 2008. – С.123-138.
7. Волков-Богородский Д.Б. Аналитико-численный метод оценки эффективных характеристик структурно-неоднородных материалов // Вестник Нижегородского университета им. Н.И.Лобачевского. – 2011. – №4. – Ч.2. – С.407-409.
8. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б. Усреднение нелинейного уравнения теплопроводности при моделировании распространения тепла в композитных

- материалах периодической структуры // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2013. – Т.19. – №2. – С.163-180.
9. *Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Мнушкин М.Г.* Программный комплекс «UWay» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. № 2011611833, 28 февраля, 2011 г.
 10. *Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н., Саваторова В.Л., Талонов А.В.* Программный комплекс «Seepage VSM» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент). № 2013612316, 21 февраля, 2013 г.
 11. *Новацкий В.* Теория упругости. – М.: Наука, 1975. – 872 с.
 12. *Волков-Богородский Д.Б.* Разработка блочного аналитико-численного метода решения задач механики и акустики // Школа-семинар “Композиционные материалы”. Сборник трудов. – М.: ИПРИМ РАН, 2000. – С.44-56.
 13. *Волков-Богородский Д.Б.* Применение блочного аналитико-численного метода мультиполей к задачам акустики // Вестник МАИ. – 2005. – Т.12. – №3. – С.51-60.
 14. *Волков-Богородский Д.Б., Харченко С.А.* Параллельная версия аналитико-численного метода блоков для связанных задач волновой виброакустики // Вестник Нижегородского университета им. Н.И.Лобачевского. – 2009. – №5. – С.202-209.
 15. *Волков-Богородский Д.Б., Сушко Г.Б., Харченко С.А.* Комбинированная MPI+threads параллельная реализация метода блоков для моделирования тепловых процессов в структурно-неоднородных средах // Вычислительные методы и программирование. – 2010. – Т.11. – С.127-136.
 16. *Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Яновский Ю.Г.* Влияние размера включений на механические свойства эластомерных композитов // Доклады Академии Наук. – 2012. – Т.443. – №4. – С.435-437.
 17. *Кристенсен Р.* Введение в механику композитов. – М.: Мир, 1982. – 334 с.

МЕТОД МЕЛКОЗЕРНИСТОГО ПАРАЛЛЕЛИЗМА В МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ СТРУКТУР

Гергега А.Н.¹, Остапкевич М.Б.²

¹*Одесская национальная академия пищевых технологий, г. Одесса, Украина*

²*Институт вычислительной математики и математической геофизики
СО РАН, г. Новосибирск, Россия*

РЕЗЮМЕ

Описаны свойства созданного на основе метода мелкозернистого параллелизма программного комплекса, предназначенного для исследования моделей перколяционных систем. Возможности комплекса используются как для генерации и исследования структуры и свойств модельных кластерных систем, так и для изучения гетерогенных материалов в промежуточной асимптотике.

1. ВВЕДЕНИЕ

Интересные перспективы в исследовании перколяционных структур имеет подход, базирующийся на алгоритмах с мелкозернистым параллелизмом (МЗП). Суть метода сводится, как известно, к отысканию таких трансформаций постановки исходной задачи, ее содержательного или аналитического описания, которые превращают алгоритм решения в совокупность пространственно распределенных, параллельно выполняемых, достаточно примитивных массовых вычислительных процессов [1-3]. Примеры таких трансформаций – ассоциативные алгоритмы решения числовых и нечисловых задач, конструирования клеточных автоматов, конвейерных (систолических) и нейронных алгоритмов и другое.

Привлекательность метода объясняется возможностью отыскания оптимальных (например, по временным характеристикам) алгоритмов решения сложных, а также громоздких и трудоемких задач. К таким задачам относятся задачи обработки сигналов и изображений, задачи математической физики, задачи на графах и другие. Более того, для некоторых задач решение возможно только в рамках некоторой модели мелкозернистых вычислений, например, решение трудно формализуемых задач на нейронных сетях с использованием методов обучения.

Практическая важность мелкозернистого параллелизма определяется также тем, что он служит источником методов распараллеливания алгоритмов решения задач на современных многопроцессорных вычислительных системах; что многие и реальные, и гипотетические компьютерные спецпроцессоры являются устройствами с мелкозернистым (клеточным) параллелизмом.

2. СРЕДА МОДЕЛИРОВАНИЯ WinALT

Известно несколько десятков систем моделирования МЗП [1-3]. Помимо существенных достоинств, они имеют и общий недостаток: работают только с классическим клеточным автоматом и некоторыми его расширениями. Но к МЗП-структурам относятся и матричные, конвейерные (включая систолические) и мультимикропроцессорные архитектуры, ассоциативные

процессоры, клеточно-нейронные сети, однородные перестраиваемые вычислители и другое. Для работы со всем спектром МЗП-алгоритмов была построена среда моделирования WinALT [4]. Ее основные свойства следующие:

- открытая архитектура: ее функциональные возможности могут расширяться не только разработчиками, но и пользователями. В частности, в систему можно добавлять новые форматы данных, виды отображения данных, режимы моделирования, внешние функции, используемые в моделирующей программе;
- наличие коллекции моделей на сайте системы. Она содержит модели арифметических устройств, ассоциативных процессоров, универсальных однородных структур, ряда классических клеточных автоматов, а также модель диффузии [1], модели алгебраических и геометрических фракталов, модель визуальной криптографии, модель управляющей сети Петри;
- возможность аналитического описания моделей с помощью языка моделирования. Этот язык содержит конструкции, описывающие композиции объектов данных и их преобразования для моделей из всего спектра классов МЗП. Язык позволяет строить моделирующие программы из модулей, написанных как на самом языке моделирования, так и на языках C/C++;
- наличие языка моделирования, соединяющего средства параллельного и последовательного программирования со средствами адаптации к запросам пользователей;
- наличие графического режима, реализующего визуальное программирование; возможность визуального подхода в описании правил преобразований данных в моделях;
- возможность конструирования и модификации средствами интерфейса системы данных модели и моделирующих программ, а также позволяют следить за динамикой изменения преобразуемых в модели данных;
- дружелюбный и адекватный пользовательский интерфейс, который обеспечивает возможность строить, отлаживать и исполнять модели любого класса МЗП и ряд других.

Графическая оболочка системы позволяет исследователю пройти всю цепочку работы с моделью, от ее создания и наполнения данными, через отладку, до ее исполнения и получения конечных результатов. Она, как и вся система моделирования, предоставляет разработчикам и пользователям механизм для добавления новых режимов отображения и редактирования данных в системе, который основан на использовании библиотек внешних модулей.

3. ГЕНЕЗИС И ОПИСАНИЕ МОДЕЛЬНЫХ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ СТРУКТУР

Специализированный программный комплекс ОДНО создан на базе WinALT для описания и исследования моделей перколяционных систем. Возможности программного комплекса (ПК) используются для генерации и изучения структуры и свойств модельных перколяционных кластеров разнообразных модификаций, а также для исследования структуры гетерогенных материалов различной природы в мезоскопической асимптотике.

Для описания структуры и свойств перколяционных систем в программном комплексе используются статистические, геометрические и физические параметры. К последним относятся, в частности, радиус гирации и степень анизотропии кластеров, критические индексы, размерности Реньи, длина

связности, кластерная мощность и индекс ее роста, лакуарность, энтропия и другие.

Остановимся на некоторых особенностях комплекса, связанных с его ориентацией на исследование физических явлений.

3.1. Специализированная семантика комплекса.

Аналитический способ, наряду с визуальным, является одним из главных способов описания моделей. Он реализуется в первую очередь языком моделирования ПК ОДНО. Язык подразделяется на две части. Первая часть сформирована конструкциями общего назначения. Они служат, например, для описания вычислений, управляющих структур, подпрограмм, модульной структуры сложной модели и библиотек подпрограмм и фрагментов моделей, импорта внешних модулей в модель или в саму систему.

Вторая часть языка отражает специфику проблемной области ПК ОДНО – исследование кластерных систем. Основные типы объектов в этой части служат для описания кластерных структур, их частей, элементов, композиций и состояний. Примерами конструкторов объектов являются Cluster, Array, Dimension. Операторы языка (Transform, Rewrite, Create) позволяют производить действия с объектами модели.

Например, для расчета клеточной информационной размерности кластера – второго члена спектра размерностей Реньи – используется оператор InfDim, который обеспечивает расчет выражения

$$D_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i \ln p_i / \ln \varepsilon \right),$$

где ε – линейный размер ячейки палетки, p_i – вероятность модификации ячейки кластера. В свою очередь InfDim использует оператор расчета энтропии Entropy

$$S(\varepsilon) = - \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i \ln p_i,$$

и, по сути, имеет вид

$$D_1 = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (S(\varepsilon) / \ln \varepsilon).$$

3.2. Эффективные параметры кластерных систем и их распределения.

Помимо проблем, связанных с критическим поведением, безусловный интерес в перколяционных исследованиях и, в частности, при изучении кластерных структур гетерогенных материалов представляют вопросы статистики. В ПК ОДНО предусмотрена возможность статистических исследований малых (неперколяционных) кластеров, «мертвых концов [5]», лакун и полостей различного происхождения, сетей трещин и внутренних границ. Программный комплекс позволяет устанавливать тип распределения, определять его параметры, дает графическое представление данных.

Также как и в любых естественнонаучных исследованиях, если есть необходимость, устанавливаются правила определения средних значений физических величин, и в комплексе ОДНО предусмотрены процедуры расчета эффективных значений параметров элементов кластерных систем.

Иллюстрацией к сказанному может быть описание расчета эффективного радиуса малого фрактального кластера [6].

Для определения эффективного радиуса рассчитаем напряжённость поля внутри кластера. Положим, что силы взаимодействия между частицами пропорциональны r^{-2} . При расчёте взаимодействия соседние частицы, как известно, дают экспоненциально большой вклад. Эти расходящиеся слагаемые устраняются в ОДНО с помощью простого правила: частицы, расположенные на расстоянии 2-3 средних радиусов частиц от точки, в которой рассчитывается поле, исключаются из расчёта напряжённости в ней. В рамках модели это приводит к тому, что экспериментальные зависимости $E(r)$ внутри кластера аппроксимируются прямыми, а на расстоянии 5-10 радиусов от него – функцией $1/r^2$ (рис.1).

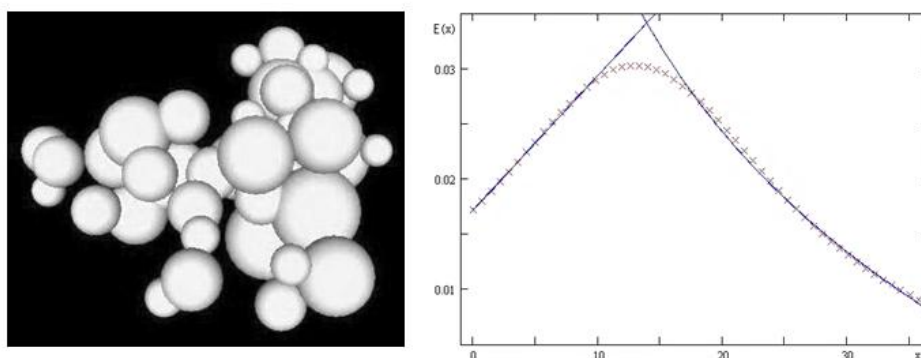


Рис.1. Модельный кластер и график зависимости напряжённости его силового поля (в усл. ед.) от расстояния.

Именно такой характер зависимости $E(r)$ позволяет ввести понятие эффективного радиуса кластера – радиуса сферы, которая могла бы заменить его при описании силовых взаимодействий. Если использовать сравнение с классическим результатом – полем сплошной сферы – то видно, что эффективный радиус равен абсциссе точки пересечения аппроксимационных кривых графика зависимости $E(r)$ (см. рис. 1).

Другой аспект, необходимости введения понятия эффективных значений – изучение происходящих в перколяционных кластерах процессов различной природы. В ПК ОДНО это реализуется посредством «декомпозиции» перколяционных кластеров: в геометрически тождественных кластерах могут быть реализованы процессы различной физической природы, при этом, например, эффективная длина «мертвых концов» в процессах теплопроводности, диффузии или электропроводности будет существенно различаться.

3.3. Перколяция в конфигурационных пространствах свойств.

В перколяционных исследованиях обычно одновременно изучается и кластерная система физического тела, и её влияние на объект в целом [7]. Одной из особенностей ПК ОДНО является возможность исследования стохастических связанных областей и материалов, в которых они расположены, в n -мерных конфигурационных пространствах свойств.

Известно, что некоторые физические величины, характеризующие композиционные материалы, имеют степенные концентрационные зависимости, претерпевающие излом в точке структурного фазового перехода. Например, модуль Юнга, коэффициент Пуассона [8], коэффициенты тепло-

и электропроводности, диффузии [9] и другие. В качестве иллюстрации возможностей ПК ОДНО рассмотрим модель эффекта дальнего действия.

Программный комплекс реализует континуальную перколяционную модель образования аморфизированного слоя. Предложенная в [10] перколяционная модель позволяет интерпретировать эффект дальнего действия [11] как результат критического поведения аморфизированного слоя. В модели предполагается, что дефектный слой, расположенный на глубине наиболее вероятного проективного пробега ионов, представляет собой квазиплоскую несплошную совокупность аморфизированных областей различных размеров, причем при критической дозе облучения, часть областей объединяется, и в кристалле возникает перколяционный кластер аморфизированного слоя. Достижение критической концентрации дефектов в материале меняет характер степенной зависимости механических напряжений от расстояния, возникает излом на графике функции, что позволяет и зафиксировать наличие самого перехода, и определить пороговую концентрацию.

Оказывается, этих предположений достаточно, чтобы интерпретировать немонотонность зависимости свойств образца от дозы облучения: по мере набора дозы области одной степени разупорядоченности теряют связность, и заменяется перколяционным кластером более разупорядоченных областей. В процессе облучения это происходит неоднократно, и приводит к скачкообразным изменениям величины механических напряжений, к выраженной немонотонности свойств облучаемого образца, в частности, микротвердости, а также позволяет объяснить наличие «магических» доз, при которых наблюдаются экстремумы свойств [10].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Работа по расширению возможностей комплекса ОДНО продолжается в трех направлениях. Первое имеет цель максимально использовать возможности метода мелкозернистого распараллеливания. Это самостоятельная задача. Второе – создание библиотек вычислительных модулей, подпрограмм, фрагментов моделей, режимов моделирования и визуализации данных для решения обширного спектра перколяционных задач. Кроме того, создание возможностей для модификации задач в традиционной постановке в пространстве двух и трех измерений и их обобщения на произвольное число измерений в конфигурационных пространствах свойств кластерных систем твердотельных материалов.

Третье направление, в котором ведется работа, – создание программного продукта, имеющего аналитические и графические возможности моделирования объектов и систем произвольной природы, которые содержат связные области, образующиеся в стохастических процессах. Планируется также, что у исследователя будет возможность определять семантику части операторов программного комплекса, например, связность, которую можно будет трактовать достаточно широко (почти произвольно).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Тоффоли Т., Марголюс Н.* Машины клеточных автоматов. – М.: Мир, 1991. – 280 с.

2. *Ilachinski A.* Cellular Automata. A Discrete Universe. – Singapore: World Scientific, 2001. – 808 p.
3. Cellular automata software. – <http://www.cafaq.com/soft/index.php>.
4. *Пискунов С.В., Остапкевич М.Б.* Сайт системы WinALT. – <http://winalt.sccc.ru/>.
5. *Шкловский Б.И., Эфрос А.Л.* Электронные свойства легированных полупроводников. – М.: Наука, 1979. – 416 с.
6. *Гергега А.Н., Выровой В.Н., Дрик Н.Г.* Моделирование внутренних границ как элементов структуры материала / XVII-я межд. конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам. Материалы. – М.: Изд-во МАИ, 2011. – С.57-59.
7. *Гергега А.Н.* Физические аспекты процессов самоорганизации в композитах. 1. Моделирование перколяционных кластеров фаз и внутренних границ // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2013. – Т.19. – №3. – С.406-419.
8. *Oshmyan V.G., Knunyants N.N., Tovmasyan Yu.M., Topolkaev V.A., Manevich L.I.* Theoretical-experimental investigation of the static deformation of particulate composites // Mechanics of Composite Materials. – 1984. – Vol.20. – N3. – P.306-313.
9. *Соколов И.М.* Размерности и другие критические показатели в теории протекания // УФН. – 1986. – Т.150. – Вып.2. – С.221-255.
10. *Гергега А.Н.* Моделирование кластерных структур в материале: силовые поля и дескрипторы // Физическая мезомеханика. – 2013. – Т.16. – №5. – С.87-93.
11. *Овчинников В.В.* Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // УФН. – 2008. – Т.178. – №9. – С.991-1001.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ВЛИЯНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Долгодворов А.В.¹, Докучаев А.Г.¹, Чекалкин А.А.²

¹Уральский научно-исследовательский институт композиционных материалов,
г. Пермь, Россия

²Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
г. Пермь, Россия

РЕЗЮМЕ

Рассмотрен углерод-углеродный материал, где пространственное армирование образовано системой углеродных нитей утка и основы ткани с последующей прошивкой пакета в перпендикулярном направлении высокопрочной низко модульной углеродной нитью. Основные технологические переделы при изготовлении углерод-углеродного композиционного материала включают следующие этапы: получение углепластика, карбонизация углепластика, высокотемпературная обработка карбонизованного углепластика, получение углерод-углеродного композиционного материала.

Одной из актуальных проблем изготовления конструкций из такого материала является размерная стабильность деталей на всех технологических переделах изготовления, при этом, размерная стабильность зависит не только от химических, но и от физических свойств материала.

Физические свойства материала во многом определяется его реальной структурой. В процессе изготовления, происходит переход от одного вида микроструктуры к другому. Пористая структура, образующаяся при карбонизации углепластика, наследует основные особенности исходной структуры углепластика и способствует повышению равномерности распределения пироуглеродной матрицы в объеме материала.

В работе представлены результаты исследования распределения кажущейся плотности, открытой пористости и предела прочности при изгибе в зависимости от толщины материала.

1. ВВЕДЕНИЕ

Рассмотрен углерод-углеродный материал, который получен путем прошивки многослойного тканевого пакета из слоев углеродной ткани полотняного переплетения, наработанной из высоко модульного волокна по основе и утку ткани. Формирование углеродной матрицы выполнено жидкофазным и газофазным методом. Среди отличительных свойств такого материала можно выделить возможность изготовления сложнопрофильных деталей без проведения дополнительной механической обработки [1]. Подобные углерод-углеродные композиты широко применяются в качестве тонкостенных несущих элементов конструкций летательных аппаратов в условиях высокотемпературного внешнего воздействия [2].

Одной из главных задач при создании конструкций из такого материала является обеспечение высокой размерной точности деталей в процессе получения материала [3]. Высокая размерная точность достигается за счёт выбора схемы армирования при изготовлении углеродного каркаса, параметров формования углепластиковой заготовки и использования формосохраняющей оснастки при проведении термохимической обработки на основных этапах технологического цикла [4]. При этом микроструктура углерод-углеродного

композиционного материала оказывает определяющее влияние на физико-механические свойства на всех этапах термохимической обработки и насыщении пироуглеродом [5].

Известно, что физические свойства конструкционных композитов во многом определяются их реальной структурой [6]. В процессе изготовления материала происходит переход от одного вида микроструктуры к другому, при этом пористая структура, образующаяся при карбонизации углепластика, наследует основные особенности исходной структуры углепластика и характеризуется широким спектром величины пор [7], в том числе и определяемые структурой наполнителя [8]. Поры, образованные в процессе карбонизации, способствуют повышению равномерности распределения пироуглеродной матрицы в объеме материала, очевидно, что процесс осаждения пироуглерода в таких разномасштабных порах будет различаться и в конечном итоге определит остаточную пористость и структуру композита [9]. Особенностью процесса газофазного гетерогенного осаждения пироуглерода, является то, что для равномерного заполнения пор материала по толщине, необходимо обеспечить транспорт газа-реагента в срединные слои заготовки [10], что при толщинах заготовок свыше 6мм является проблематичным.

В данной статье проведено исследование углерод-углеродного композиционного материала, полученного по технологии, описанной в статье [11], в части определения распределения плотности материала по толщине в направлении перпендикулярном направлению укладки слоев.

Экспериментально определены физико-химические и прочностные характеристики углерод-углеродного композиционного материала.

2. МЕТОДИКА ПОЛУЧЕНИЯ МАТЕРИАЛА

Объектами исследований были образцы углерод-углеродного композиционного материала. Армирующий каркас композита получен путем прошивки многослойного тканевого пакета из слоев углеродной ткани полотняного переплетения, наработанной из высокомодульного волокна по основе и утку ткани. Для изготовления углеродной ткани полотняного переплетения использованы высокомодульные углеродные нити с модулем упругости 225 ± 20 ГПа и прочностью на растяжение не менее 3,3 ГПа.

Для получения углепластика армирующий каркас пропитан фенолформальдегидным связующим путём погружения в пропиточную кювету с выдержкой 30 минут, после чего был подсушен в течение 120 часов при температуре $T=18-35^{\circ}\text{C}$. Режим полимеризации выполнялся в специальной технологической оснастке для обеспечения необходимых геометрических параметров пластин. Нагрев производился до температуры 130°C в течение 2 часов с выдержкой при конечной температуре 130°C в течение 10 часов. Операция охлаждения выполнялась с произвольной скоростью при температуре 18°C .

Карбонизацию углепластика проводили в защитной атмосфере азота с выдержкой конечной температуре 900°C в течение 8 часов.

Высокотемпературную термообработку проводили в вакууме (остаточное давление не более 1 мм. рт. ст.) при конечной температуре 1850°C в течение 3-х часов.

Уплотнение пироуглеродом вакуумным-изотермическим методом проводили при температуре 950-1050°C в течение 360 часов, с использованием в качестве газа-реагента сетевого газа [10].

Последовательность изготовления углерод-углеродного материала представлена на рис.1.

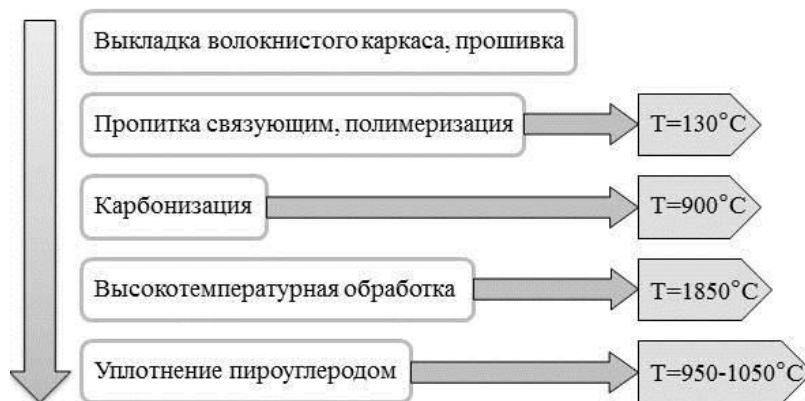


Рис.1. Основные технологические операции получения углерод-углеродного композиционного материала.

3. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА И ИЗГОТОВЛЕНИЯ ОБРАЗЦОВ

Для определения распределения кажущейся плотности и открытой пористости по толщине материала – из пластин углерод-углеродного композиционного материала толщиной 7мм (пластина 1, пластина 2) и 9 мм (пластина 3, пластина 4) изготавливались образцы размерами 50x50 мм, после чего на образцах определяли кажущуюся плотность и открытую пористость. Далее выполнялась механическая обработка - снятие материала шлифовкой на 0,5 мм по толщине с каждой стороны образца, при этом после операции механической обработки определяли кажущуюся плотность и открытую пористость, повторяя эти действия до получения образцов толщиной 3мм.

Для определения зависимости физико-механических характеристик (предела прочности при изгибе) в зависимости от фактической толщины материала из пластин углерод-углеродного композиционного материала толщиной 9 мм (пластина 3, пластина 4) путем механической обработки были изготовлены образцы с толщинами 9, 8, 6, 4,5, 3 мм.

Физико-механические испытания образцов проводились согласно ОСТ 92-1459-77 ÷ ОСТ 92-1461-77 при комнатной температуре.

Для выполнения измерений использовалась универсальная испытательная машина Tira Test с диапазоном нагрузки 0...100 кН и классом точности 1,0.

Кажущуюся плотность и открытую пористость определяли по собственной методике, основанной на методе гидростатического взвешивания на образцах.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРЕДЕЛА ПРОЧНОСТИ ПРИ ИЗГИБЕ, КАЖУЩЕЙСЯ ПЛОТНОСТИ И ОТКРЫТОЙ ПОРИСТОСТИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТОЛЩИНЫ МАТЕРИАЛА

Результаты определения кажущейся плотности в зависимости от толщины материала образца, полученной последовательным снятием слоев материала шлифовкой поверхности углерод-углеродного композиционного материала приведены на рис.2 и 3.

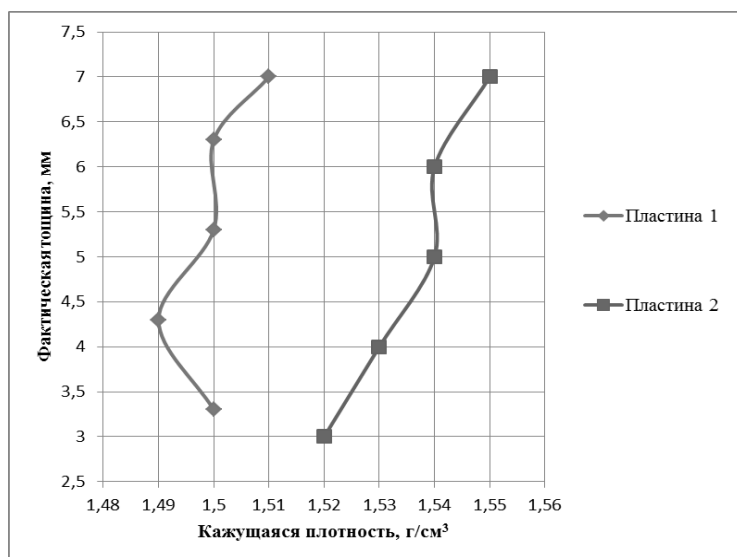


Рис.2. Характерная зависимость кажущейся плотности от толщины пластин с исходной толщиной 7 мм.

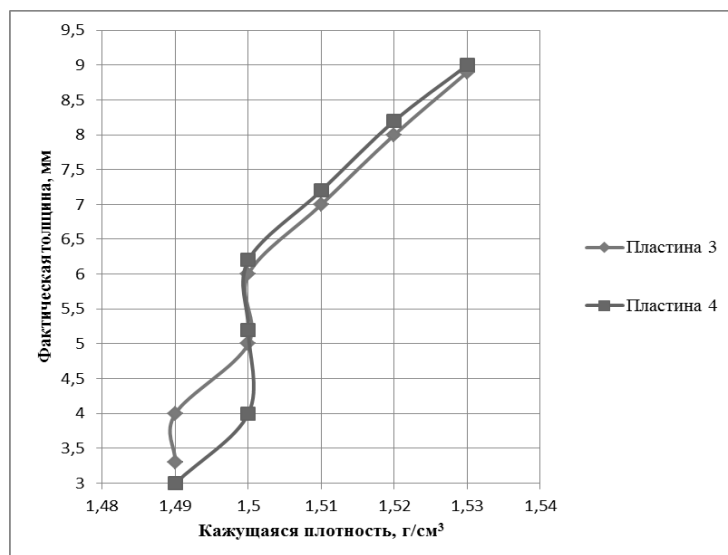


Рис.3. Характерная зависимость кажущейся плотности от толщины для пластин с исходной толщиной 9 мм.

На рис.2 и 3 видна линейная зависимость кажущейся плотности УУКМ от толщины образца на котором она определялась, при шлифовке образца до толщины 3 мм его кажущаяся плотность линейно уменьшается на $0,02 \pm 0,04$ г/см³, что составляет $1,3 \pm 2,6\%$ от его общей кажущейся плотности.

Результаты определения открытой пористости в зависимости от толщины материала образца, полученной последовательным снятием слоев материала шлифовкой поверхности углерод-углеродного композиционного материала приведены на рис.4 и 5.

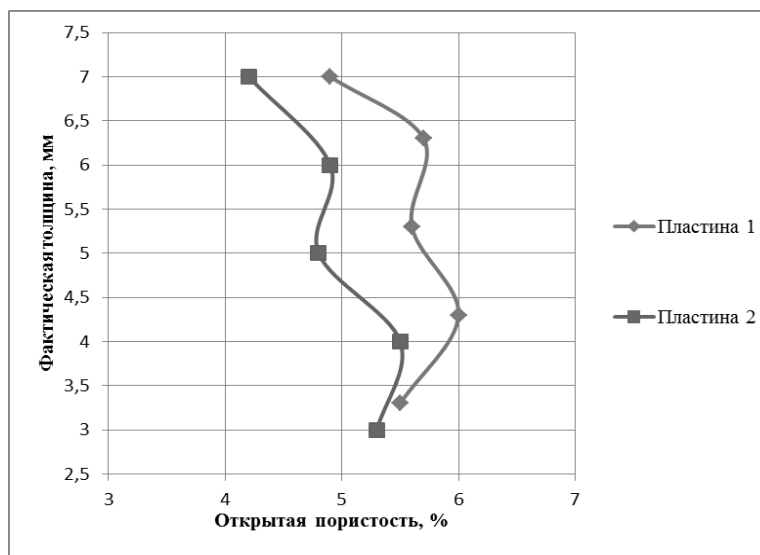


Рис.4. Характерная зависимость открытой пористости от толщины для пластин с исходной толщиной 7 мм.

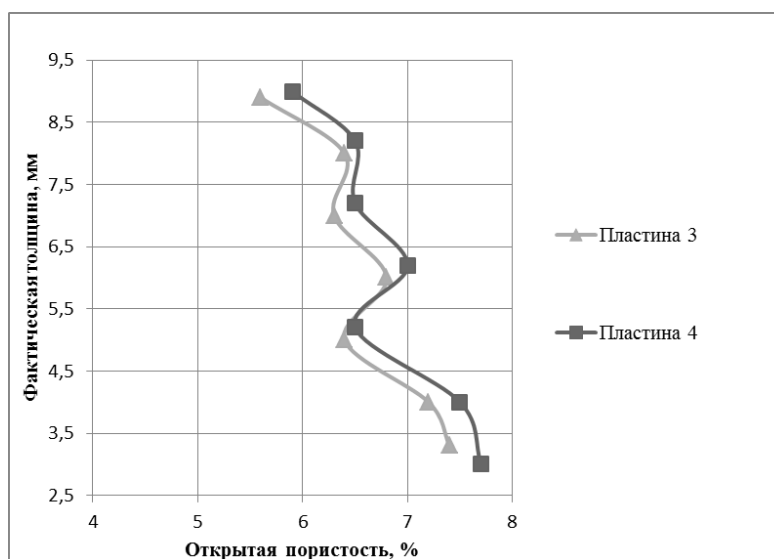


Рис.5. Характерная зависимость открытой пористости от толщины для пластин с исходной толщиной 9 мм.

Анализ рис.4 и 5 позволяет говорить о линейной зависимости открытой пористости углерод-углеродного композиционного материала от толщины образца, на котором она определялась, при шлифовке образца до толщины 3 мм его открытая пористость линейно увеличивается на $1,5 \div 2\%$, что является существенным при исходной открытой пористости около $4,5 \div 5\%$.

Результаты определения предела прочности при изгибе зависимости от толщины материала образца, полученной последовательным снятием слоев

материала шлифовкой поверхности углерод-углеродного композиционного материала приведены на рис.6.

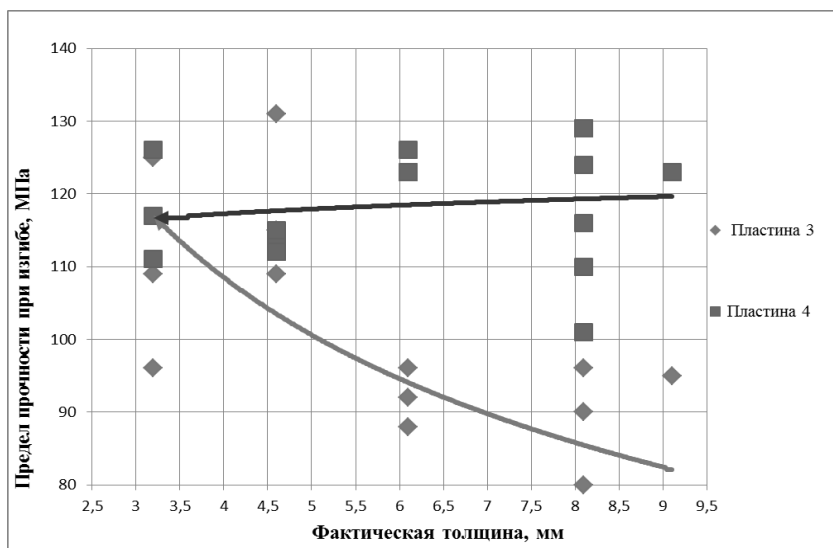


Рис.6. Зависимость предела прочности при изгибе от толщины образца.

Несмотря на изменение открытой пористости и кажущейся плотности УУКМ в результате определения предела прочности при изгибе на образцах после их шлифовки свидетельствуют о том, что показанный выше градиент физико-химических характеристик материала по его толщине существенно не влияет на его физико-механические характеристики. Некоторое увеличение предела прочности при изгибе для образцов, вырезанных из пластины 3, можно предположительно объяснить тем, что при шлифовке по толщине заложенные в пластине на этапе изготовления углепластика расслоения были устранены путем удаления слоев материала.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Углерод-углеродный композиционный материал полученный по описанной технологии имеет незначительный градиент кажущейся плотности по толщине, при этом градиент открытой пористости представляется существенным, что подтверждает описанные выше закономерности процесса изотермического газофазного уплотнения пористых углеграфитовых материалов пиролитическим углеродом.

Прочность исследуемого материала, несмотря на градиент физико-химических характеристик по толщине остается на уровне характеристик исходного материала.

В данном исследовании не была учтена возможное наличие разноплотности материала на этапе изготовления углепластика, что будет являться целью дальнейшей работы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Объектом проведенных исследований являлось исследование физических характеристик углерод-углеродного материала на основе ткани полотняного переплетения, наработанной из высокомодульного волокна по основе и утку

ткани на трёх основных этапах изготовления материала: после получения углепластиковой заготовки, ее последующей термохимической обработки, включающей карбонизацию при 850°C и после уплотнения заготовки пиролитическим углеродом.

Проведены работы по исследованию кажущейся плотности и открытой пористости после уплотнения материала пиролитическим углеродом, проведено исследование распределения кажущейся плотности и открытой пористости по толщине материала методом последовательного снятия слоев материала. Определены физико-механические характеристики углерод-углеродного материала.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Sokolkin Yu.V., Chekalkin A.A., Kotov A.G.* A structural multiscale approach to the design of spatially reinforced carbon-carbon composites // *Mechanics of Composite Materials*. – 1995. – Vol.31. – N2. – P.143-148
2. *Костиков В.И., Варенков А.И.* Сверхвысокотемпературные композиционные материалы. – М.: Интермет. Инжиниринг, 2003. – 574 с.
3. *Morgan P.* Carbon fibers and their composites. – New Western: Tailor&Francis group, 2005. – 1131 p.
4. *Коротаев А.Д., Мошков В.Ю., Овчинников С.В. и др.* Наноструктурные и нанокompозитные сверхтвердые покрытия // *Физическая мезомеханика*. – 2005. – Т.8. – №5. – С.103-116.
5. *Ташкинов А.А., Шавшуков В.А.* Микромеханическое моделирование и экспериментальное определение физико-механических свойств углерод-углеродных и углерод-керамических композиционных материалов // *Перспективные материалы*. – 2010. – С.213-219.
6. *Черноус Д.А., Шилько С.В., Панин С.В.* Анализ механического поведения дисперсно-армированного нанокompозита. Метод расчета эффективных упругих характеристик. // *Физическая мезомеханика*. – 2010. – Т.13. – №4. – С.85-90.
7. *Кулик В.И., Борковских В.А., Борковских Н.Н. и др.* Структурные и физико-механические характеристики уплотненных пироуглеродом углерод-углеродных композиционных материалов на основе тканевых наполнителей // *Вопросы материаловедения*. – 2006. – №3. – С.70-77.
8. *Antsiferov V.N., Babushkin A.V., Sokolkin Yu.V., Shatsov A.A., Chekalkin A.A.* Features of powder material deformation with cyclic loading // *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. – 2001. – Т.40. – N11-12. – С.569-572.
9. *Fizer E., Manocha L.M.* Carbon reinforcements and carbon/carbon composites. – Berlin: Springer, 2008. – 342 p.
10. *Докучаев А.Г., Бушуев В.М.* Выбор технологических параметров процесса уплотнения пироуглеродом вакуумным изотермическим методом карбонизованного углепластика при разработке углеродной основы под силицирование // *Перспективные материалы*. – 2010. – №9а. – С.58-64.
11. *Долгодворов А.В., Докучаев А.Г., Судюков П.А., Чекалкин А.А.* Исследование микроструктуры углерод-углеродного композита 2D+1 при термохимической обработке и насыщении пироуглеродом // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. – 2013. – Т.79. – №12. – С.31-33.

ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ВИСКЕРСОВ НА ЭФФЕКТИВНЫЙ ПРОДОЛЬНЫЙ МОДУЛЬ СДВИГА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, АРМИРОВАННЫХ ВИСКЕРИЗОВАННЫМИ ВОЛОКНАМИ*

Лурье С.А.^{1,2}, Минат М.^{2,3}

¹*ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия*

²*ФГБУ «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)», г. Москва, Россия*

³*УниКЛ – Малазийский авиационный институт технологии, г. Денгкил, Малайзия*

РЕЗЮМЕ

В настоящей работе, исследуется эффективный модуль продольного сдвига композиционных материалов, армированных по поверхности волокон или слоев, дополнительной структурой в виде вискеризованных волокон. Рассматривается также влияние характеристик вискерсов, перпендикулярно выращенных на поверхности волокна на продольный модуль сдвига композита. Наши результаты показывают, что из-за присутствия вискеризованных волокон, эффективный продольный модуль сдвига таких композитов может быть повышен. Показано также, что такие параметры как длина и плотность вискерсов оказывает значительное влияние на модуль сдвига композитов. В работе дается сравнение результатов моделирования эффективных свойств рассматриваемого композита, выполненных с помощью метода Эшелби с результатами, полученными методом комплексных потенциалов. Показано, что метод Эшелби представляется более точным фактически для всего возможного диапазона объемных содержаний армирующих волокон.

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что механические свойства композитов зависят от условий контакта между волокном и матрицей (характеристики интерфейса) в композите [1]. Влияние структуры в области контакта фаз оказывается особенно значительным на сдвиговые характеристики. В настоящее время активно развиваются технологии получения современных волокнистых систем, в которых для повышения сдвиговых свойств композита на круговой поверхности углеродных волокон выращены специальные микроструктуры, содержащие нановолокна (вискерсы) – нанопроволоки и углеродные нанотрубки (волокно «фуззи»). Проведенные исследования [2,3]. Доказали, что для подобных систем существенно повышается прочность межфазной границы (интерфейса) на сдвиг между волокном и матрицей. Т.е. для композиционных материалов с вискеризованными волокнами реализуется более высокая предельная прочность и жесткость на сдвиг [2,3] по сравнению типовыми композитами, не имеющими дополнительную микроструктуру на поверхности волокон.

На рис.1 показан вискеризованный волокнистый композит для однонаправленного монослоя. Композиционная структура состоит из двух компонент и определяется с одной стороны вискеризованным волокном, а с другой – полимерной матрицей. Из-за наличия микро- или нановолокон (вискерсов или щетин), такой композит имеет дополнительный межфазный слой

* Работа поддерживается грантами РФФИ 12-01-00273 и 13-01-00872.

между волокном и матрицей и поэтому такие материалы с точки зрения микромеханики можно отнести к волокнистым многофазным композитам.

Далее в разделах 2 и 3 приводятся результаты моделирования эффективного продольного модуля сдвига, найденного методом трех фаз Эшелби и методом комплексных потенциалов. В разделе 4 будет дано сравнение результатов моделирования и будут сделаны выводы о диапазонах применимости метода потенциалов.

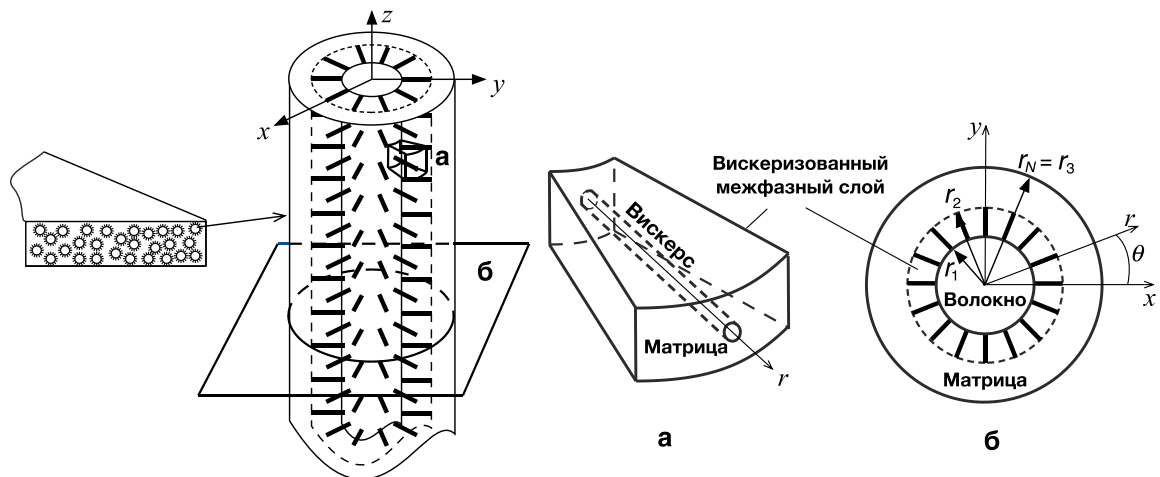


Рис.1. Однонаправленный вискеризованный волокнистый композит. Ячейка: а) вискеризованного межфазного слоя, б) вискеризованного композита.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ МОДУЛЬ ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА ВОЛОКНИСТОГО ВИСКЕРИЗОВАННОГО КОМПОЗИТА. МЕТОД ТРЕХ ФАЗ ЭШЕЛБИ

Чтобы определить продольный модуль сдвига таких композитов, необходимо сначала найти эффективные свойства вискеризованного межфазного слоя, который состоит из вискерсов и матрицы.

Одной из характеристик межфазного слоя является объемная доля вискерсов c_b в межфазном слое [4]:

$$c_b = \frac{M_b^2 d_b^2}{4\pi(l_b + D)D}, \quad (1)$$

где M_b – число вискерса на поверхности волокна; d_b – диаметр вискерса; l_b – длина вискерса; и D – диаметр волокна.

Плотность вискерсов ρ_b связана с числом вискерсов, выращенных на единичной поверхности волокна. Однако для простоты определяем, что плотность вискерсов представляет собой отношение числа вискерсов, выращенных на окружности волокна к максимально допустимому числу вискерсов, умещающихся на поверхности волокна. Запишем это отношение в процентах: $\rho_b = (M_b / M_b^{\max}) 100\%$, где M_b^{\max} – максимально возможное число вискерсов, выращенных на окружности волокна. Видно, что свойства межфазного слоя зависят от плотности, длины, диаметра и свойства вискерса.

После получения концентрации вискерсов, для определения эффективных свойств межфазного слоя используются известные формулы самосогласованного метода Эшелби (метод трех фаз). Соответствующие соотношения

для эффективных свойств вискеризованного межфазного слоя приведены в работе [5].

Получив свойства этого слоя, переходим к определению эффективных свойств вискеризованных волокнистых композитов. В соответствии с процедурой Эшелби-Кристенсена, рассматривается изолированное многослойное волокнистое включение (рис.1), строятся решения для всех элементов слоистой структуры, выполняются условия контакта и условие самосогласования Эшелби. Для многофазных композитов с ортотропными фазами, метод Эшелби дает следующую формулу для эффективного модуля продольного сдвига [4]:

$$\mu_{23}^{eff} = \frac{1}{2\varepsilon_0} C_{55}^{(N)} \left(\lambda_{(N)} A_1^{(N)} r_N^{\lambda_{(N)}-1} + (-\lambda_{(N)}) A_2^{(N)} r_N^{-\lambda_{(N)}-1} \right), \quad (2)$$

где $A_1^{(N)}$ и $A_2^{(N)}$ – постоянные, которые находятся из системы алгебраических уравнений, включающих интегральную формулу Эшелби, и соотношения, обеспечивающие несингулярность решения в центре волокна (для $N=1$), а также условия непрерывности напряжений и перемещений на границах волокна и межфазного слоя, межфазного слоя и матрицы, и, наконец, условия затухания напряжений на бесконечности. $C_{55}^{(N)}$ – компонент тензора жесткости внешнего слоя; r_N – радиус внешнего слоя от начала; $\lambda_N = \sqrt{C_{44}^{(N)}/C_{55}^{(N)}}$ – констант материала внешнего слоя и для изотропной матрицы, $\lambda_N=1$; и можно принять ε_0 единицей.

3. МЕТОД КОМПЛЕКСНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ. ЭФФЕКТИВНЫЙ МОДУЛЬ ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА

В методе, предположенном работе [6], элементарная ячейка выделенного объема композита рассматривается в предположении, что волокна периодически располагаются в матрице с квадратичной упаковкой. Ключевой особенностью аналитической процедуры, основанной на введении метода комплексных потенциалов Мухелишвили, является использование потенциальных функций, и их разложений Тейлора, Лорана и Вейерштрасса. Аналитическое решение при таком подходе можно получить в случае, если окончательные выражения для средних напряжений вычисляются с использованием контура окружности. Используем соотношение закона Гука, дает здесь следующее выражение для оценки эффективного модуля продольного сдвига [6]:

$$\mu^{eff} = \mu^{(3)} \frac{c_{(3)} + 2c_{(2)} + c_{(3)} \left(\mu^{(3)}/\mu^{(2)} \right) + \frac{4c_{(1)}}{1 + \left(\mu^{(2)}/\mu^{(1)} \right)}}{c_{(3)} - (2 - c_{(3)}) \left(\mu^{(3)}/\mu^{(2)} \right)}, \quad (3)$$

где $\mu_{(j)}$ – модули продольного сдвига фаз и $c_{(j)}$ – объемные доли фаз композита.

4. СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ. ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВИСКЕРИЗОВАННОГО СЛОЯ

Рассматривается волокнистый композит, который состоит из углеродных волокон, вискеризованных нано-проволокнами цинка оксида (ZnO) и эпоксидной матрицы. Характеристики композита определяются следующими параметрами [4]: диаметр волокна – 5,2 мкм, и длиной и диаметром вискерса являются 500 нм и 50 нм соответственно. Поверхности волокон полно окружены вискерсами

(плотности – 100%) и объемная доли вискерсов в вискеризованном межфазном слое – 71%. Материальные характеристики композитов даны в Табл.1.

Таблица 1.

Параметры материалов в вискеризованном волокнистом композите [4].

Углеродное волокно	Эпоксидная матрица	Вискерс - ZnO
$E_L=256,76$ ГПа	$E=2,9$ ГПа	$E=140$ ГПа
$E_L=25,51$ ГПа	$\nu=0,3$	$\nu=0,35$
$\mu_L=22,06$ ГПа		
$\mu_T=9,25$ ГПа		
$\nu_L=0,289$		

На рис.2 представлены зависимости эффективного модуля продольного сдвига, зависящий от концентрации вискеризованного волокна в композите, который состоит из углеродных волокон, вискеризованных нанопроволокнами цинка оксида (ZnO) и эпоксидной матрицы. Для сравнения приводятся результаты моделирования, полученные методом Эшелби (см. (2)) и методом комплексных потенциалов (3).

Результаты моделирования методом Эшелби показывают, что из-за наличия вискеризованного волокна, продольный модуль сдвига существенно возрастает. При объемном содержании волокна $V_f=50\%$, модуль сдвига такого композита увеличивается примерно на 53% по сравнению с композитом без вискеризованного межфазного слоя.

Сравнение результатов найденных методом Эшелби и методом потенциалов, предложенным в работах [6], показывает, что метод потенциалов следует применять с большой осторожностью, ибо он дает приемлемые результаты только при очень низкой концентрации волокон в композите. Методом потенциалов можно пользоваться, если концентрация волокон не превышает 0.05%. Действительно, это соответствует и утверждениям авторов работы [6] о том, что их модель применима только для композитов, которые имеет толстый вискеризованный межфазный слой. Для толстого межфазного слоя объемная доля волокон в представительном элементе будет низкой. Следовательно, модель (3) применима для случая весьма низкой концентрации волокон и, что существенно, не учитывает толщины межфазного слоя.

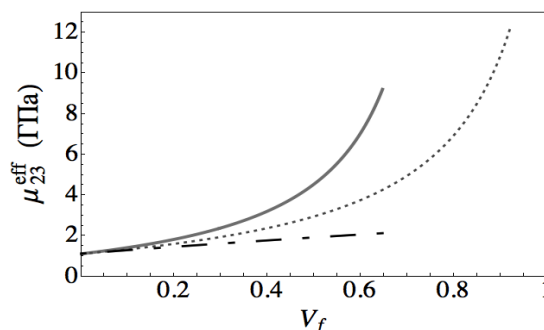


Рис.2. Зависимость μ_{23}^{eff} от объемной доли волокон; сплошная линия соответствует методу Эшелби, штриховая линия соответствует методу, основанному на использовании комплексных потенциалов, пунктирная линия соответствует композиту без вискеризованного межфазного слоя.

Далее приводятся результаты, показывающие влияние характеристик межфазного слоя на эффективные свойства вискеризованных волокнистых композитов. Следует отметить, что максимальная допустимая объемная доля волокон в вискеризованном волокнистом композите всегда меньше максимальной концентрации волокон в обычном композите. Это является особенностью данной модели, в которой длина вискерса (или толщина вискеризованного межфазного слоя) ограничивает максимальную допустимую концентрацию волокон в композите. Тем не менее, на рис.2 максимальная объемная доли волокон в этой конкретной конфигурации композита ограничена на 0.64.

На рис.3 представлены зависимости, иллюстрирующие влияние длины, плотности, диаметра и типа материала вискерсов в вискеризованном межфазном слое. Зависимости рис.3.а показывают, что длина вискерсов сильно влияет на эффективный продольный модуль сдвига именно тогда, когда длина вискерсов достигает значений, близких к предельным, максимально допустимым длинам, особенно при большой объемной доле. Это связано с большой объемной долей вискеризованного межфазного слоя и меньшей объемной долей матрицы в ячейке при постоянной концентрации волокон. Поскольку эффективные свойства вискеризованного межфазного слоя выше свойств матрицы, то, следовательно, и композит, в котором межфазный слой имеет значительную длину вискерсов, имеет больший модуль сдвига, чем композит без вискерсов.

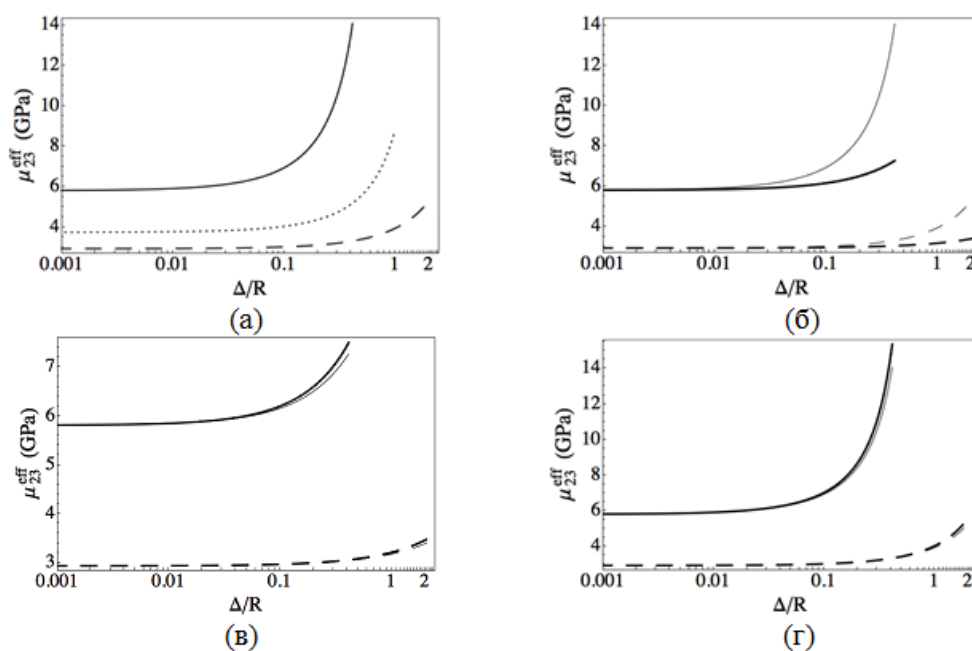


Рис.3. Зависимость μ_{23}^{eff} от концентрации волокон (V_f : прямая линия – 50%, пунктирная – 25%, и штриховая – 10%) и от характеристики вискерсов в вискеризованном межфазном слое: (а) длина, $\Delta = r_2 - r_1$ [$\rho_b = 100\%$, $d_b = 20\text{nm}$, ZnO NWs]; (б) плотность: толстая линия – $\rho_b = 50\%$, тонкая – $\rho_b = 100\%$ [$d_b = 20\text{nm}$, ZnO NWs]; (в) диаметр: толстая линия – 200 nm, тонкая – 20 nm [$\rho_b = 50\%$, ZnO NWs], и (г) тип материала: толстая линия – УНТ, тонкая – ZnO NWs [$\rho_b = 100\%$, $d_b = 20\text{nm}$]. Диаметр волокна, $r_1 = R = 5.2 \mu\text{m}$.

Кривые рис.3(б) демонстрируют, что эффект плотности вискерсов также может быть существенным для эффективного продольного модуля сдвига

композита. При уменьшении плотности вискерсов с 100% до 50%, величина модуля сдвига существенно уменьшается особенно в случаях, когда длина вискерсов и концентрация волокон являются значительными. Согласно уравнению (1), уменьшение плотности вискерсов приводит к уменьшению объемной доли вискерсов в вискеризованном межфазном слое и поэтому, эффективные свойства межфазного слоя уменьшаются. Это уменьшение является настолько большим, что оно не может быть скомпенсировано увеличением длины вискерсов.

Графики, приведенные на рис.3(в), указывают на незначительность эффекта влияния диаметра вискерсов. Однако, как следует из (1), при увеличении диаметра, концентрация вискерсов в межфазном слое повышается и поэтому величина модуля сдвига возрастает, хотя и немного.

Интересный факт следует отметить в связи с оценкой влияния свойств вискерсов в межфазном слое. Так, несмотря на то, что свойства углеродных нанотрубок (УНТ) значительно выше свойств нано-проволок оксида цинка, не следует ожидать значительного увеличения эффективного модуля сдвига композита с УНТ в межфазном слое (фуззи системы) по сравнению с композитом, в котором вискеризация обеспечивается нано-проволокой оксида цинка (рис.3(г)).

ВЫВОДЫ

В работе предлагается использовать метод самосогласованного поля Эшелби для определения эффективного продольного модуля сдвига композиционных материалов, армированных вискеризованными волокнами. Показано, аналитические зависимости, которые удается при этом использовать для оценки эффективных свойств композитов, являются хорошей основой для моделирования и оптимизации структур вискеризованных волокнистых композитов.

Показывается, что присутствие вискерсов, приводит к увеличению модуля продольного сдвига композитов. Установлено, что длина и плотность вискерсов значительно влияет на величину продольного модуля сдвига композитов, а диаметр и тип материала вискерсов влияет на эффективные свойства незначительно.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Василиев В.В., Тарнопольский Ю.М.* Композиционные материалы. Справочник – М.: Машиностроение, 1990. – 512 с.
2. *Lin Y., Ehlert G.J., Sodano H.A.* Increase interface strength in carbon fiber composites through a ZnO nanowires interphase // *Adv. Funct. Mater.* – 2009. – Vol.19. – N16. – P.2654-2660.
3. *Sager R.J., Klein P.J., Lagoudas D.C., Zhang Q., Liu J., Dai L., Baur J.W.* Effect of carbon nanotubes on the interfacial shear strength of T650 carbon fiber in an epoxy matrix // *Compos. Sci. Technol.* – 2008. – Vol.69. – P.898-904.
4. *Lurie S., Minhat M.* Application of generalized self-consistent method to predict effective elastic properties of bristled fiber composites // *Composites: Part B.* – 2014. – Vol.61. – P.26-40.
5. *Кристенсен Р.М.* Введение в механику композитов. – М.: Мир, 1982. – 334 с.

6. *Guz I.A., Rodger A.A., Guz A.N., Rushchitsky J.J.* Predicting the properties of micro- and nanocomposites: From the microwhiskers to the bristled centipedes // *Phil. Trans. R. Soc. A.* – 2008. – Vol.386. – P.1827-1833.

О МАСШТАБНОЗАВИСИМЫХ МОДЕЛЯХ СТЕРЖНЕЙ В ГРАДИЕНТНОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ*

Лурье С.А.¹, Попова Е.И.², Лыкосова Е.Д.¹, Бабайцев А.В.²

¹ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

²ФГБУ Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

В представленной работе строятся неклассические модели теории стержней, которые учитывают влияние масштабных параметров структуры материалов. Неклассические модели стержней строятся на основе простейшей градиентной теории, которая предназначена для учета масштабных эффектов в механике деформируемых сред. Дается вариационная формулировка градиентных теорий и приводится краткий анализ градиентных моделей Миндлина. Формулируется принцип симметрии, который является условием корректности модели. Предлагается простейший новый вариант корректной градиентной теории упругости, в рамках которой строится модель стержней Тимошенко и как частный случай модель стержней Бернулли. Установлено, что масштабные эффекты локализуются в окрестностях торцов стержней и, следовательно, учет масштабных эффектов не дает поправки в изгибную жесткость для длинных стержней, как это ошибочно утверждалось ранее.

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к особенностям деформирования тонких структур напрямую связан с перспективами развития высокочувствительной аппаратуры, средств микроэлектроники, новых технологий физических исследований. В таких структурах толщина исследуемых элементов может становиться соизмеримой с характерными размерами микроструктуры материала. Актуальной становится проблема учета масштабных эффектов, под которыми понимаются явления, состоящие в зависимости физических свойств материала от характерного размера микроструктуры материала, а также явления возрастания вклада поверхностных процессов по сравнению с объемными. В настоящее время значительный интерес проявляется к учету масштабных факторов, то есть к учету параметров характеризующих структуру материала в прикладных задачах теории упругости. Масштабные эффекты нашли экспериментальное подтверждение при исследовании изгибной жесткости консольных стержней из алюминия, полипропилена и эпоксидной смолы [1-3]. Подобные эффекты не могут быть учтены при использовании классической теории упругости, которая не принимает во внимание масштабные параметры. Наоборот, градиентные теории включают дополнительные параметры размерности длины и вполне подходят для моделирования масштабных эффектов.

В настоящее время существует много публикаций, посвященных анализу деформаций стержней с учетом масштабных эффектов. Отметим здесь некоторые недавние типичные работы в этой области [4,5] где для построения неклассической теории стержней использованы градиентные модели первого порядка (модели типа Гао-Айфантиса [6]).

* Работа поддерживается грантами РФФИ 12-01-00273 и 13-01-00872.

Целью написания данной статьи является вывод уравнений равновесия для стержней Тимошенко в градиентной упругости. Исследуются вариационные градиентные модели сред, дается краткий анализ градиентных теорий упругости и указывается на свойства симметрии тензора градиентных модулей упругости, которые можно считать критерием корректности. Предлагается вариант простейшей однопараметрической полностью симметричной градиентной теории. Показывается, что использование формальной кинематики теории стержней позволяет вывести уравнения неклассической масштабно-зависимой теории стержней Тимошенко, которая соответствует и условию согласованности кинематики в прикладных теориях стержней и пластин [7-9].

2. ГРАДИЕНТНЫЕ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ, УСЛОВИЕ СИММЕТРИИ

Рассмотрим вариационную постановку модели Миндлина. Лагранжиан имеет вид:

$$E = \frac{1}{2} \int C_{ijkl} R_{i,j} R_{k,l} dV + \frac{1}{2} \int C_{ijklmn} R_{i,jk} R_{l,mn} dV - \int f_i R_i dV - \oint (t_i R_i + q_i R_{i,j} n_j) dS, \quad (1)$$

Легко получить вариационное уравнение:

$$\delta E = \int \sigma_{ij} \delta R_{i,j} dV + \int \mu_{ijk} \delta R_{i,jk} dV - \int f_i \delta R_i dV - \oint [t_i R_i + q_i \delta(R_{i,j} n_j)] dS = 0, \quad (2)$$

которое определяет полностью вид уравнений равновесия и граничных условий. Напряжения и моментные напряжения определяются по потенциальной энергии (1) уравнениями Грина:

$$\sigma_{ij} = \partial E / \partial R_{i,j}, \quad \mu_{ijk} = \partial E / \partial R_{i,jk},$$

и соответственно имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijkl} R_{k,l}, \quad \mu_{ijk} = C_{ijklmn} R_{l,mn}, \\ \sigma_{ij} &= \lambda \delta_{ij} \theta + \mu (R_{i,j} + R_{j,i}). \end{aligned} \quad (3)$$

Для изотропных тел тензор классических модулей упругости имеет обычный вид $C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$, а тензор неклассических градиентных модулей (шестого ранга) имеет в общем следующую структуру:

$$\begin{aligned} C_{ijklmn} &= C_1 \delta_{ij} \delta_{kl} \delta_{mn} + C_2 \delta_{ij} \delta_{km} \delta_{ln} + C_3 \delta_{ij} \delta_{kn} \delta_{lm} + C_4 \delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{mn} + C_5 \delta_{ik} \delta_{jm} \delta_{ln} + \\ &+ C_6 \delta_{ik} \delta_{jn} \delta_{lm} + C_7 \delta_{il} \delta_{jk} \delta_{mn} + C_8 \delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn} + C_9 \delta_{il} \delta_{jn} \delta_{km} + C_{10} \delta_{im} \delta_{jk} \delta_{ln} + \\ &+ C_{11} \delta_{im} \delta_{jl} \delta_{kn} + C_{12} \delta_{im} \delta_{jn} \delta_{kl} + C_{13} \delta_{in} \delta_{jk} \delta_{lm} + C_{14} \delta_{in} \delta_{jl} \delta_{km} + C_{15} \delta_{in} \delta_{jm} \delta_{kl} \end{aligned} \quad (4)$$

Тензоры градиентных модулей упругости (4) должны удовлетворять условиям потенциальности:

$$C_{ijklmn} = C_{lmnijk}. \quad (5)$$

Отметим одно важное обстоятельство. В градиентной теории упругости $\delta R_{i,jk} = \delta R_{i,jk}$. Это соответствует условию существования непрерывных дисторсий $R_{i,j}$. Следовательно, в градиентной теории упругости для того, чтобы не существовало "паразитных" решений тензор моментных напряжений $\mu_{ijk} = C_{ijklmn} R_{l,mn}$ должен быть представлен только своей симметричной частью по двум последним индексам $\hat{\mu}_{ijk} - \mu_{ijk} = (1/2)(\mu_{ijk} + \mu_{ikj}) + (1/2)(\mu_{ijk} - \mu_{ikj}) = \hat{\mu}_{ijk} + \tilde{\mu}_{ijk}$, так как несимметричная часть этого тензора остается энергитически невидимой. Таким образом корректная градиентная теория, не имеющая "паразитных"

составляющих, должна подчиняться условиям $\mu_{ijk} = \hat{\mu}_{ijk}$, $\tilde{\mu}_{ijk} = 0$. Это сразу приводит к следующим требованиям независимости от порядка дифференцирования (симметричности) для тензора градиентных моделей упругости (симметрия по второму – третьему и пятому-шестому индексам):

$$C_{ijklmn} = C_{ijklnm} \quad (6)$$

После учета свойства потенциальности и независимости от порядка дифференцирования в (4) получим:

$$\begin{aligned} C_{ijklmn} = & C_1 (\delta_{ij} \delta_{kl} \delta_{mn} + \delta_{in} \delta_{jk} \delta_{lm} + \delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{mn} + \delta_{im} \delta_{jk} \delta_{ln}) + \\ & + C_2^{11} (\delta_{ij} \delta_{km} \delta_{ln} + \delta_{ik} \delta_{jn} \delta_{lm} + \delta_{ij} \delta_{kn} \delta_{lm} + \delta_{ik} \delta_{jm} \delta_{ln}) + \\ & + C_7 \delta_{il} \delta_{jk} \delta_{mn} + C_8 (\delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn} + \delta_{il} \delta_{jn} \delta_{km}) + \\ & + C_{11} (\delta_{im} \delta_{jl} \delta_{kn} + \delta_{im} \delta_{jn} \delta_{kl} + \delta_{in} \delta_{jl} \delta_{km} + \delta_{in} \delta_{jm} \delta_{kl}) \end{aligned} \quad (7)$$

В результате, в корректной градиентной теории упругости, построенной с учетом условий симметрии, следующие выражения для моментных напряжений:

$$\begin{aligned} \mu_{ijk} = & C_1 (\delta_{ij} \nabla^2 R_k + \delta_{ik} \nabla^2 R_j + 2\delta_{jk} \theta_{,i}) + 2C_2 (\delta_{ij} \theta_{,k} + \delta_{ik} \theta_{,j}) + \\ & + C_7^{11} \delta_{jk} \nabla^2 R_i + 2C_8 R_{i,jk} + 2C_{11} (R_{k,ij} + R_{j,ki}) \end{aligned} \quad (8)$$

Особенность этой модели, состоит в том, что:

$$\mu_{ijk} = \mu_{ikj} \quad (9)$$

Последнее условие симметрии является важным признаком корректности модели.

Нетрудно убедиться, что в результате подстановки (7), (8) в (2) для градиентной симметричной модели можно получить:

$$\begin{aligned} \mu \nabla^2 \mathbf{R} + (\mu + \lambda) \nabla \theta - \nabla^2 [(C_7 + 2C_8) \nabla^2 \mathbf{R} + 4(C_1 + C_2 + C_{11}) \nabla \theta] + \mathbf{f} = 0, \\ \theta = \text{div } \mathbf{R} \end{aligned}$$

Записанные уравнения равновесия можно переписать в координатной форме:

$$\begin{aligned} H_{ij} L_{jk} R_k + f_k = 0, \\ H_{ij} = \delta_{ij} - l_1^2 \delta_{ij} \nabla^2 - l_2^2 \partial_i \partial_j \\ l_1^2 = (C_7 + 2C_8) / \mu, \\ l_2^2 = [4\mu(C_1 + C_2 + C_{11}) - (\lambda + \mu)(C_7 + 2C_8)] / [\mu(\lambda + 2\mu)] \end{aligned} \quad (10)$$

Обсудим кратко простейшую теорию, предложенную в работе [6]. Эта модель определяется следующей потенциальной энергией:

$$\bar{E} = l^2 \left[\frac{1}{2} \lambda \theta_{,k} \theta_{,k} + \mu \varepsilon_{ij,j} \varepsilon_{ik,k} \right]$$

Нетрудно проверить, что эта модель в общем случае некорректна, ибо для нее не выполняется условие $\mu_{ijk} = \mu_{ikj}$. Справедливости ради, следует сказать, что пока неясно насколько существенными могут оказаться поправки, если вместо некорректной использовать корректную градиентную теорию. Для этого должна быть решена серия тестовых задач.

3. УРАВНЕНИЯ НЕКЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ СТЕРЖНЕЙ

Рассмотрим изгиб полосы $0 \leq x \leq L$, $-h \leq y \leq h$, $h \ll L$, единичной толщины $b=1$. Считаем полосу (стержень) изгибается под действием поперечной нагрузки, приложенной на верхней $y=h$ и нижней $y=-h$ границах полосы.

Построим вариант неклассической теории стержней в градиентной упругости, т.е. установим кинематику стержней, найдем обобщенные силовые факторы – усилия и моменты, определим физические соотношения и уравнения равновесия.

Рассмотрим вариацию потенциальной энергии градиентной упругости:

$$\delta\Pi = \int [\sigma_{ij} \delta R_{i,j} + \mu_{ijk} \delta R_{i,jk}] dV \quad (11)$$

Проводя интегрирование по частям, получим, как нетрудно убедиться, следующее выражение, определяющее уравнения равновесия как уравнение Эйлера (слагаемые, определяющие естественные граничные условия опустим):

$$\int [(\sigma_{ij} - \mu_{ijk,k})_{,j} \delta R_i] dV \quad (12)$$

Рассмотрим теперь плоское напряженно-деформированное состояние, полагая равными нулю все компоненты R_3 и вводя обозначения $r_1 \equiv R_1$, $r_2 \equiv R_2$. Все выражения, где имеются производные по координате x_3 , также полагаются равными нулю. В дальнейшем будем рассматривать плоскую постановку для прямоугольных областей, ограниченных прямыми линиями в координатах $x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$, $0 \leq x \leq L$, $-h \leq y \leq h$, $h \ll L$. Наконец, введем следующие обозначения для выражений компонент обобщенных напряжений, входящих одинаковым образом и в уравнения равновесия (см. (12)) и, как можно убедиться, в статические краевые условия при вариационной формулировке рассматриваемых задач:

$$\begin{aligned} t_{11} &= \sigma_{11} - (\mu_{111,1} + \mu_{112,2}), \\ t_{12} &= \sigma_{12} - (\mu_{121,1} + \mu_{122,2}), \quad t_{22} = \sigma_{22} - (\mu_{221,1} + \mu_{222,2}) \end{aligned} \quad (13)$$

Введенные так компоненты напряжений можно условно назвать "классическими" составляющими тензора напряжений, так как при статических краевых условиях краевая задача, записанная в терминах t_{ij} , полностью совпадает с классической постановкой. Запишем для плоской задачи следующие равенства:

$$\int [(\tau_{ij} + \mu_{ijk,k})_{,j} \delta r_i] dV = 0, \quad i = 1, 2. \quad (14)$$

Эти уравнения можно трактовать как соотношения, следующие из принципа возможных перемещений. Они соответствуют постулату о том, что в положении равновесия возможная работа внутренних сил равна нулю (считается, что внешние силы, распределенные по объему равны нулю). Учитывая равенства (13) равенства (14) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} & \int [(\sigma_{ij} - \mu_{ijk,k})_{,j} \delta r] dV = \\ & = \iint \left[\underbrace{(\sigma_{11,1} - \mu_{111,11} - \mu_{112,12})}_{\partial t_{11} / \partial x} + \underbrace{(\sigma_{12,2} - \mu_{121,21} - \mu_{122,22})}_{\partial t_{12} / \partial y} \right] \delta r_1 + \end{aligned} \quad (15)$$

$$\left. \begin{aligned} & + \underbrace{(\sigma_{21,1} - \mu_{211,11} - \mu_{212,12})}_{\partial t_{21} / \partial x} + \underbrace{(\sigma_{22,2} - \mu_{221,21} - \mu_{222,22})}_{\partial t_{22} / \partial y} \delta r_2 \end{aligned} \right\} dx dy$$

Отметим, что статические граничные условия при $y = \pm h$ записываются на компоненты "классических" компонент напряжений:

$$t_{12}|_{y=\pm h} = 0, \quad t_{22}|_{y=\pm h} = p^\pm. \quad (16)$$

В справедливости соотношений (16) можно убедиться, если записать функционал Лагранжа с потенциальной энергией (11), и записать принцип Лагранжа, проводя процедуру интегрирования по чческие соотношения для теории стержней, беря в качестве основы кинематику стержней типа Тимошенко, позволяющую учесть в среднем деформацию сдвига:

$$\begin{cases} r_1 = u(x) + \theta y \\ r_2 = w(x) \end{cases}. \quad (17)$$

В этом случае компоненты дисторсий имеют вид:

$$\begin{aligned} r_{1,1} = \varepsilon_1 = u'(x) + \theta' y, \quad r_{1,2} = \theta, \quad r_{2,1} = w', \quad r_{2,2} = 0, \\ \varepsilon_1 = r_{1,1}, \quad \varepsilon_{12} = r_{1,2} + r_{2,1} = \theta + w' \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь ε_1 , ε_{12} – деформация растяжения-сжатия и деформация среднего сдвига.

Выражения для кривизн, соответственно представляются следующими равенствами:

$$\begin{aligned} r_{1,11} = u''(x) + \theta'' y, \quad r_{1,12} = \theta', \quad r_{1,22} = 0, \\ r_{2,11} = w'', \quad r_{2,21} = r_{2,12} = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Проинтегрируем равенство (15) по y . Учтем (17) и краевые условия (16). Получим:

$$\int_0^L [\partial N / \partial x] \delta u \, dx + \int_0^L [\partial M / \partial x - Q] \delta \theta \, dx + \int_0^L [\partial F / \partial x + (p^+ - p^-)] \delta w \, dx = 0, \quad (20)$$

где

$$N = \int_{-h}^h t_{11} dy, \quad Q = \int_{-h}^h t_{12} dy, \quad F = \int_{-h}^h t_{21} dy, \quad M = \int_{-h}^h t_{11} y dy$$

Отметим, что в общем случае для градиентных моделей $Q \neq F$, т.е. по классификации прикладных теорий стержней, приведенной в работах [7-9] кинематика (17) не является согласованной, которая могла бы обеспечить выполнение всех уравнений равновесия и наилучшее приближение при выбранной кинематике и вариационной формулировке краевой задачи.

Выясним, может ли кинематика (17) быть согласованной в случае градиентной теории упругости, подчиняющейся условию симметрии (9). Для этого учтем соотношения (17), (18) и запишем определяющие соотношения для "классических" составляющих напряжений, через которые записываются уравнения равновесия, краевые статические условия и усилия, входящие в уравнения равновесия (20), N , Q , F , M :

$$\begin{aligned} t_{11} &= (\lambda + 2\mu)(u'(x) + \theta' y) - (4C_2 + 2C_8 + C_7 + 4C_{11} + 4C_1)(u'''(x) + \theta''' y), \\ t_{21} &= \mu(\theta + w'(x)) - (3C_1 + 2C_2 + 4C_{11})\theta'' - (C_7 + 2C_8)w'''(x), \\ t_{12} &= \mu(\theta + w'(x)) - (2C_1 + 2C_2 + 2C_{11} + 2C_8 + C_7)\theta'' - (2C_{11} + C_1)w'''(x), \end{aligned} \quad (21)$$

$$t_{22} = \lambda(u'(x) + \theta' y) - (C_1 + 2C_2)(u'''(x) + \theta''' y).$$

Рассмотрим простейшую полностью симметричную градиентную теорию упругости, которая может быть названа градиентной теорией деформаций, и для которой для тензора модулей упругости выполняются не только условие потенциальности (5) и симметрии (6), но и условие симметрии по первым двум индексам (т.е. потенциальная энергия записывается не через тензор дисторсии $R_{i,j}$, а через тензор деформации ε_{ij}). Можно проверить, что для такой модели в формулах (7) (и следовательно, в соотношениях (21)) следует положить:

$$C_1 = C_2 = C_7, \quad C_8 = C_{11}. \quad (22)$$

В такой простейшей полностью симметричной градиентной упругости $t_{12} = t_{21}$:

$$t_{12} = \mu(\theta + w'(x)) - (5C_1 + 4C_8)\theta'' - (2C_8 + C_1)w'''(x). \quad (23)$$

Запишем, наконец, уравнения равновесия в перемещениях. Учитывая соотношения (20), (21)-(23), найдем:

$$\begin{cases} \frac{\partial N}{\partial x} = 2h[(\lambda + 2\mu)u''(x) - (9C_1 + 6C_8)u'''(x)] = 0 \\ \frac{\partial M}{\partial x} - Q = (\lambda + 2\mu)\frac{2h^3}{3}\theta'' - (9C_1 + 6C_8)\frac{2h^3}{3}\theta''' - \\ - 2h[\mu(\theta + w'(x)) - (5C_1 + 4C_8)\theta'' - (2C_8 + C_1)w'''(x)] = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial x} + P = 2h[\mu(\theta' + w''(x)) - (5C_1 + 4C_8)\theta''' - (2C_8 + C_1)w''''(x)] + P = 0 \end{cases} \quad (24)$$

где $P = (p^+ - p^-)$.

Уравнения теории неклассических стержней Бернулли могут быть получены непосредственно из системы уравнений (24), приняв в них следующие соотношения, определяющие кинематику стержней Бернулли $\theta = -w'(x)$. В результате найдем:

$$\begin{aligned} & [(\lambda + 2\mu)u''(x) - (9C_1 + 6C_8)u'''(x)] = 0 \\ & (9C_1 + 6C_8)\frac{2h^3}{3}w^{(6)}(x) - \left((\lambda + 2\mu)\frac{2h^3}{3} \right)w^{(4)} + P = 0 \end{aligned}$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены уравнения равновесия для стержней Тимошенко с учетом согласованности перемещений. С использованием корректной градиентной теории упругости строится модель стержней Тимошенко и как частный случай модель стержней Бернулли. Показано, что учет масштабных эффектов не дает поправки в изгибную жесткость для длинных стержней, как это было ошибочно указано в работах [4,5]. Таким образом, использование корректных моделей подчиняющихся принципу симметрии, должны внести существенную поправку в опубликованные результаты других авторов. Масштабные эффекты локализируются в окрестностях торцов стержней.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Kakunai S., Masaki J., Kuroda R., Iwata K., Nagata R.* Measurement of apparent Young's modulus in the bending of cantilever beam by heterodyne holographic interferometry // *Exp. Mech.* – 1985. – Vol.25. – N4. – P.408-412.
2. *Lam D.C.C., Yang F., Chong A.C.M., Wang J., Tong P.* Experiments and theory in strain gradient elasticity // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2003. – Vol.51. – P.1477-1508.
3. *McFarland A.W., Colton J.S.* Role of material microstructure in plate stiffness with relevance to microcantilever sensors // *J. of Micromechanics and Microengineering.* – 2005. – Vol.15. – N5. – P.1060-1067.
4. *Wang C.M., Zhang Y.Y., He X.Q.* Vibration of nonlocal Timoshenko beams // *Nanotechnology.* – 2007. – Vol.18. 105401 (9 p).
5. *Ma H.M., Gao X.-L., Reddy J.N.* A microstructure-dependent Timoshenko beam model based on a modified couple stress theory // *J. of the Mechanics and Physics of Solids.* – 2008. – Vol.56. – P.3379-3391.
6. *Gao X.-L., Park S.K.* Variational formulation of a simplified strain gradient elasticity theory and its application to a pressurized thick-walled cylinder problem // *Int. J. Solids Struct.* – 2007. – Vol.44. – P.7486-7499.
7. *Васильев В.В., Лурье С.А.* К проблеме построения неклассических теорий пластин // *МТТ.* – 1990. – №2. – С.158-167.
8. *Vasil'ev V.V., Lur'e S.A.* On refined Theories of Beams, Plates and Shells // *J. of Composite Materials.* – 1992. – Vol.26. – №4. – P.546-557.
9. *Лурье С.А., Шумова Н.П.* Кинематические модели уточненных теорий композитных балок, пластин и оболочек // *Механика композитных материалов.* – 1996. – Т.32. – №5. – С.612-624.

ПОСТРОЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО КОРРЕКТИРУЮЩЕГО РЕШЕНИЯ С СОГЛАСОВАННОЙ КИНЕМАТИКОЙ В ЗАДАЧЕ ОБ ИЗГИБЕ ОРТОТРОПНОЙ ПОЛОСЫ СО СТАТИЧЕСКИМИ УСЛОВИЯМИ НА ПРОДОЛЬНЫХ КРАЯХ*

Лурье С.А.¹, Харченко К.Д.², Лыкосова Е.Д.¹

¹ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

²ФГБУ Московский Авиационный Институт (Национальный исследовательский университет), г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

Предлагается алгоритм построения замкнутого решения прикладной задачи теории для ортотропной полосы со статическими граничными условиями на продольных кромках. Алгоритм предусматривает построение основного балочного решения и системы корректирующих решений, позволяющих удовлетворить уравнениям равновесия и всем краевым условиям. Замыкающее корректирующее решение, обеспечивающее удовлетворение краевых условий на торцах полосы, строится вариационным путем Власова-Конторовича с использованием минимизации соответствующего функционала. В результате алгоритм позволяет получить явное представление задачи.

1. ВВЕДЕНИЕ

Рассматривается широкий класс бигармонических задач прикладной теории упругости для прямоугольной ортотропной полосы со статическими граничными условиями на продольных кромках (рис.1). К настоящему времени известен весьма ограниченный класс точных решений для такого рода задач, когда решение может быть построено в одинарных или двойных тригонометрических рядах, а также методом однородных решений для согласованных краевых условий (что, по-существу, эквивалентно решению в одинарных рядах).

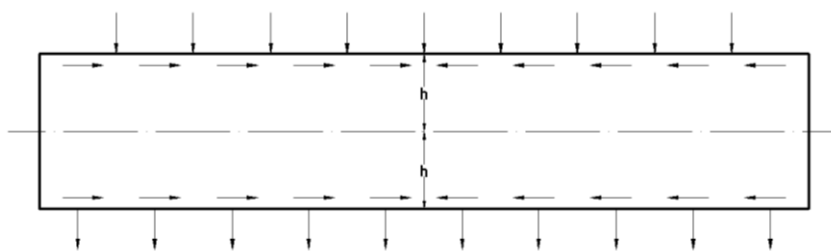


Рис.1. Полоса с нагрузкой.

Алгоритм построения решения состоит в следующем. Сначала строится «основное» решение, под которым понимается приближенное решение теории стержней типа Тимошенко с учётом поперечного сдвига. Такое решение само по себе представляет практический интерес [1]. Полученное «основное» полиномиальное решение соответствует балочному решению и не удовлетворяет уравнениям равновесия, поэтому, для построения полного решения бигармонической задачи, строится дополнительное, корректирующее решение,

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 12-01-00273 и 13-01-00872.).

которое позволяет убрать невязку в уравнениях равновесиях. Полученное так представление удовлетворяет уравнениям равновесия, но даёт невязку в граничных условиях на продольных и поперечных кромках.

Следующее корректирующее решение строится так, чтобы для совокупности трех найденных функций граничные условия на продольных кромках удовлетворялись полностью. Такое корректирующее решение всегда может быть построено в форме разложений в тригонометрические ряды по продольной координате. В совокупности все построенные частные решения удовлетворяют уравнениям равновесия и граничным условиям на продольных кромках, однако не удовлетворяют краевым условиям на торцах полосы. Чтобы удовлетворить краевым условиям и на торцах полосы строится основное корректирующее решение

Основное корректирующее решение строится методом Власова-Конторовича и представляется в форме разложений в отношении поперечной координаты по системе полных функций. Т.к. краевые условия на продольных кромках являются статическими, то в соответствии с принципом Лагранжа полная система функций, по которым проводится разложение, не обязана подчиняться краевым условиям. В результате реализации вариационного метода и уравнения равновесия и статические краевые условия выполняются, вообще говоря, приближенно (т.е. в смысле слабой сходимости).

В связи с тем, что основное корректирующее решение строится в виде разложения по поперечной координате, в разложении различных компонент перемещений могут участвовать, вообще говоря, различные системы функций. При построении подобных разложений используется принцип согласованности разложений [2-5].

В работе доказывается, что если в качестве системы функций в разложении основного корректирующего решения выбрать полную систему тригонометрических функций, то при выполнении условий согласованности вариационная проблема, реализуемая методом Ритца приводит к распадающейся системе уравнений, позволяющей при выполнении краевых условий на торцах найти коэффициенты разложения в явной форме для любого члена ряда.

В качестве тестовой рассматривается задача для полосы со свободным опиранием по торцам, которая имеет точное решение.

2. ОСНОВНОЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим плоскую задачу теории упругости для однородной ортотропной полосы. Полоса нагружена нормальными и касательными силами, распределёнными по поверхности $y = \pm h$. Должны выполняться следующие уравнения равновесия:

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

и соотношения упругости:

$$\sigma_x = A_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + A_{12} \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \sigma_y = A_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + A_{22} \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \tau_{xy} = A_{33} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (2.2)$$

где A_{mn} – коэффициенты жесткости.

Решение уравнений (2.1), (2.2) должны удовлетворять статическим граничным условиям на поверхности $\pm h$, т.е.:

$$\tau_{xy}|_{y=h} = q_+, \quad \tau_{xy}|_{y=-h} = q_-, \quad \sigma_y|_{y=h} = P_+, \quad \sigma_y|_{y=-h} = P_- \quad (2.3)$$

И заданным краевым условиям на торцах полосы $x=0$ и $x=l$.

Для построения основного решения воспользуемся методом построения уточненных теорий стержней предложенным в работах [3,4]. Представим перемещения полосы в виде следующих разложений:

$$u(x, y) = \sum_i u_i(x) \varphi_i(y), \quad v(x, y) = \sum_j v_j(x) \psi_j(y) \quad (2.4)$$

где $u_i(x)$ и $v_j(x)$ – неизвестные функции, а $\varphi_i(y)$ и $\psi_j(y)$ – задаваемые системы функций.

Примем в разложении (2.4) для перемещений $(i, j) = 0, 1$ и введем следующие функции, определяющие перемещения полосы:

$$\varphi_0 = 1, \quad \varphi_1 = y, \quad \psi_0 = 0, \quad \psi_1 = 1 \quad (2.5)$$

Тогда равенства (2.4), (2.5) определяют следующие выражения для перемещений:

$$u = u_0(x) + u_1(x) y, \quad v = v_0(x), \quad (2.6)$$

Для такой кинематики выражения для усилий и моментов приобретает вид:

$$N_0 = \int_{-h}^h \sigma_x dy, \quad M_0 = \int_{-h}^h \sigma_x y dy \quad (2.7)$$

Учтем, что:

$$N_0 = 2A_{11} h u'_0, \quad M_1 = \frac{2}{3} A_{11} h^3 u'_1, \quad Q = 2A_{33} h (u_1 + v'_0) \quad (2.8)$$

Тогда получим для определения функций u_0, u_1, v_0 систему трёх уравнений равновесия в перемещениях:

$$\begin{aligned} 2A_{11} h u''_0 + q_0 &= 0, \quad q_0 = q_+ - q_- \\ \frac{2}{3} A_{11} h^3 u''_1 - 2A_{33} h (u_1 + v'_0) + q_+ &= 0, \quad q_1 = q_+ h + q_- h \\ 2A_{33} h (u'_1 + v''_0) + p_1 &= 0, \quad p_1 = p_+ - p_- \end{aligned} \quad (2.9)$$

Заметим, что в равенствах (2.6)-(2.8) N_0 и Q обозначают осевую и поперечную силу, M_1 – изгибающий момент, u_0, u_1, v_0 – осевое перемещение, угол поворота поперечного сечения и прогиб полосы. Общее решение уравнений (2.9) имеет полиномиальный характер, т.е.:

$$\begin{aligned} u_0 &= C_1 x + C_2 - \frac{1}{2A_{11} h} \int dx \int q_0 dx \\ u_1 &= C_5 + \frac{3}{2A_{11} h^3} \left(C_3 \frac{x^2}{2} + C_4 x - \int dx \int dx \int p_1 dx - \int dx \int q_1 dx \right) \\ v_0 &= C_6 - C_5 x + \frac{1}{2A_{33} h} \left(C_3 x - \int dx \int p_1 dx \right) - \\ & - \frac{3}{2A_{11} h^3} \left(C_3 \frac{x^3}{6} + C_4 \frac{x^2}{2} - \int dx \int dx \int dx \int p_1 dx - \int dx \int dx \int q_1 dx \right) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Шесть постоянных интегрирования $C_i (i=1, \dots, 6)$ позволяют удовлетворить по три граничных условия на краю $x=const$ полосы. Для закрепленного края

$u_0 = u_1 = v_0 = 0$, т.е. в соответствии с равенствами (2.6) на этом краю перемещения u и v тождественно обратятся в ноль. Для свободного края $M_0 = M_1 = Q = 0$, что соответствует отсутствию напряжений σ_x и τ_{xy} на свободном краю полосы.

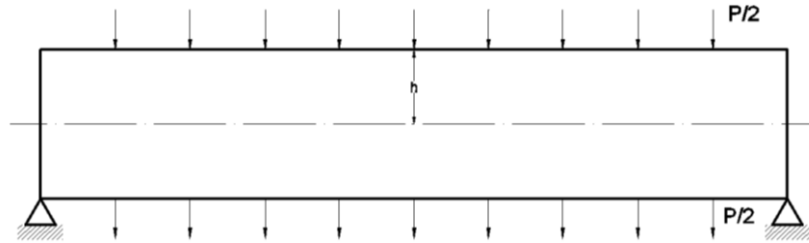


Рис.2. Ортоотропная полоса.

Для частной задачи, показанной на рис.2 «основное» решение (2.10) может быть записано в виде:

$$u_1 = \frac{3P}{4A_{11}h^3} \left(l^2x - \frac{x^3}{3} \right), \quad v_0 = \frac{P}{4A_{33}h} (l^2 - x^2) + \frac{3P}{8A_{11}h^3} \left(\frac{5l^4}{6} - l^2x^2 + \frac{x^4}{6} \right) \quad (2.11)$$

Оно позволяет получить следующие выражения для напряжений:

$$\sigma_x^0 = A_{11}u_1' = \frac{3Py}{4h^3} (l^2 - x^2), \quad \sigma_y^0 = \frac{3P}{4h^3} \left(h^2y - \frac{1}{3}y^2 \right), \quad (2.12)$$

$$\tau_{xy}^0 = -\frac{3Px}{4h^3} (h^2 - y^2)$$

3. КОРРЕКТИРУЮЩЕЕ ЧАСТНОЕ РЕШЕНИЕ

Основное решение, как нетрудно убедиться не удовлетворяет уравнениям равновесия (2.1). Построим корректирующее частное решение так, чтобы удовлетворить уравнениям равновесия. Для того в общем случае перемещению u и v будут искажаться в виде суммы слагаемых:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0(x, y) + u_{00}^*(x, y) \\ v_0(x, y) + v_{00}^*(x, y) \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

где u_0, v_0 – основное решение, $u_{00}^*(x, y), v_{00}^*(x, y)$ – частное решение, которое убирает «невязку» в уравнениях равновесия.

В общем случае частное решение (см. (3.1)) имеет вид:

$$\begin{pmatrix} u_{00}^*(x, y) \\ v_{00}^*(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i \sum_k u_{ik} X_i(x) Y_k(y) \\ \sum_i \sum_k v_{ik} X_i(x) Y_k(y) \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Каждая из системы функций $X_i(x), Y_k(y)$ является тригонометрической полной системой функций на интервалах $[-l, l], [-h, h]$ соответственно.

Подставляя разложения (3.2) в уравнения равновесия, записанные через перемещения, учитывая разложения (3.1) и раскладывая получившиеся невязки, источниками которых являются функции $u_0(x, y)$, и $v_0(x, y)$, в ряды по системам функций $\{X_i(x)Y_k(y)\}$ и $\{X_i'(x)Y_k'(y)\}$, $X_i'(x) = dX_i(x)/dx$, $Y_k'(y) = dY_k(y)/dy$,

найдем явные значения коэффициентов u_{ik} и v_{ik} в разложениях (3.2). Частное компенсирующее решение, таким образом, построено.

В частных случаях корректирующее решение может быть найдено и иным образом. Так для тестовой задачи (рис.2) где $P_a = P(x)/2 = const$, $q_a = 0$ и основного решения (2.11), частное компенсирующее решение, как нетрудно проверить, имеет вид:

$$u_{00}^*(x, y) = y \sum u_n \sin \lambda_n x, \quad v_{00}^*(x, y) = \sum v_n \cos \lambda_n x, \quad (3.3)$$

$$\lambda_n = \pi(2n-1)/2, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$u_k = \frac{3}{2} \frac{A_{12}}{A_{11} h^3} \frac{(x)_k}{\lambda_n^2}, \quad \text{где } (x)_k = \int_{-h}^h x \sin(\lambda_n x) dx$$

$$\sigma_{x00} = A_{11} y \sum u_n \lambda_n \cos \lambda_n x, \quad \sigma_{y00} = A_{12} y \sum u_n \lambda_n \cos \lambda_n x,$$

$$\tau_{xy00} = A_{33} \left(\sum u_n \sin \lambda_n x - \sum v_n \lambda_n \sin \lambda_n x \right),$$

оставшиеся неопределенными коэффициенты v_n находятся явно из равенства:

$$\frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = A_{12} \sum u_n \lambda_n \cos \lambda_n x +$$

$$+ A_{33} \left(\sum u_n \lambda_n \cos \lambda_n x - \sum v_n \lambda_n^2 \cos \lambda_n x \right) = d_0 + d_1 x$$

$$\text{где } d_0 = - \left(\frac{P}{2A_{33}h} \right) - \left(\frac{3}{4} \frac{Pl^2}{A_{11}h} \right), \quad d_1 x^2 = - \frac{3}{4} \frac{P}{A_{11}h} x^2.$$

Для построения решения осталось удовлетворить статическим краевым условиям на продольных кромках и заданным краевым условиям на торцах полосы. Однако сначала построим еще одно частное решение, которое обеспечивает выполнение краевых условий на продольных кромках полосы с учетом первых двух систем частных решений – основного решения $u_0(x, y)$, $v_0(x, y)$ и частного корректирующего решения $u_{00}^*(x, y)$, $v_{00}^*(x, y)$.

Это всегда можно сделать, используя еще одно корректирующее решение u^* , v^* , представленное в форме одинарных тригонометрических рядов в направлении продольной оси. В результате, удастся обеспечить однородность краевых условий для базового корректирующего решения, которое является завершающим звеном в алгоритме и позволяет точно удовлетворить краевым условиям на торцах полосы. Иначе говоря, корректирующие решения u^* , v^* позволяют «перебросить» все неоднородности граничных условий с продольных кромок в краевые условия на торцах. Отметим, что т.к. краевые условия на продольных кромках даны в напряжениях, то это вспомогательное решение можно строить как решение бигармонического уравнения в напряжениях:

$$\sigma_x = \frac{\partial^2 F}{\partial y^2}, \quad \sigma_y = \frac{\partial^2 F}{\partial x^2}, \quad \tau_{xy} = - \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}$$

$$\frac{\partial^4 F}{\partial y^4} + \frac{A_{11}}{A_{33}} \frac{\partial^4 F}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{A_{11}}{A_{22}} \frac{\partial^4 F}{\partial x^4} = 0 \quad (3.4)$$

$$F = \sum_k F_k(y) \cos \lambda_k x, \quad F_k'' - 2aF_k' + b^2 F_k = 0, \quad F_k = C_{1k} \operatorname{sh} r_{1k} y + C_{2k} \operatorname{sh} r_{2k} y$$

$$r_{1k} = \sqrt{a \pm \sqrt{a^2 - b^2}} = \sqrt{\lambda_k (2 \pm \sqrt{3})}, \quad a = \frac{A_{11}\lambda_k}{2A_{33}}, \quad b^2 = \frac{A_{11}\lambda_k^2}{A_{22}}$$

Граничные условия на продольных кромках записываются через граничные операторы l_p, l_q в виде ($\alpha_{1k} = r_{1k}h$):

$$\begin{aligned} \tau_{xy}(h) = 0: \quad C_{1k}r_{1k}sh\alpha_{1k} + C_{2k}r_{1k}sh\alpha_{1k} &= q_a - l_q(u_0 + u_{00}^*) \\ \sigma_y(h) = P: \quad C_{1k}ch\alpha_{1k} - C_{2k}sh\alpha_{1k} &= P_a - l_p(u_0 + u_{00}^*) \end{aligned} \quad (3.5)$$

здесь l_p, l_q – операторы статических граничных условий на продольных кромках. Коэффициенты C_{1k}, C_{2k} в решении (3.4) находятся из записанной системы распадающихся алгебраических уравнений (3.5).

4. ОСНОВНОЕ КОРРЕКТИРУЮЩИЕ РЕШЕНИЕ

Основное напряжение состояние, рассмотренное выше, позволяют описать общий изгиб и осевое нагружение полосы. Недостатком построенного основного решения является, то, что касательные и поперечные нормальные напряжения τ_{xy} и σ_y , полученные для «основного» решения, вообще говоря, не могут быть найдены из закона Гука. Заметим, что эти напряжения следует в случае «основного» решения находить в результате интегрирования уравнений равновесия (1.1) с учетом условий (1.3). В этом случае граничные условия (1.3) удовлетворяются, однако полученные напряжения не совпадают с напряжениями, следующими из соотношений упругости (1.5).

Для устранения этого противоречия необходимо построить решение корректирующее основное состояние. Это замыкающее решение строится в виде разложения (2.4). При этом следует обеспечить согласованность разложений (2.4), что позволяет получить выполнение уравнений равновесия для каждого приближения [5,6]. Условия согласованности были получены в работах [7]. Они имеют вид следующих соотношения для функций φ_i и ψ_j в (2.4):

$$i = j, \psi_i = \dot{\varphi}_i. \quad (4.1)$$

В качестве системы функций $\{\varphi_i\}$ можно выбрать любую тригонометрическую систему функций, полную на интервале $[h, -h]$.

В результате, реализация метода Власова-Конторовича приводит к следующей системе уравнений равновесия:

$$M'_k - Q_k = 0, \quad Q'_k - H_k = 0. \quad (4.2)$$

Здесь:

$$\begin{aligned} M_k &= \int_{-h}^h \sigma_x \varphi_k dy = \sum_i (A_{11}a_{ik}u'_i + A_{12}b_{ik}v_i) \\ Q_k &= \int_{-h}^h \tau_{xy} \dot{\varphi}_k dy = A_{33} \left[\sum_i c_{ik} (u_i + v'_i) \right] \\ H_k &= \int_{-h}^h \sigma_y \ddot{\varphi}_k dy = \sum_i (A_{12}r_{ik}u'_i + A_{22}s_{ik}v_i) \end{aligned} \quad (4.3)$$

где

$$\begin{aligned}
c_{ik} &= \int_{-h}^h \dot{\varphi}_k dy, & r_{ik} &= \int_{-h}^h \ddot{\varphi}_k y dy, & a_{ik} &= \int_{-h}^h \varphi_i \varphi_k dy, \\
b_{ik} &= \int_{-h}^h \ddot{\varphi}_i \varphi_k dy, & c_{ik} &= \int_{-h}^h \dot{\varphi}_i \dot{\varphi}_k dy, & r_{ik} &= \int_{-h}^h \varphi_i \ddot{\varphi}_k dy, & s_{ik} &= \int_{-h}^h \ddot{\varphi}_i \ddot{\varphi}_k dy
\end{aligned}
\tag{4.4}$$

Нетрудно убедиться, что система уравнений (4.2)-(4.4) сводится к распадающейся системе обыкновенных дифференциальных уравнений четвертого порядка относительно функций $u_i(x)$, $v_i(x)$. Эта система уравнений решается явно. Неизвестная система четырех постоянных, входящих в выражения для функций $u_i(x)$, $v_i(x)$ находится из распадающейся же системы алгебраических уравнений после подстановки выражений (2.4) в краевые условия на торцах полосы и разложения известных функций в условиях на торцах в ряды по системе ортогональных тригонометрических функций φ_i и их производных. Таким образом, строится замкнутое решение бигармонической проблемы.

Нетрудно видеть, что для тестовой задачи для опертой полосы (см. рис.2) основное корректирующее решение тождественно равно нулю по построению (см. соотношения (2.12) и (3.1)-(3.4)).

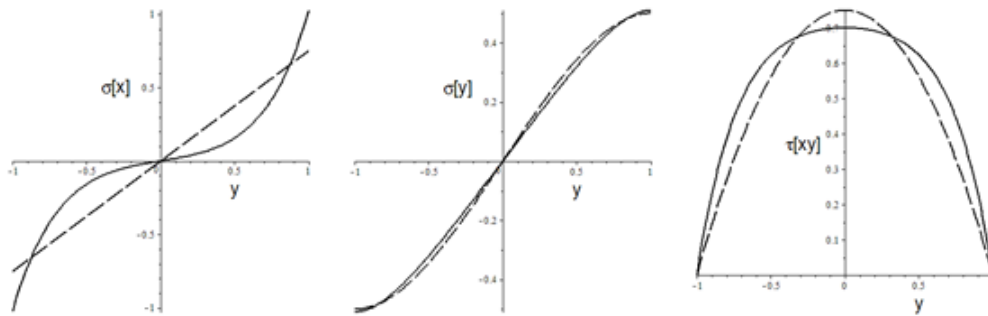


Рис.3. Изменение напряжений σ_x , σ_y , τ_{xy} при $x=0$ для полосы с параметрами $h=l=1$ (сплошные линии – точное решение, пунктирные линии – основное балочное решение).

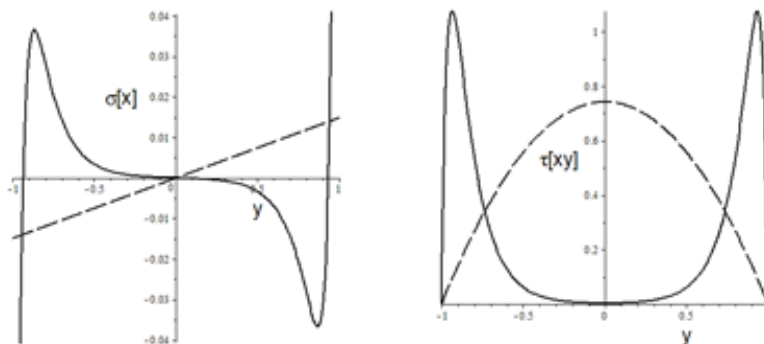


Рис.4. Изменение напряжений σ_x , σ_y , τ_{xy} при $x=0.99$.

На рис.3 и 4 представлены графики изменения напряжений по поперечной координате, полученные для тестовой задачи ($h=l=1$) в сечении, примыкающем

к торцу $x=0.99$, на которых для сравнения изображены и решения, соответствующие основному решению (2.12).

Разница между представленным точным решением и основным балочным решением, определяется корректирующими решениями $u_{00}^*(x, y)$, $v_{00}^*(x, y)$ и $u^*(x, y)$, $v^*(x, y)$. Показано, что балочное решение фактически совпадает с точным для рассматриваемой полосы ($A_{11} = A_{22} = A$, $A_{33} = A/4$) при $l \geq 6h$. Однако оно не может быть использовано для описания краевых эффектов (рис.4)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен алгоритм построения замкнутого решения прикладной теории упругости для ортотропной полосы с статическими граничными условиями на продольных кромках. Изложена процедура определения основного, балочного решения и вспомогательных решений. Наконец, кратко описывается процедура построения корректирующего частного решения задачи, которое находится в замкнутой форме и обеспечивает выполнения произвольных краевых условий на торцах полосы.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Васильев В.В.* Механика конструкций из композиционных материалов. – М.: Машиностроение, 1988. – 272 с.
2. *Васильев В.В., Лурье С.А.* К проблеме построения неклассических теорий пластин // МТТ. – 1990. – №2. – С.158-167.
3. *Васильев В.В.* О теории тонких пластин // МТТ. – 1992. – №3. – С.26-47.
4. *Vasil'ev V.V., Lur'e S.A.* On refined theories of beams, plates and shells // J. of Composite Materials. – 1992. – Vol.26. – №4. – P.546-557.
5. *Лурье С.А., Шумова Н.П.* Кинематические модели уточненных теорий композитных балок, пластин и оболочек // Механика композиционных материалов. – 1996. – Т.32. – №5. – С.612-624.

НЕСТАНДАРТНЫЕ ЗАДАЧИ МЕХАНИКИ ДЕФОРМИРУЕМОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА И ИТЕРАЦИОННЫЙ МЕТОД ИХ РЕШЕНИЯ

Пестренин В.М., Пестренина И.В., Ландик Л.В.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
г. Пермь, Россия*

РЕЗЮМЕ

Рассматриваются задачи механики деформируемого твердого тела, хотя бы в одной точке поверхности которого количество заданных условий оказывается избыточным. Такие задачи в работе называются нестандартными. Они характерны для элементов конструкций, содержащих особые точки. Предлагается способ выявления количества независимо заданных ограничений в особых точках, что позволяет установить нестандартность задачи. Приводится итерационный численно-аналитический метод исследования нестандартных задач.

ВВЕДЕНИЕ

В механике деформируемого твердого тела (МДТТ) имеется класс задач, в которых количество заданных ограничений на параметры состояния на границе тела оказывается избыточным. Такие задачи в настоящей статье называются нестандартными. Например, в плоской задаче стандартно в точках контура задается два условия (в частности, нормальное и касательное напряжение). Если на контуре имеется точка, в которой заданы не два, а три или более независимых ограничений на параметры состояния, задача становится нестандартной. Такие задачи характерны для тел, имеющих особенности в виде клиньев или ребер; для составных тел, в частности, слоистых; для элементов конструкций, полученных путем пайки, сварки или склеивания и т.п. Во всех этих случаях имеются точки (особые точки), в окрестности которых возможна концентрация напряжений. Интерес исследователей к изучению концентрации напряжений вблизи особых точек достаточно высок, при этом используются различные методы МДТТ: интегральных преобразований; функций напряжений Эри [5]; разделения переменных при решении однородных задач [6,7]; конечных элементов [8-10] и др. Следует отметить, что интересуясь главным образом изучением напряженного состояния в окрестности особых точек, авторы публикаций игнорируют факт избыточности заданных в ней условий (факт нестандартности задачи), поэтому получаемое решение с применением стандартных подходов не гарантирует удовлетворение всем заданным ограничениям. В настоящей работе рассматривается подход, позволяющий выявить количество независимо заданных ограничений в особых точках элементов конструкций, находящихся в условиях плоской задачи, установить нестандартность рассматриваемой задачи, предлагается итерационный численно-аналитический метод решения таких задач.

1. ПРИМЕРЫ ЭЛЕМЕНТОВ КОНСТРУКЦИЙ С НЕСТАНДАРТНО ЗАДАНЫМИ УСЛОВИЯМИ

1.1. Однородный элемент конструкции с особенностью в виде клина, образующие которого свободны от нагрузки.

Рассматривается элемент конструкции, имеющий особенность в виде клина. По биссектрисе угла 2α при вершине A клина направим ось x_1 декартовой ортонормированной системы координат x_1, x_2 . Внешние нормали к образующим клина обозначим через \bar{n} , \bar{m} . Через \bar{n}' , \bar{m}' обозначим соответственно перпендикулярные им орты (рис.1).

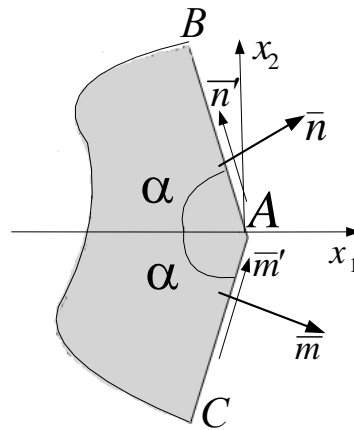


Рис.1. Элемент конструкции в виде клина.

Для компонент тензора напряжений принимаются обозначения σ_{ij} , для нормальных напряжений – σ_m , σ_n , для касательных – $\tau_{m'}$, $\tau_{n'}$. Векторы напряжений на образующих клина АВ и АС равны нулю, поэтому граничные условия в рассматриваемой задаче вблизи вершины записываются равенствами:

$$\sigma_n = 0, \tau_{n'} = 0, \sigma_m = 0, \tau_{m'} = 0.$$

В точке А эти равенства представляют собой систему четырех линейных однородных уравнений относительно трех неизвестных напряжений σ_{11} , σ_{12} , σ_{22} :

$$\begin{aligned} \sigma_{11} \sin^2 \alpha + 2\sigma_{12} \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \alpha &= 0, \\ -\sigma_{11} \sin \alpha \cos \alpha - \sigma_{12} (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) + \sigma_{22} \sin \alpha \cos \alpha &= 0, \\ \sigma_{11} \sin^2 \alpha - 2\sigma_{12} \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \alpha &= 0, \\ \sigma_{11} \sin \alpha \cos \alpha - \sigma_{12} (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) - \sigma_{22} \sin \alpha \cos \alpha &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Из матрицы системы уравнений (1) можно построить четыре различных определителя третьего порядка Δ_i ($i=1,2,3,4$). Эти определители выражаются равенствами:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = -4 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha, \quad \Delta_3 = -\Delta_4 = \cos 2\alpha \sin 2\alpha. \quad (2)$$

Приравняв нулю определители (2), находим условия, при которых ранг матрицы системы уравнений (1) оказывается меньшим трех:

$$\alpha = \pi/2, \quad \alpha = \pi.$$

Следовательно, для решений уравнений (1) возможны три случая.

1) $\alpha \neq \pi/2, \alpha \neq \pi$. Матрица системы уравнений (1) имеет ранг, равный трем. Поэтому решение будет тривиальным $\sigma_{11} = 0, \sigma_{12} = 0, \sigma_{22} = 0$.

Таким образом, в рассматриваемом случае напряженное состояние в точке A полностью известно и не зависит ни от материальных свойств конструкции, ни от способа ее нагружения. Оно обусловлено заданными граничными условиями в точке A . Здесь число заданных независимых условий оказывается избыточным, равным трем, что и свидетельствует о нестандартности данной задачи МДТТ.

2) $\alpha = \pi/2$. Граница тела не имеет угловой точки. Из уравнений (1) определяются напряжения $\sigma_{11} = 0, \sigma_{12} = 0$. Компонента σ_{22} из системы уравнений не определяется, она должна находиться из решения задачи о расчете рассматриваемого элемента конструкции в соответствии с его нагружением. Число граничных условий в точке A равно двум, задача МДТТ оказывается стандартной.

3) $\alpha = \pi$. Точка A в этом случае оказывается вершиной трещины. Из уравнений (1) определяются напряжения $\sigma_{22} = 0, \sigma_{12} = 0$. Компонента σ_{11} должна находиться из решения задачи о расчете рассматриваемого элемента конструкции. Задача МДТТ является стандартной.

1.2. Однородный элемент конструкции с особенностью в виде клина, образующие которого нагружены поверхностными усилиями.

В данной задаче напряжения на образующих АВ и АС равны заданным нормальным и касательным усилиям:

$$\sigma_n = p_n; \quad \tau_{n'} = \tau_n; \quad \sigma_m = p_m; \quad \tau_{m'} = \tau_m.$$

В точке A эти равенства запишутся системой четырех уравнений относительно трех напряжений $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} \sin^2 \alpha + 2\sigma_{12} \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \alpha &= p_n, \\ -\sigma_{11} \sin \alpha \cos \alpha - \sigma_{12} (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) + \sigma_{22} \sin \alpha \cos \alpha &= \tau_n, \\ \sigma_{11} \sin^2 \alpha - 2\sigma_{12} \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \alpha &= p_m, \\ \sigma_{11} \sin \alpha \cos \alpha - \sigma_{12} (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) - \sigma_{22} \sin \alpha \cos \alpha &= \tau_m. \end{aligned} \quad (3)$$

Четыре различных определителя матрицы системы уравнений (3) имеют значения (2) и одновременно обращаются в нуль при условиях: $\alpha = \pi/2, \alpha = \pi$. Поэтому возможны такие три случая поведения решений уравнений (3):

1) $\alpha \neq \pi/2, \alpha \neq \pi$. Ранг матрицы системы уравнений (3) равен трем. Для того, чтобы в этом случае существовало решение, ранг расширенной матрицы системы тоже должен равняться трем. Это условие приводит к ограничению на приложенные нагрузки:

$$(p_n - p_m) \cos 2\alpha + (\tau_n + \tau_m) \sin 2\alpha = 0. \quad (4)$$

Ограничение (4) требует, чтобы заданные усилия на образующих клина в точке A находились в соответствии с условием симметричности тензора напряжений. Оно выражает равенство в точке A проекции вектора напряжений на площадке, ориентированной вектором \vec{n} , на направление \vec{m} проекции вектора напряжений на площадке, ориентированной вектором \vec{m} , на направление \vec{n} : $(\vec{P}_n \cdot \vec{m} = \vec{P}_m \cdot \vec{n})$. При невыполнении ограничения (4) симметричная теория

упругости не описывает напряженное состояние в окрестности вершины клина. Если приложенные нагрузки удовлетворяют условию (4), уравнения (3) имеют единственное решение:

$$\begin{aligned}\sigma_{11} &= \frac{1}{2}(p_n + p_m) + \frac{1}{2}(\tau_m - \tau_n) \operatorname{ctg} \alpha, \\ \sigma_{12} &= \frac{1}{2}(\tau_m + \tau_n) + \frac{1}{2}(p_n - p_m) \operatorname{ctg} \alpha, \\ \sigma_{22} &= \frac{1}{2}(p_n + p_m) + \frac{1}{2}(\tau_n - \tau_m) \operatorname{tg} \alpha.\end{aligned}\quad (5)$$

Заметим, что данное решение может быть найдено и другим способом – путем составления уравнения равновесия бесконечно малого элемента, примыкающего к вершине клина. Как следует из равенств (5), в данном случае в точке A задаются три независимых условия, задача оказывается нестандартной.

2) $\alpha = \pi/2$. Ранг матрицы системы уравнений (3) равен двум. Для того, чтобы существовало решение этих уравнений, ранг расширенной матрицы также должен быть равен двум. Это условие приводит к ограничениям в точке A на прикладываемую нагрузку:

$$p_n = p_m, \quad \tau_n = \tau_m. \quad (6)$$

Ограничения (6) обусловлены требованием к нагрузке соответствовать симметричности тензора напряжений. При выполнении условия (6) из уравнений (3) получаем $\sigma_{11} = p_m$, $\sigma_{12} = \tau_n$.

Избыточных условий на параметры состояния в точке A не накладывается, задача является стандартной.

3) $\alpha = \pi$. Данный случай аналогичен предыдущему. Система уравнений (3) совместна при выполнении ограничений (6), ее решение $\sigma_{22} = p_n$, $\sigma_{12} = -\tau_n$. Задача является стандартной.

1.3. Кусочно-однородный элемент конструкции с особенностью в виде клина, образующие которого свободны от нагрузки.

Пусть элемент конструкции имеет особенность в виде клина, составленного из двух изотропных материалов (рис.2).

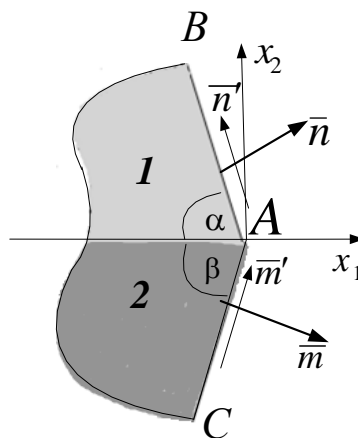


Рис.2. Составной клин.

Для простоты считается, что элементы клина соединены по прямой линии, принимаемой за ось x_1 декартовой ортонормированной системы координат x_1x_2 . Принято: образующие клина – свободны от нагрузки, углы при вершине составляющих клиньев – α, β . Область изменения α, β :

$$0 < \alpha < 2\pi, \quad 0 < \beta < 2\pi, \quad \alpha + \beta \leq 2\pi. \quad (7)$$

На параметры состояния в вершине A клина накладываются ограничения:

а) граничные условия

$$\sigma_n = 0, \quad \tau_n = 0, \quad \sigma_m = 0, \quad \tau_m = 0, \quad (8)$$

б) условия непрерывности напряжений

$$\sigma_{22}^{(1)} = \sigma_{22}^{(2)} = \sigma_{22}, \quad \sigma_{12}^{(1)} = \sigma_{12}^{(2)} = \sigma_{12}, \quad (9)$$

в) условие непрерывности деформаций

$$\varepsilon_{11}^{(1)} = \varepsilon_{11}^{(2)}. \quad (10)$$

Верхний индекс – номер элемента клина (рис.2).

Условия (8), (9) приводятся к четырем линейным однородным уравнениям относительно искомым величин $\sigma_{11}^{(1)}, \sigma_{11}^{(2)}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$:

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^{(1)} \sin^2 \alpha + 2\sigma_{12} \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \alpha &= 0, \\ (\sigma_{11}^{(1)} - \sigma_{22}) \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{12} (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) &= 0, \\ \sigma_{11}^{(2)} \sin^2 \beta - 2\sigma_{12} \sin \beta \cos \beta + \sigma_{22} \cos^2 \beta &= 0, \\ (\sigma_{11}^{(2)} - \sigma_{22}) \sin \beta \cos \beta - \sigma_{12} (\cos^2 \beta - \sin^2 \beta) &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Ненулевое решение системы (11) существует лишь в случае, если ее определитель:

$$\Delta = \sin \alpha \sin \beta \sin(\alpha + \beta)$$

обращается в нуль. Уравнение $\Delta = 0$ в области (7) изменения параметров α, β имеет решения:

$$\alpha = \pi, \quad \beta = \pi, \quad \alpha + \beta = \pi, \quad \alpha + \beta = 2\pi.$$

Рассмотрим некоторые возможные случаи алгебраических зависимостей между напряжениями в точке A для линейно-упругих материалов 1 и 2 с модулями Юнга E_1, E_2 , коэффициентами Пуассона ν_1, ν_2 и коэффициентами температурной деформации α_1, α_2 соответственно.

1). $\alpha \neq \pi, \beta \neq \pi, \alpha + \beta \neq \pi, \alpha + \beta \neq 2\pi$.

Определитель системы уравнений (11) не обращается в нуль, поэтому ее решение:

$$\sigma_{11}^{(1)} = \sigma_{11}^{(2)} = \sigma_{12} = \sigma_{22} = 0. \quad (12)$$

При отсутствии температурного нагружения ($\Delta T = 0$, ΔT – приращение температуры) условие непрерывности деформаций (10) выполняется. Когда $\Delta T \neq 0$ равенство (10) в плоской задаче приводится к виду $(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T = 0$. Из чего следует, что плоская задача в этом случае возможна лишь при условии $\alpha_1 = \alpha_2$. Равенствами (12) в точке A для каждого элемента клина задаются три условия. Такое количество условий является избыточным. Задача является нестандартной.

2). $\alpha = \pi, \beta \neq \pi, \alpha + \beta \neq \pi$.

Из уравнений (11) следует:

$$\sigma_{11}^{(2)} = \sigma_{12} = \sigma_{22} = 0.$$

Условие (10) для обобщенного плоско напряженного и плоско деформированного состояния приводится соответственно к виду:

$$\sigma_{11}^{(1)} = E_1(\alpha_2 - \alpha_1)\Delta T, \quad \sigma_{11}^{(1)} = \frac{E_1}{(1-\nu_1^2)}(\alpha_2 - \alpha_1)\Delta T.$$

В отсутствие температурного нагружения $\sigma_{11}^{(1)} = 0$. Количество задаваемых условий в особой точке избыточно.

3). $\alpha \neq \pi, \beta = \pi, \alpha + \beta \neq \pi$.

Из уравнений (11) получаем:

$$\sigma_{11}^{(1)} = \sigma_{12} = \sigma_{22} = 0.$$

Для плоско напряженного и плоско деформированного состояния с использованием равенства (10) соответственно следует:

$$\sigma_{11}^{(2)} = E_2(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T, \quad \sigma_{11}^{(2)} = \frac{E_2}{(1-\nu_2^2)}(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T.$$

В отсутствие температурного нагружения $\sigma_{11}^{(2)} = 0$. Количество задаваемых условий в особой точке избыточно.

4). $\alpha = \pi, \beta = \pi$.

Решение уравнений (11):

$$\sigma_{12} = \sigma_{22} = 0.$$

Условие (10) связывает напряжения $\sigma_{11}^{(1)}$ и $\sigma_{11}^{(2)}$. Например, в случае плоско напряженного состояния получаем:

$$\frac{1}{E_2}\sigma_{11}^{(2)} - \frac{1}{E_1}\sigma_{11}^{(1)} = (\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T.$$

Количество задаваемых в точке A условий избыточно.

5). $\alpha \neq \pi, \beta \neq \pi, \alpha + \beta = \pi$.

Уравнения (11) позволяют выразить напряжения $\sigma_{11}^{(1)}$, $\sigma_{11}^{(2)}$ и σ_{12} через напряжение σ_{22} :

$$\sigma_{11}^{(1)} = \sigma_{22}ctg^2\alpha, \quad \sigma_{11}^{(2)} = \sigma_{22}ctg^2\alpha, \quad \sigma_{12} = -\sigma_{22}ctg\alpha. \quad (13)$$

В случае обобщенного плоско напряженного состояния условие непрерывности деформаций (10) приводится к виду:

$$(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T + \left[\frac{1}{E_1}(ctg^2\alpha - \nu_1) - \frac{1}{E_2}(ctg^2\alpha - \nu_2) \right] \sigma_{22} = 0, \quad (14)$$

из которого следует (если $(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T \neq 0$), что при обращении в нуль выражения в квадратных скобках особая точка элемента конструкции является сингулярной. В случае плоско деформированного состояния равенство (10) запишется так:

$$(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T - \left\{ \frac{1+\nu_1}{E_1}[(1-\nu_1)ctg^2\alpha - \nu_1] - \frac{1+\nu_2}{E_2}[(1-\nu_2)ctg^2\alpha - \nu_2] \right\} \sigma_{22} = 0. \quad (15)$$

Условие сингулярности особой точки (при выполнении неравенства $(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T \neq 0$) – обращение в нуль выражения в фигурных скобках. В не сингулярном случае напряжение σ_{22} определяется из равенств (14), (15) соответственно. При этом количество задаваемых условий в особой точке

оказывается избыточным, так как для каждого из составляющих элементов здесь оказываются известными все напряжения.

Если выполняется равенство $(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T = 0$, условие непрерывности деформаций (10) запишется произведением (в случае плоско напряженного состояния):

$$\left[\frac{1}{E_1}(\text{ctg}^2 \alpha - \nu_1) - \frac{1}{E_2}(\text{ctg}^2 \alpha - \nu_2) \right] \sigma_{22} = 0, \quad (16)$$

откуда видно, что если множитель в квадратных скобках не равен нулю, то напряжение σ_{22} , а вследствие (13) и все другие напряжения, обращаются в нуль в особой точке. Количество задаваемых условий в ней будет избыточным.

Если же множитель при σ_{22} в (16) обращается в нуль, на это напряжение в точке A не накладываются какие-либо ограничения и количество заданных ограничений в особой точке соответствует стандартной задаче. Избыточных условий нет. Таким образом, видим, что при определенных сочетаниях геометрических и материальных параметров скрепляемых элементов задача о расчете параметров состояния составной конструкции вблизи особой точки составной конструкции оказывается стандартной. В работе [11] рассмотрены некоторые примеры и изучены свойства решений стандартных задач с особыми точками.

1.4. Кусочно-однородный элемент конструкции с особенностью в виде клина, образующие которого нагружены поверхностными усилиями.

Пусть граничные условия на образующих составного клина (рис.2), включая точку A , заданы равенствами:

$$\sigma_n = p_n, \quad \tau_n = q_n, \quad \sigma_m = p_m, \quad \tau_m = q_m. \quad (17)$$

Ограничения на параметры состояния (3) и (4) также имеют место. Равенства (17) и (3) записываются системой неоднородных уравнений для напряжений $\sigma_{11}^{(1)}$, $\sigma_{11}^{(2)}$, σ_{12} , σ_{22} :

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^{(1)} \sin^2 \alpha + 2\sigma_{12} \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \alpha &= p_n, \\ (\sigma_{11}^{(1)} - \sigma_{22}) \sin \alpha \cos \alpha + \sigma_{12} (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) &= q_n, \\ \sigma_{11}^{(2)} \sin^2 \beta - 2\sigma_{12} \sin \beta \cos \beta + \sigma_{22} \cos^2 \beta &= p_m, \\ (\sigma_{11}^{(2)} - \sigma_{22}) \sin \beta \cos \beta - \sigma_{12} (\cos^2 \beta - \sin^2 \beta) &= q_m. \end{aligned} \quad (18)$$

Если определитель (6) матрицы этой системы не обращается в нуль, решение уравнений (18) будет единственным:

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^{(1)} &= p_n \frac{\cos \beta (\sin^2 \alpha - \cos^2 \alpha) + \sin \beta \sin \alpha \cos \alpha}{\sin \alpha \sin(\alpha + \beta)} - \\ &- q_n \frac{\cos \alpha (\sin \beta \cos \alpha + 2 \sin \alpha \cos \beta)}{\sin \alpha \sin(\alpha + \beta)} + p_m \frac{\cos^2 \alpha \cos \beta}{\sin \alpha \sin(\alpha + \beta)} - q_m \frac{\cos^2 \alpha \sin \beta}{\sin \alpha \sin(\alpha + \beta)}, \\ \sigma_{11}^{(2)} &= p_m \frac{\cos \alpha (\sin^2 \beta - \cos^2 \beta) + \sin \beta \sin \alpha \cos \beta}{\sin \beta \sin(\alpha + \beta)} + \\ &+ q_m \frac{\sin \alpha \cos^2 \beta + 2 \cos \alpha \sin \beta \cos \beta}{\sin \beta \sin(\alpha + \beta)} + p_n \frac{\cos \alpha \cos^2 \beta}{\sin \beta \sin(\alpha + \beta)} + q_n \frac{\sin \beta \cos^2 \beta}{\sin \beta \sin(\alpha + \beta)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{12} &= (p_n - p_m) \frac{\cos\beta \cos\beta}{\sin(\alpha + \beta)} + q_n \frac{\sin\alpha \cos\beta}{\sin(\alpha + \beta)} + q_m \frac{\cos\alpha \sin\beta}{\sin(\alpha + \beta)}, \\ \sigma_{22} &= p_n \frac{\cos\alpha \sin\beta}{\sin(\alpha + \beta)} + p_m \frac{\sin\alpha \cos\beta}{\sin(\alpha + \beta)} + (q_n - q_m) \frac{\sin\alpha \sin\beta}{\sin(\alpha + \beta)}.\end{aligned}\quad (19)$$

Решение (19) должно удовлетворять условию непрерывности деформаций (4). Это условие для обобщенного плоско напряженного состояния приводится к виду:

$$E_2 \sigma_{11}^{(1)} - E_1 \sigma_{11}^{(2)} - (E_2 \nu_1 - E_1 \nu_2) \sigma_{22} = 0, \quad (20)$$

а для плоско деформированного к виду:

$$E_2 (1 - \nu_1^2) \sigma_{11}^{(1)} - E_1 (1 - \nu_2^2) \sigma_{11}^{(2)} - [E_2 \nu_1 (1 + \nu_1) - E_1 \nu_2 (1 + \nu_2)] \sigma_{22} = 0. \quad (21)$$

Если решение (14) в зависимости от типа задачи согласовано с условиями (20) или (21), то ограничения в особой точке A совместны, при этом количество заданных условий оказывается избыточным, иначе – заданные ограничения в точке A несовместны, в рамках плоской задачи удовлетворить им невозможно.

Рассмотрим некоторые случаи задания ограничений на параметры состояния в точке A при обращении в нуль определителя матрицы (18).

1) $\alpha = \pi, \beta \neq \pi, \alpha + \beta \neq \pi$.

Ранг матрицы системы уравнений (18) равен трем. Ранг расширенной матрицы будет равен рангу матрицы системы при выполнении ограничения на нагрузки:

$$(p_n - p_m) \cos\beta + (q_n + q_m) \sin\beta = 0.$$

В этом случае уравнения (18) совместны. С использованием условия непрерывности деформаций (15) для обобщенного плоско напряженного состояния получаем решение:

$$\begin{aligned}\sigma_{22} &= p_n, \quad \sigma_{12} = -q_n, \\ \sigma_{11}^{(1)} &= E_2^{-1} \left[p_m E_1 \sin^{-2} \beta + p_n (E_2 \nu_1 - E_1 \nu_2 - E_1 \operatorname{ctg} \beta) - 2q_n E_1 \operatorname{ctg} \beta \right], \\ \sigma_{11}^{(2)} &= p_m \sin^{-2} \beta - p_n \operatorname{ctg}^2 \beta - 2q_n \operatorname{ctg} \beta.\end{aligned}$$

Количество задаваемых в точке A условий избыточно, задача является нестандартной.

2) $\alpha \neq \pi, \beta = \pi, \alpha + \beta \neq \pi$.

Условия совместности уравнений (18) в этом случае обеспечиваются ограничениями на нагрузку:

$$(p_n - p_m) \cos\alpha + (q_n + q_m) \sin\alpha = 0. \quad (22)$$

При выполнении ограничения (22) из уравнений (18) и (9) (для плоско напряженного состояния) находится решение:

$$\begin{aligned}\sigma_{22} &= p_m, \quad \sigma_{12} = -q_m, \\ \sigma_{11}^{(1)} &= p_n \sin^{-2} \alpha - p_m \operatorname{ctg}^2 \alpha + 2q_m \operatorname{ctg} \alpha, \\ \sigma_{11}^{(2)} &= E_1^{-1} \left[p_n E_2 \sin^{-2} \alpha - p_m (E_2 \operatorname{ctg}^2 \alpha + E_2 \nu_1 - E_1 \nu_2) - 2q_m E_2 \operatorname{ctg} \alpha \right].\end{aligned}$$

В вершине клина количество заданных ограничений на параметры состояния избыточно, задача является нестандартной.

3) $\alpha \neq \pi, \beta \neq \pi, \alpha + \beta = \pi$.

В этом случае ранг матрицы системы уравнений (18) и расширенной матрицы совпадают и равны трем при ограничении на заданную нагрузку:

$$(p_n - p_m)\cos\alpha + (q_n - q_m)\sin\alpha = 0. \quad (23)$$

Если нагрузка согласуется с ограничениями (23), из уравнений (18) напряжения $\sigma_{11}^{(1)}$, $\sigma_{11}^{(2)}$ и σ_{12} выражаются через напряжение σ_{22} :

$$\sigma_{11}^{(1)} = \sigma_{22}\operatorname{ctg}^2\alpha + p_n(1 - \operatorname{ctg}^2\alpha) - 2q_n\operatorname{ctg}\alpha,$$

$$\sigma_{11}^{(2)} = \sigma_{22}\operatorname{ctg}^2\alpha - 2p_n\operatorname{ctg}^2\alpha + p_m\sin^{-2}\alpha - 2q_n\operatorname{ctg}\alpha,$$

$$\sigma_{12} = -\sigma_{22}\operatorname{ctg}\alpha + p_n\operatorname{ctg}\alpha + q_n.$$

Напряжение σ_{22} находится из уравнения (9) (для плоско напряженного состояния):

$$\sigma_{22} = \frac{\sin^2\alpha(E_1 - E_2)\left[p_n(1 - \operatorname{ctg}^2\alpha) - 2q_n\operatorname{ctg}\alpha\right] - E_1(p_n - p_m)}{\sin^2\alpha\left[E_1\nu_2 - E_2\nu_1 - (E_1 - E_2)\operatorname{ctg}^2\alpha\right]}.$$

В особой точке количество задаваемых условий избыточно. Задача является нестандартной.

Приведенные примеры показывают, что задачи МДТТ для элементов конструкций с особенностями в виде клина являются, как правило, нестандартными. Стандартными задачи оказываются лишь в исключительных случаях для отдельных сочетаний геометрических и материальных параметров.

2. ИТЕРАЦИОННЫЙ ЧИСЛЕННО АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ НЕСТАНДАРТНЫХ ЗАДАЧ

В стандартных методах решения задач МДТТ считается, что количество заданных граничных условий в точках поверхности (контура) тела не может быть избыточным. Оно должно быть равно трем в точках поверхности и двум в точках контура. Поэтому применение стандартных методов к решению нестандартных задач не гарантирует выполнение всех ограничений, наложенных на параметры состояния в нестандартной задаче.

Ниже предлагается итерационный подход, на каждом шаге которого путем использования стандартного метода решения задачи МДТТ осуществляется приближение к решению нестандартной задачи. Стандартным методом в таком подходе является метод конечных элементов (МКЭ), разрешающие уравнения которого строятся с применением смешанного функционала [12]:

$$I(u, \varepsilon) = \int_V \left[(Lu)^T D(\varepsilon - \varepsilon^0) - \frac{1}{2} \varepsilon^T D\varepsilon \right] dv + W \quad (24)$$

Здесь L – матрица дифференциальных операторов, с помощью которой вектор деформаций ε вычисляется через вектор перемещений u , D – матрица упругих модулей материала; ε^0 – вектор температурных деформаций; W – потенциальная энергия заданных объемных и поверхностных сил. Из условия стационарности функционала (24) следуют уравнения равновесия, зависимости Коши и граничные условия в напряжениях. Тело V , в котором разыскивается решение, разбивается на r частей так, чтобы в каждой части материальные свойства были непрерывны. Часть тела с номером k разбивается на n_k конечных элементов. Решение для перемещений разыскивается в классе непрерывных функций во всем теле V , а для деформаций – в классе функций, непрерывных в отдельных частях. Через U обозначим глобальный вектор узловых перемещений, а через F_k – глобальный

вектор узловых деформаций k -й подобласти. Аппроксимации векторов перемещений и деформаций внутри элемента с номером e примем в виде:

$$u^e = N^e U, \quad \varepsilon^e = M^e F_k,$$

где N^e и M^e – матрицы функций форм элемента. Вследствие независимости векторов U и F_k ($k=1,2,\dots,r$) условия стационарности функционала (1.10) будут состоять из $(r+1)$ уравнений:

$$G_k^T U - S_k F_k = 0, \quad k = 1, 2, \dots, r, \quad (25)$$

$$\sum_{k=1}^r G_k F_k = F, \quad (26)$$

в которых

$$G^e = \int_{V^e} B^{eT} D^e M^e dV; \quad G_k = \sum_{e=1}^{n_k} G^e,$$

$$S^e = \int_{V^e} M^{eT} D^e M^e dV; \quad S_k = \sum_{e=1}^{n_k} S^e,$$

где F – глобальный вектор нагрузки. Из уравнений (25) определяется вектор узловых деформаций:

$$F_k = S_k^{-1} G_k^T U. \quad (27)$$

Таким образом, применение смешанной конечно-элементной схемы решения упругой задачи позволяет выразить деформации в k -й части тела V (а следовательно и узловые напряжения) через глобальные узловые перемещения без применения операции дифференцирования приближенного решения. После подстановки деформаций (27) в равенство (26) получаем систему разрешающих уравнений:

$$KU = F,$$

где глобальная матрица жесткости K определяется равенствами:

$$K = \sum_{i=1}^r K_i, \quad K_i = G_i S_i^{-1} G_i^T.$$

Процедура итерационного решения нестандартной задачи состоит из следующих этапов:

1. Строятся алгебраические равенства вида $\varphi_k(\sigma_{ij}) = 0$ – независимые ограничения на параметры состояния в особой точке, граничные условия в окрестности особой точки (исключая саму точку), условия непрерывности напряжений и деформаций на поверхности (линии) соединения элементов, примыкающих к особой точке.

2. Посредством решения стандартной задачи с использованием МКЭ, описанного выше, строится решение, принимаемое за нулевое приближение. Вследствие избыточности заданных условий в особой точке решение в нулевом приближении не удовлетворяет всем алгебраическим равенствам, отмеченным в п.1. Узлы КЭ-сетки, в которых эти равенства должны выполняться, объявляются основными. Значения алгебраических выражений $\varphi_k(\sigma_{ij}) = 0$ в основных узлах образуют вектор невязок.

3. Алгебраические равенства $\varphi_k(\sigma_{ij}) = 0$ рассматриваются как система уравнений для определения перемещений в основных узлах, при этом остальным перемещениям присваиваются значения нулевого приближения

(($n-1$)-го приближения в последующих итерациях). Число уравнений такой системы в нестандартной задаче оказывается большим, чем число неизвестных. Поэтому строится ее обобщенное (псевдо) решение. Полученное решение используется как граничное условие в основных узлах при построении первого приближения. Далее процесс повторяется. Его сходимость контролируется среднеквадратическим отклонением величины вектора невязок от нуля.

На основе изложенной процедуры с использованием технологий параллельных вычислений OpenMP разработан программный комплекс, реализованный на суперкомпьютере Тесла-ПГУ НОЦ ПиРВ. Ниже приводятся решения некоторых нестандартных задач, полученные с применением этого комплекса.

3. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ НЕСТАНДАРТНЫХ ЗАДАЧ

3.1. Растяжение однородной пластинки с V-образной особенностью.

Рассматривается растяжение однородной пластинки (рис.3) с особенностью в виде клина с образующими, свободными от нагрузок (п.1.1.). Материальные и геометрические параметры в расчетах имеют значения: $l = 1$ см, $E = 2 \cdot 10^{11}$ Па, $\nu = 0.3$, угол α принимается равным $93^\circ, 99^\circ, 105^\circ$. Нагружение осуществляется напряжениями $\sigma_0 = 1 \cdot 10^8$ Па. В рассматриваемом случае задача является нестандартной. Условия для напряжений в точке A записываются равенствами:

$$\sigma_{11} = 0, \quad \sigma_{12} = 0, \quad \sigma_{22} = 0. \quad (28)$$

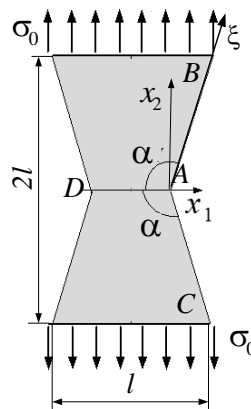


Рис.3.

На рис.4 приводится решение для отношения σ_{22}/σ_0 на оси x_1 в окрестности точки A . Результаты вычислений получены на неоднородной КЭ-сетке со сгущением к особой точке. Применялся четырехугольный 8-и узловой конечный элемент, минимальный линейный размер которого составлял 0,53мкм.

На рис.4а показаны решение в нулевом приближении (штриховая линия) и решение на 957 итерации (сплошная линия) для случая, когда $\alpha = 99^\circ$. Нулевое приближение совпадает с решением в программном комплексе ANSYS (стандартное решение). Видно, что условие $\sigma_{22} = 0$, входящее в ограничение (28), в стандартном решении не выполняется. В решении, построенном методом итераций, выполняются все условия (28).

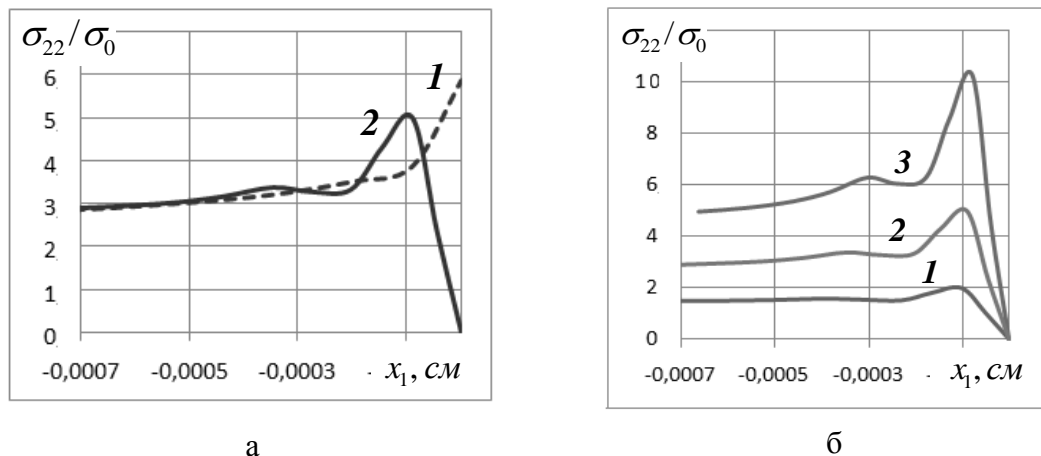


Рис.4. Концентрация напряжений σ_{22}/σ_0 в окрестности особой точки. а) $\alpha = 99^\circ$: 1 – нулевое приближение; 2 – решение на 957 итерации; б) решение на 957 итерации для различных углов α : 1 – $\alpha = 93^\circ$; 2 – $\alpha = 99^\circ$; 3 – $\alpha = 105^\circ$.

Важно также, что приведенные на этом рисунке решения отличаются лишь в малой окрестности особой точки, с удалением от нее решения совпадают. На рис.4б приводится зависимость концентрации напряжений σ_{22}/σ_0 вблизи точки A на оси x_1 для разных углов α . С ростом угла α , как и следовало ожидать, концентрация напряжений также растет.

3.2. Растяжение составной пластинки.

Пусть составная прямоугольная пластинка подвергается растяжению напряжением σ_0 . Материальные свойства составляющих элементов: $E_1 = 206$ ГПа, $\nu_1 = 0.3$, $E_2 = 70$ ГПа, $\nu_2 = 0.25$. Углы при вершине клина $A - \alpha = \beta = \pi/2$.

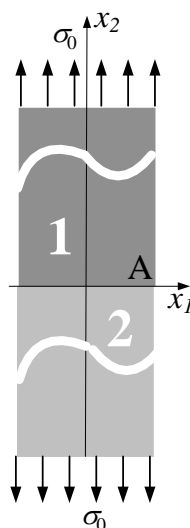


Рис.5.

При таких данных задача является нестандартной. В точке A количество заданных условий оказывается избыточным (п.1.3.):

$$\sigma_{11}^{(1)} = 0, \quad \sigma_{11}^{(2)} = 0, \quad \sigma_{22}^{(1)} = 0, \quad \sigma_{22}^{(2)} = 0, \quad \sigma_{12}^{(1)} = 0, \quad \sigma_{12}^{(2)} = 0. \quad (29)$$

На рис.6а представлено нулевое приближение для σ_{22}/σ_0 (аналог ANSYS-решения). Это решение не удовлетворяет условиям (29) ($\sigma_{22}^{(1)} \neq 0, \sigma_{22}^{(2)} \neq 0$) и условию непрерывности напряжений на линии соединения ($\sigma_{22}^{(1)} \neq \sigma_{22}^{(2)}$).

Уточненное методом итераций решение, представленное на рис.6б, согласуется со всеми заданными в точке A и ее окрестности условиями.

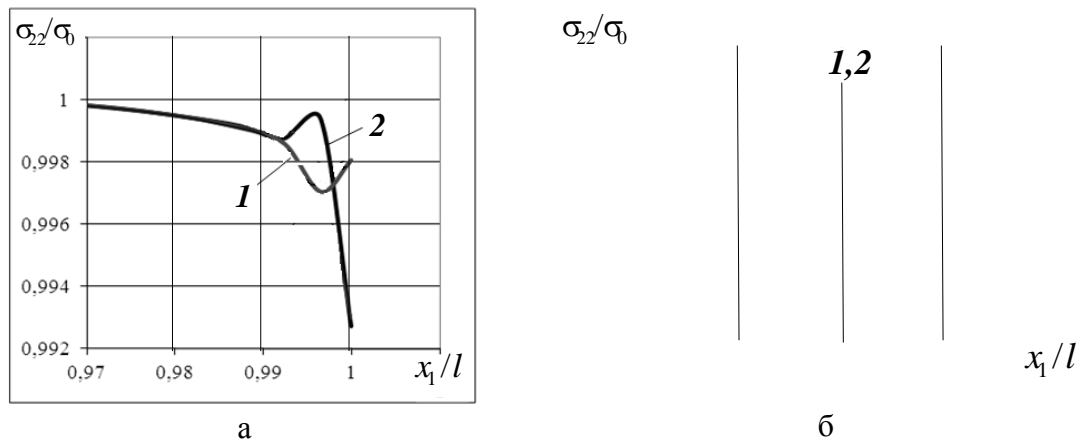


Рис.6. Концентрация напряжений σ_{22}/σ_0 в окрестности особой точки. 1 – материал 1; 2 – материал 2. а) нулевое приближение; б) решение после 1000 итераций.

3.3. Температурное нагружение составной пластинки.

Рассматривается температурное нагружение составной пластинки, схема которой приводится на рис.5. В данном примере в точке A задаются такие независимые условия (п.1.3.):

$$\sigma_{11}^{(1)} = 0, \quad \sigma_{11}^{(2)} = 0, \quad \sigma_{12}^{(1)} = 0, \quad \sigma_{12}^{(2)} = 0, \quad \sigma_{22}^{(1)} = \sigma_{22}^{(2)} = \frac{E_1 E_2 (\alpha_1 - \alpha_2) \Delta T}{(E_2 \nu_1 - E_1 \nu_2)}. \quad (30)$$

Количество заданных условий избыточно, задача является нестандартной. Решение строится итерационным методом для случая, когда материальные параметры составляющих элементов имеют значения $E_1 = 206$ ГПа, $\nu_1 = 0.3$, $\alpha_1 = 0.11 \cdot 10^{-4}$ 1/град, $\nu_2 = 0.25$, $\alpha_2 = 0.85 \cdot 10^{-5}$ 1/град, модуль Юнга E_2 принимал три значения: $E_2 = 15$ ГПа, $E_2 = 30$ ГПа и $E_2 = 70$ ГПа. Приращение температуры во всех расчетах принималось одинаковым $\Delta T = 100^\circ \text{C}$.

На рис.7а приводится нулевое приближение для напряжений σ_{22} в случае $E_2 = 30$ ГПа (стандартное решение, полученное с применением комплекса ANSYS). Видно, что это решение не согласуется с заданными ограничениями (30). Уточненное решение с использованием итерационного подхода (рис.7б) удовлетворяет всем условиям (30).

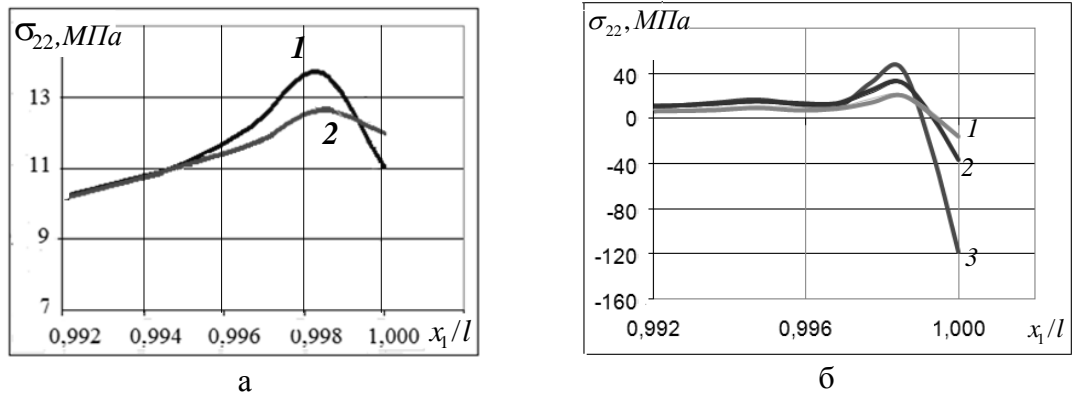


Рис.7. Напряжение σ_{22} в окрестности особой точки. а) нулевое приближение для $E_2 = 70$ ГПа: 1 – материал 1; 2 – материал 2; б) результат после 794 итераций при различных модулях Юнга E_2 : 1 – $E_2 = 15$ ГПа; 2 – $E_2 = 30$ ГПа; 3 – $E_2 = 70$ ГПа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты, полученные в данной работе, состоят в следующем:

Предложен способ анализа заданных ограничений на параметры состояния в особой точке. Такой анализ позволяет выявить количество независимых ограничений, определить тип рассматриваемой задачи, правильно выбрать метод ее решения.

Показано, что преимущественно в задачах с особыми точками количество независимых граничных условий является избыточным. Поэтому такие задачи следует рассматривать как нестандартные. Применение стандартных методов для решения нестандартных задач не гарантирует удовлетворение всех заданных ограничений на параметры состояния.

Предложен итерационный численно-аналитический метод решения нестандартных задач, с использованием которого рассмотрены примеры их решения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Williams M.L.* Stress singularities resulting from various boundary conditions in angular corners in extension // *J. of App. Mech.* – 1952. – Vol.19. – P.526-528.
2. *Уфлянд Я.С.* Интегральные преобразования в задачах теории упругости. – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1967. – 402 с.
3. *Vogy D.B.* Edge-bonded dissimilar orthogonal elastic wedges under normal and shear loading // *J. of Applied Mechanics.* – 1968. – Vol.35. – P.460-466.
4. *Vogy D.B.* Two edge-bonded elastic wedges of different materials and wedge angles under surface tractions// *Trans. ASME. Ser.E.* – 1971. – Vol.38. – N2. – P.87-96.
5. *Чобанян К.С., Алексанян Р.К.* Термоупругие напряжения в окрестности края поверхности соединения составного тела // *Изв. нац. АН респ. Армения. «Механика».* – 1971. – Т.24. – №3. – С.22-32.
6. *Аксентян О.К.* Особенности напряженно-деформированного состояния плиты в окрестности ребра // *Прикладная математика и механика.* – 1967. – №1. – С.178-186.

7. *Аксентян О.К., Луцкич О.Н.* Напряженно-деформированное состояние в окрестности вершины стыкового соединения // Прикладная механика. – 1982. – Т.18. – №7. – С.66-73.
8. *Матвеев В.П., Федоров А.Ю.* Оптимизация геометрии составных упругих тел как основа совершенствования методик испытаний на прочность клеевых соединений // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011. – Т.4. – №4. – С.63-70.
9. *Xu L.R., Kuai H., Sengupta S.* Dissimilar material joints with and without free-edge stress singularities: Part I. A Biologically Inspired Design // Experimental mechanics. – 2004. – Vol.44. – №6. – P.608-615.
10. *Xu L.R., Kuai H., Sengupta S.* Dissimilar material joints with and without free-edge stress singularities: Part II. An integrated numerical analysis // Experimental mechanics. – 2004. – Vol.44. – №6. – P.616-621.
11. *Пестренин В.М., Пестренина И.В., Ландик Л.В.* Напряженное состояние вблизи особой точки составной конструкции в плоской задаче // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2013. – Т.10. – №4. – С.78-87.
12. *Пестренин В.М., Пестренина И.В.* Механика композитных материалов и элементов конструкций. – Пермь: Перм. ун-т, 2005. – 364 с.

РЕГРЕССИОННО-ТЕНЗОРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ МНОГОФАКТОРНЫХ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ

Русанов В.А.¹, Агафонов С.В.², Данеев А.В.³, Лямин С.В.³

¹ФГБУН Институт динамики систем и теории управления СО РАН, г. Иркутск, Россия

²Иркутская государственная сельскохозяйственная академия, г. Иркутск, Россия

³Иркутский государственный университет путей сообщения, г. Иркутск, Россия

РЕЗЮМЕ

Предлагается универсальный способ апостериорного тензорного моделирования многофакторной когнитивной системы (МКС). Способ основан на представлении многомерной регрессионной модели исследуемой МКС в виде векторной суммы ковариантных тензоров конечной валентности и предъявляет минимальные требования, как к «объему» экспериментальных данных, необходимых для идентификации МКС-модели, так и вычислению согласно этой модели оптимального режима МКС. На данной методологической основе и экспериментальной базе тестовых испытаний проведен расчет среды и режима, описывающих процесс восстановления прецизионных плунжерных пар в многокомпонентном химическом растворе посредством нанесения сульфохромированного слоя, обладающего оптимальными физико-механическими свойствами.

1. МОТИВАЦИИ

Значительный теоретико-прикладной интерес регрессионный анализ первоначально приобрел в задачах определения оптимальных параметров линейных статических систем «вход-выход». В большинстве случаев исследования ограничивались применением этого анализа к конечномерным системам [1,2]; по существу задача моделирования регрессии формулировалась в терминах вычисления оптимальной (как правило, квадратичной) оценки этих параметров методом наименьших квадратов с последующим применением [3] алгоритма построения соответствующей псевдообратной матрицы. Анализ означенных вопросов апостериорного моделирования в данной работе отличается от традиционного изложения, поскольку авторы стремились выявить геометрическую (качественную) сторону регрессионного моделирования многофакторных когнитивных систем (МКС) и его приложений. В соответствии с этим ниже нет ни одной сколько-нибудь сложной формулы, зато появляется (в отличие от [1,2]) целый ряд понятий, которые ранее были в тени; поэтому пришлось излагать их достаточно подробно, не предполагая по их поводу каких-либо предварительных знаний, выходящих за рамки стандартных элементов тензорной алгебры [4] и функционального анализа [5]. Прикладной стороной в использовании нелинейной векторной регрессии в работе выступает задача аналитического решения линейно-квадратичной оптимизации, как способа обеспечения оптимальных характеристик МКС в условиях достаточно ограничительных объемов потребных вычислений на базе современных ПЭВМ.

Переходя на «язык формул», рассмотрим математические постановки означенных задач. Пусть R – поле вещественных чисел, R^n – n -мерное векторное

пространство над R с евклидовой нормой $\|\cdot\|_{R^n}$, $col(y_1, \dots, y_n) \in R^n$ – вектор-столбец с элементами $y_1, \dots, y_n \in R$ и пусть $M_{n,m}(R)$ – пространство всех $n \times m$ -матриц с элементами из R и фробениусовой матричной нормой $\|D\|_F := (\sum d_{ij}^2)^{1/2}$, $D = [d_{ij}]$. Через T_m^k обозначим пространство всех ковариантных тензоров k -ой валентности (полилинейных форм $f^{k,m} : R^m \times \dots \times R^m \rightarrow R$) с тензорной нормой $\|f^{k,m}\|_T := (\sum t_{i..j}^2)^{1/2}$, где $t_{i..j}$ – коэффициенты (координаты [4, с.96]) тензора $f^{k,m}$, значения которых заданы относительно стандартного базиса в R^m . Далее, пусть $\omega \in R^m$ – некоторый «опорный режим» исследуемой МКС (фиксированный m -вектор фактор-воздействий на МКС). Выделим к рассмотрению класс многомерных нелинейных систем типа «вход-выход», описываемых векторно-тензорным уравнением регрессии вида:

$$w(\omega + v) = c(\omega) + A(\omega)v + col\left(\sum_{j=2, \dots, k} f_1^{j,m}(v, \dots, v), \dots, \sum_{j=2, \dots, k} f_n^{j,m}(v, \dots, v)\right) + \varepsilon(\omega, v); \quad (1)$$

здесь $w(\omega + v) \in R^n$, $v \in R^m$, $c(\omega) \in R^n$, $A(\omega) \in M_{n,m}(R)$, $f_1^{j,m} \in T_m^j$, при этом вектор-функция $\varepsilon(\omega, \cdot) : R^m \rightarrow R^n$ класса $\|\varepsilon(\omega, v)\|_{R^n} = o\left(\left(v_1^2 + \dots + v_m^2\right)^{k/2}\right)$, где $col(v_1, \dots, v_m) := v$.

Постановки задач:

а) для заданного значения $\omega \in R^m$ аргумента исследуемой МКС-вектор-функции $w(\cdot) : \Omega \rightarrow R^n$, где Ω – открытая область в R^m , и любого фиксированного индекса k определить аналитические условия, при которых отображение $w(\cdot)$ удовлетворяет системе уравнений (1) с некоторыми $c(\omega)$, $A(\omega)$, $f_i^{j,m}$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq k$, $\varepsilon(\omega, \cdot)$;

б) фиксируя МКС-режим $\omega \in R^m$, построить апостериорные векторно-матрично-тензорные оценки для c , A , $f_i^{j,m}$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq k$ из решения двухкритериальной задачи параметрической оптимизации модели (1) (параметрическая идентификация нелинейной регрессионной модели МКС):

$$\begin{cases} \min\left(\sum_{l=1, \dots, q} \left(\|w_{(l)} - c - Av_{(l)} - col\left(\sum_{j=2, \dots, k} f_1^{j,m}(v_{(l)}, \dots, v_{(l)}), \dots, \sum_{j=2, \dots, k} f_n^{j,m}(v_{(l)}, \dots, v_{(l)})\right)\|_{R^n}\right)^2\right)^{1/2}; \\ \min\left(\|c\|_{R^n}^2 + \|A\|_F^2 + \sum_{i=1, \dots, n} \sum_{j=2, \dots, k} \|f_i^{j,m}\|_T^2\right)^{1/2}; \end{cases} \quad (2)$$

где $w_{(l)} \in R^n$, $v_{(l)} \in R^m$, $1 \leq l \leq q$ – векторы экспериментальных данных ($w_{(l)}$ – «реакция» на «вариацию» $v_{(l)}$ относительно МКС-режима ω), q – число экспериментов (ограничений на величину q не накладываем). Значения факторов v во множестве выборки q экспериментов имеют представление в произвольном масштабе. Это может привести к тому, что факторы с максимальной амплитудой могут стать доминирующими, как следствие необходимо предварительное масштабирование исходных данных; такое масштабирование может оказаться более эффективным средством получения оптимальной аппроксимации исследуемого поведения МКС в терминах (1), чем попытки использования различных модельных структур и стратегий оптимизации (см. также ниже замечание 2);

с) для заданного МКС-режима $\omega \in R^m$ определить вектор его вариации $v^* \in R^m$ обеспечивающий из решения задачи нелинейной « v -оптимизации» (в силу МКС-уравнений (1)) экстремум взвешенно-осредненной оценки функционального качества МКС вида:

$$F(v^*) = \text{extr} \{ F(v) : v \in R^m \}, F(v) := \sum_{i=1, \dots, n} r_i w_i(\omega + v), \quad (3)$$

где координаты вектор-функции $\text{col}(w_1(\omega + v), \dots, w_n(\omega + v)) := w(\omega + v) \in R^n$ имеют аналитические представления в силу идентифицированной модели (1) – решение задачи б), r_i – заданные весовые коэффициенты оценки качества (представленного функционалом (3)) исследуемой МКС.

2. СУЩЕСТВОВАНИЕ ВЕКТОРНОЙ РЕГРЕССИИ С ПЕРЕМЕННЫМИ В ТЕНЗОРНЫХ КЛАССАХ $T_M^J, J \leq K$

В настоящем разделе исследуем аналитические свойства нелинейных векторных регрессий многих переменных, которые «внешне» похожи на поведение голоморфных функций (задача а) из п. 1). В связи с этим изложение будет в основном основываться на понятии сильной производной (производной Фреше) [5, с.481]. Последнее ставит задачу определения остальных аналитических понятий, и в частности дифференциалов высших порядков, через конструкции сильных производных; известно [5, с.491], что данные производные по существу можно (и удобно) трактовать как некоторые математические конструкции со специальной геометрической полилинейной структурой.

Определение 1 [5, с.480]. Пусть Ω – открытая область в R^m , w – отображение множества Ω в R^n и ω – некоторая точка из Ω . Если существует такая матрица $A \in M_{n,m}(R)$, что:

$$\lim \left\{ \left\| w(\omega + v) - w(\omega) - Av \right\|_{R^n} / \left\| v \right\|_{R^m} : v \rightarrow 0 \in R^m \right\} = 0, \quad (4)$$

то A называется сильной производной (производной Фреше) от функции w в точке ω .

Замечание 1. Не трудно установить, что производная Фреше определяется матрицей частных производных $\partial w_i / \partial w_j$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq m$ в точке ω (матрица Якоби). Однако факт существования в точке ω частных производных функций w_1, w_2, \dots, w_n (здесь $w := \text{col}(w_1, \dots, w_n)$) еще не обеспечивает наличие производной Фреше, как показывает следующий достаточно простой пример.

Пример 1. Пусть $n = 1$, $m = 2$, $w(v_1, v_2) = \frac{v_1 v_2}{(v_1^2 + v_2^2)^2}$ и $w(0, 0) = 0$, $\omega = (0, 0)$.

Ясно, что $\frac{\partial w(0, 0)}{\partial v_1} = \frac{\partial w(0, 0)}{\partial v_2} = 0$ и если бы соответствующая производная Фреше

существовала, то это дало бы ее нулевой оператор а, следовательно, соотношение

(4) дало бы $\lim \left\{ \left| w(tv_1, tv_2) \right| / |t| : t \rightarrow 0 \in R, v_1^2 + v_2^2 = 1 \right\} = 0$. Между тем

в действительности этот предел равен ∞ , если только $v_1 \neq 0$ и $v_2 \neq 0$; более того, данный пример показывает, что факт наличия частных производных в некоторой точке функции w не гарантирует даже существование в этой точке ее слабой производной (производной Гато) [5, с.482] (см. также пример [5, с.484]).

Производную Фреше от w в точке ω будем обозначать через $w^{(1)}(\omega)$. При этом, если производная $w^{(1)}(\omega)$ существует для каждой точки $\omega \in \Omega$ и если кроме того $w^{(1)}$ есть непрерывное отображение из области Ω в $M_{n,m}(R)$, то отображение w называется непрерывно дифференцируемым в Ω . В силу отмеченного имеет смысл говорить о производной для отображения $w^{(1)}: \Omega \rightarrow M_{n,m}(R)$ в точке $\omega \in \Omega$, которую, если она существует (при очевидном изоморфизме пространств $M_{n,m}(R)$ и $R^{n \times m}$), называют *второй производной* отображения w и обозначают $w^{(2)}(\omega)$. Если вторая производная существует в каждой точке множества Ω , то тем самым корректно определен оператор $w^{(2)}$, производная которого называется *третьей производной* отображения w , и вообще *производная* $w^{(k)}(\omega)$ порядка k в точке ω есть по определению производная оператора $w^{(k-1)}: \Omega \rightarrow R^{n \times (k-1)m}$, при этом можно каждой производной $w^{(k)}(\omega)$ естественным образом поставить в соответствие элемент пространства k -линейных (при $k=2$ билинейных) отображений из $R^m \times \dots \times R^m$ в R^n [5, с.488]. В такой постановке дифференциал k -го порядка допускает более удобную (и наглядную) интерпретацию в конструкциях ковариантных тензоров из T_m^k .

Утверждение 1. Пусть $f_i^{k,m} \in T_m^k$, $i=1, \dots, n$, Ω – открытая область в R^m , $w: \Omega \rightarrow R^n$ и ω – некоторая точка из Ω . Если существует производная $w^{(k)}(\omega)$ порядка k , то дифференциал k -го порядка в точке $\omega \in R^m$ имеет аналитическое представление (при $v \in R^m$) вида:

$$w^{(k)}(\omega)(v, \dots, v) := \text{col}(f_1^{k,m}(v, \dots, v), \dots, f_n^{k,m}(v, \dots, v)).$$

Путь, по которому эволюционировала теория регрессионных моделей, во многом характерен для общей теории систем (модель МКС в парадигме «черного ящика» [6, с.21]). Сначала замечаются сходства некоторых ситуаций, аналогии и повторения в рассуждениях, затем предпринимаются попытки выделить понятия, при условии, что данный анализ достаточно глубок, есть надежда найти теорию, которая охватывает многие примеры, и достойна самостоятельного изучения. Именно на этом пути после длительного экспериментирования была получена методология планирования эксперимента в построении оптимальных характеристик когнитивного процесса [1]. В следующем утверждении установим важное аналитическое свойство, которым должна обладать вектор-функция w , с целью прояснения: когда отображение w удовлетворяет (по крайней мере при некоторых разумных дополнительных предположениях о нем) одному из тех специальных конкретных законов, от которых произошло понятие тензорной регрессии (1), как естественного продукта непрерывного процесса консолидации, абстрагирования и обобщения.

Утверждение 2. Пусть Ω – открытая область в R^m , w – отображение множества Ω в R^n и ω – некоторая точка из Ω . Если существует производная $w^{(k)}(\omega)$, которая есть равномерно непрерывная функция от ω в Ω , то векторное отображение $w: \Omega \rightarrow R^n$ удовлетворяет системе (1) с некоторыми тензорами $f_i^{j,m}$, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq k$, вектором $c(\omega) = w(\omega)$ и $(n \times m)$ -матрицей $A(\omega) = w^{(k)}(\omega)$; утверждение 2 по существу формулирует некоторый качественный факт

в вопросе существования регрессии класса (1) (если не накладывать чрезмерно слабых аналитических требований, типа приведенных в примере 1, на конструкцию вектор-функции регрессии w).

3. ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ БИЛИНЕЙНО-ТЕНЗОРНОЙ СТРУКТУРЫ НЕЛИНЕЙНОЙ ВЕКТОРНОЙ РЕГРЕССИИ

Начнем с уточнения конструкции (1); это уточнение имеет довольно специальный (частный) характер, но его использование в потенциале позволяет не привлекать сложных вычислительных алгоритмов в оценке оптимального вектора параметров режима МКС.

Рассмотрим случай $k=2$. В такой постановке уравнение (1) примет вид:

$$w(\omega + v) = c(\omega) + A(\omega)v + \text{col}(v^T B_1(\omega)v, \dots, v^T B_n(\omega)v) + \varepsilon(\omega, v), \quad (5)$$

где $B_i(\omega) \in M_{m,m}(R), i=1, \dots, n$. При этом считаем, что каждая $B_i(\omega)$ – верхняя треугольная матрица [7, с.38], \dots^T – операция транспонирования. В силу утверждения 2 полагаем:

$$c(\omega) = w(\omega), \quad A(\omega) = w^{(1)}(\omega).$$

Параметрическую идентификацию в многокритериальной векторно-матрично-тензорной постановке (2) для многосвязной нелинейной модели типа «черный ящик» в классе регрессий (5), свяжем с понятием нормального псевдорешения (канонического решения по методу наименьших квадратов) для конечномерной системы линейных алгебраических уравнений.

Определение 2 [7, с.501]. Нормальным псевдорешением системы линейных уравнений

$$Dx = d, \quad D \in M_{q,p}(R), \quad d \in R^q,$$

называется вектор $x \in R^p$, имеющий наименьшую евклидову норму $\|x\|_{R^p}$ среди всех векторов, приносящих минимум величине нормы $\|Dx - d\|_{R^q}$.

Далее, обозначим через E_q – единичную $q \times q$ -матрицу и пусть $D \in M_{q,p}(R)$. Через D^+ обозначим обобщенную обратную (псевдообратную) матрицу Мура-Пенроуза [7, с.500] для матрицы D ; асимптотическая конструкция псевдообратной матрицы имеет следующий аналитический вид:

$$D^+ = \lim \left\{ D^T (DD^T + \tau E_q)^{-1} : \tau \rightarrow 0 \right\};$$

везде далее знак « $^+$ » означает операцию псевдообращения соответствующей матрицы (чем больше нулей среди элементов матрицы D и «чем лучше» они расположены, тем легче вычислить D^+).

Лемма 1 [8, с.35]. $x = D^+d$ – нормальное псевдорешение системы $Dx = d, D \in M_{q,p}(R), d \in R^q$.

Для взаимноувязывания параметров системы (5) и данных генеральной выборки обозначим через $\hat{u}_{(l)} \in R^{1+m(m+3)/2}$ вектор, имеющий (с учетом верхней треугольной структуры матриц $B_i, i=1, \dots, n$) следующее координатное представление:

$$\begin{aligned} \hat{u}_{(l)} &:= \text{col}(1, v_{1(l)}, \dots, v_{m(l)}, v_{1(l)}v_{1(l)}, \dots, v_{r(l)}v_{s(l)}, \dots, v_{m(l)}v_{m(l)}) \in R^{1+m(m+3)/2}, \quad 1 \leq r \leq s \leq m, \\ \text{col}(v_{1(l)}, \dots, v_{m(l)}) &:= v_{(l)} \in R^m, \quad 1 \leq l \leq q. \end{aligned} \quad (6)$$

Назовем $U := [\hat{u}_{(1)}, \dots, \hat{u}_{(q)}]^T \in M_{q, 1+m(m+3)/2}(R)$ полной матрицей экспериментальных данных входных воздействий, соответственно, $\beta_i := \text{col}(w_{i(1)}, \dots, w_{i(q)}) \in R^q$ – полным вектором экспериментальных данных для выходного сигнала w_i ($i = 1, \dots, n$). Далее, согласно (5) линейно-квадратичная форма правой части уравнения МКС-регрессии для ее i -го выходного сигнала равна:

$$c_i + \sum_{1 \leq j \leq m} a_{ij} v_j + \sum_{1 \leq g \leq p \leq m} b_{igp} v_g v_p \quad (i = 1, \dots, n), \quad (7)$$

Теперь введем в рассмотрение $(1+m(m+3)/2)$ – вектор z_i параметров (коэффициентов) i -го уравнения (уравнения (7)) апостериорной МКС-модели:

$$z_i := \text{col}(c_i, a_{i1}, \dots, a_{im}, b_{i11}, \dots, b_{igp}, \dots, b_{imm})$$

для модели регрессии (7). Ясно, что в силу уравнений (7) любой фиксированный набор из n таких векторов полностью определяет (задает) аналитическое представление модели относительно некоторой системы «вход-выход» типа (5):

$$z_i := \text{col}(c_i, a_{i1}, \dots, a_{im}, b_{i11}, \dots, b_{igp}, \dots, b_{imm}) \in R^{1+m(m+3)/2}, \quad 1 \leq g \leq p \leq m.$$

Утверждение 3. Параметрическая идентификация (2) в терминах регрессионной модели (5) имеет алгебраическое решение вида:

$$z_i^* = U + \beta_i, \quad i = 1, \dots, n; \quad (8)$$

где U – полная матрица экспериментальных данных входных воздействий (6), β_i – полный вектор экспериментальных данных выходного сигнала w_i ($i = 1, \dots, n$), индуцированного воздействиями (6).

Следствие 1 [9, с.263]. Пусть $z_i^* = U + \beta_i$ ($i = 1, \dots, n$). Тогда каждый вектор z параметров регрессионной модели (5), характеризующей поведение МКС, такой, что имеет место $z \neq z_i^*$, удовлетворяет одному из следующих двух условий:

$$1) \|\beta_i - Uz\|_{R^q} > \|\beta_i - Uz_i^*\|_{R^q}, \text{ или, в противном случае}$$

$$2) \|\beta_i - Uz\|_{R^q} = \|\beta_i - Uz_i^*\|_{R^q} \text{ и } \|z\|_{R^{1+m(m+3)/2}} > \|z_i^*\|_{R^{1+m(m+3)/2}}.$$

Замечание 2. Качественные оценки 1), 2) следствия 1 зависят от «объема» апостериорной информации (количества экспериментов q): если $q > 1+m(m+3)/2$, то, как правило, реализуется пункт 1), если $q \leq 1+m(m+3)/2$ – весьма вероятно, что имеет место методологическая позиция 2).

В следующем разделе приступим к многомерному геометрическому исследованию «минимаксных» свойств решений нелинейной векторной регрессии (5); важной чертой полученных ниже аналитических результатов в решении оптимизационной задачи (3) является их явная алгебраическая зависимость от идентифицированных параметров билинейной тензорной структуры (5).

4. ОПТИМИЗАЦИЯ УПРАВЛЕНИЯ МКС НА БАЗЕ БИЛИНЕЙНО-ТЕНЗОРНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ЕГО ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ МОДЕЛИ

Идентификация функциональной модели МКС класса (5), исследовавшаяся в предыдущем разделе, является необходимым требованием при выборе «управления» v . Однако вариантов подобного управления очевидно много и необходимо выбрать среди них тот, который оптимален с точки зрения некоторого формального критерия, характеризующего определенное «физико-

техническое» качество данного управления. В этом разделе рассмотрим критерий оптимальности (3) (с приоритетным выбором коэффициентов $r_i, 1 \leq i \leq n$ согласно, например, [10]) и обсудим для него алгоритмическую технику получения оптимального управления v^* .

Утверждение 4. Пусть B_i – идентифицированная матрица модели (5) и $D_i := (B_i + B_i^T)$, тогда показатель функционального качества МКС вида $J_i(v) := w_i(\omega + v)$ может в силу (5) иметь внутренний экстремум только в точке $v_i^* \in R^m$ (ниже $\{e_1, \dots, e_n\}$ – стандартный базис в R^n):

$$v_i^* = -D_i^{-1} A^T e_i. \quad (9)$$

При этом если $v^T D_i v$ – отрицательно определенная квадратичная форма, то функционал $J_i(v)$ имеет в v_i^* максимум, если $v^T D_i v$ – положительно определенная форма, то $J_i(v)$ претерпевает в v_i^* минимум; в обоих случаях v_i^* – стационарная точка эллиптического типа. Наконец, если $v^T D_i v$ принимает как положительные, так и отрицательные значения и $v^T D_i v \neq 0, v \neq 0$, то экстремум в стационарной точке отсутствует, а v_i^* – точка гиперболического типа (седловая точка).

Замечание 3. Координаты стационарной точки (9) позволяют ответить на вопрос о значении функционала качества $J_i(v)$ (прогноз состояния МКС), когда данная точка является точкой относительно минимума или относительно максимума, на что указывает следующее следствие.

Следствие 2. Если D_i – положительно определенная матрица (аналогично, отрицательно определенная матрица), то минимальное (соответственно, максимальное) значение функционала $J_i(v^*)$ равно $\frac{c_i - e_i^T A D_i^{-1} A^T e_i}{2}$, где c_i – i -ая координата вектора $c \in R^n$ системы (5).

Каждый функционал $J_i(v), i = 1, \dots, n$ при соответствующем истолковании может быть обобщен на случай целевого функционала (3), геометрический анализ которого рассмотрим ниже. Таким образом, утверждение 4 и формула (9) позволяют за конечную последовательность действий вычислять геометрические координаты стационарной точки задачи оптимизации (3). Ясно, что данные координаты управления v определяют в терминах идентифицированных коэффициентов билинейной системы (5) технологические параметры оптимального режима функционирования МКС:

Утверждение 5.

Пусть B_i – матрица системы (5) и пусть $D_i := (B_i + B_i^T)$, тогда стационарная точка $v^* \in R^m$ задачи оптимизации (3) имеет следующее аналитическое представление:

$$v^* = -(r_1 D_1 + \dots + r_n D_n)^{-1} A^T (r_1 e_1 + \dots + r_n e_n), \quad (10)$$

при этом достаточным условием, что v^* обеспечивает решение (3) вида $\max \{F(v) : v \in R^m\}$ является требование, чтобы стационарная точка v^* имела эллиптический характер типа:

$$\det [d_{ij}]_p < 0, \quad p = 1, \dots, m, \quad (11)$$

где $[d_{ij}]_p \in M_{p,p}(R)$ – главные подматрицы [7, с.30] матрицы $D := (r_1 D_1 + \dots + r_n D_n)$, что эквивалентно, собственные числа λ_i матрицы D отвечают неравенствам:

$$\lambda_i < 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (12)$$

Замечание 4. Если условия (11), (12) не выполняются, то критическая точка (10) является либо гиперболической (т.е. седловой), либо параболической точкой; говоря более формально, факт наличия седловой точки гарантирует смена хотя бы в одном (но не во всех) отношении неравенства «<» из (11), (12) на «>», при этом аналогичная смена «<» на «≤», возможно вызывает у функционала качества в стационарном положении структуру параболической точки. Для задачи оптимизации $\min \{F(v) : v \in R^m\}$ в соотношениях (11), (12) необходимо поменять знак неравенства на «>».

Изложенный подход методологически расширяет стандартную процедуру планирования эксперимента [1]. При этом если расчетные (прогнозируемые) координаты стационарной точки (10) по каким-либо физико-техническим параметрам выходят за область адекватности идентифицированной модели (5), то необходимо провести дополнительный эксперимент, т.е. осуществить замер $w_{(q+1)}$ для вектора $v_{(q+1)}$, «максимально близкого» к точке (10), с внесением полученного результата $\hat{u}_{(q+1)}$ в расширенную матрицу экспериментальных данных U . После чего необходимо сделать пересчет всех вышеизложенных этапов процесса оптимизации режима МКС; при необходимости подобный эксперимент, параметрическую идентификацию (2) и оптимизацию (3) необходимо повторить. Эта процедура (по существу научный метод) описывается следующим образом: 1) наблюдай происходящее и на основе этих наблюдений разработай математическую модель, которая в потенциале может дать истинное представление о исследуемой физической действительности, 2) проверь эту модель дальнейшими наблюдениями и опытами, проследив, сбываются ли предсказания о исследуемом процессе, основанные на построенной модели, если нет, – вернись к пункту 1).

5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО РЕЖИМА СУЛЬФОХРОМИРОВАНИЯ ПРЕЦИЗИОННОЙ ПЛУНЖЕРНОЙ ПАРЫ

В этом разделе на методологической базе пп.1-4 и экспериментальной основе тестовых испытаний проведем численное моделирование (в программной среде [11]) оптимального режима, описывающего многофакторный процесс химико-термической обработки плунжерных пар посредством синтеза (на обрабатываемой поверхности) сульфохромированного слоя, обладающего оптимальными физико-механическими свойствами.

Без нарушения общности в качестве опорного режима процесса сульфохромирования можно принять некоторый эмпирически выделенный из общего состава экспериментальных данных вектор $\omega \in R^m$; ясно, что в этом случае координаты v_1, \dots, v_m вектора v следует рассматривать как отклонения относительно означенного МКС-режима $\omega \in R^m$;

Параметры «опорного МКС-режима»:

$\omega_1=125^\circ\text{C}$,
 $\omega_2=0,92$ час,
 $\omega_3=43\%$ NaOH,
 $\omega_4=0,5\%$ S,
 $\omega_5=1\%$ Na₂S,
 $\omega_6=2\%$ Na₂S₂O₃,
 $\omega_7=10\%$ CrO₃.

Многофакторный химико-термический МКС-процесс синтеза сульфохромированного слоя в среде многокомпонентного химического раствора в серии из q тестовых экспериментов (в силу $m=7$ и пункта 2) следствия 1 «рекомендация» числа экспериментов суть $q \leq 35$) опишем следующими химико-технологическими переменными:

«Входные данные»:

$v = \text{col}(v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7) \in R^7$ – вектор вариаций относительно опорного режима $\omega = \text{col}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6, \omega_7)$ регулируемых характеристик процесса низкотемпературного сульфохромирования плунжерной пары:

v_1 – вариация (относительно ω_1) температуры процесса 10^{-2} [°C],
 v_2 – вариация (относ. ω_2) длительности процесса [час],
 v_3 – вариация (относ. ω_3) концентрации гидроксид натрия 10^{-2} NaOH [%],
 v_4 – вариация (относ. ω_4) концентрации серы S [%],
 v_5 – вариация (относ. ω_5) концентрации сульфида натрия Na₂S [%],
 v_6 – вариация (относ. ω_6) конц. гипосульфита натрия 10^{-1} Na₂S₂O₃ [%],
 v_7 – вариация (относ. ω_7) концентрации трех окись хрома 10^{-1} CrO₃ [%];

«Выходные данные»:

$w = w_1 \in R$ – характеристика сульфохромированного слоя плунжерной пары:
 w_1 – толщина сульфохромированного слоя [мкм].

Принимая во внимание решение задачи параметрической идентификации (2), уравнения нелинейной модели (5) билинейно-тензорной регрессии (описывающей процесс сульфохромирования в среде многокомпонентного химического раствора) примут следующий аналитический вид:

$$\begin{aligned}
 w_1(\omega + v) = & 9 - 82,2838v_1 - 40,3136v_2 + 2,4814v_3 + 24,8137v_4 + 24,8137v_5 + \\
 & + 12,4069v_6 + 24,8137v_7 - 186,0956v_1^2 - 180,2625v_1v_2 - 12,3797v_1v_3 - 123,7968v_1v_4 - \\
 & - 123,7968v_1v_5 - 61,8984v_1v_6 - 123,7968v_1v_7 - 62,7154v_2^2 + 15,1415v_2v_3 + 151,4146v_2v_4 + (13) \\
 & + 151,4146v_2v_5 + 75,7073v_2v_6 + 151,4146v_2v_7 - 0,0867v_3^2 - 0,8668v_3v_4 - 0,8668v_3v_5 - \\
 & - 0,4334v_3v_6 - 0,8668v_3v_7 - 8,6681v_4^2 - 8,6681v_4v_5 - 4,334v_4v_6 - 8,6681v_4v_7 - 8,6681v_5^2 - \\
 & - 4,334v_5v_6 - 8,6681v_5v_7 - 2,167v_6^2 - 4,334v_6v_7 - 8,6681v_7^2
 \end{aligned}$$

Критический анализ «прогнозной эффективности» предложенной выше модели математического описания физико-химических свойств процесса сульфохромирования, выраженный уравнениями нелинейной регрессии (5) (т.е. (13)), дает относительное сравнение двух последних колонок Табл.1; здесь w_1 – эксперимент, а \hat{w}_1 – прогноз согласно уравнений (13).

Таблица 1.

Экспериментальные данные задачи идентификации билинейно-тензорной модели процесса получения сульфохромированного слоя.

п/п №№	Параметры режима нанесения сульфохромированного слоя							Толщина слоя	
	$w_1 + v_1$	$w_2 + v_2$	$w_3 + v_3$	$w_4 + v_4$	$w_5 + v_5$	$w_6 + v_6$	$w_7 + v_7$	$w_1(\omega + v)$	$\hat{w}_1(\omega + v)$
1	1	0,5	0,4	0,2	0,7	0,05	0,7	7,2	7,200
2	1,1	0,7	0,41	0,3	0,8	0,1	0,8	8,1	8,100
3	1,2	0,83	0,42	0,4	0,9	0,15	0,9	8,7	8,700
4	1,25	0,92	0,43	0,5	1	0,2	1	9	9,00
5	1,3	1	0,44	0,6	1,1	0,25	1,1	9,5	9,500
6	1,35	1,08	0,45	0,7	1,2	0,3	1,2	9,5	9,500
7	1,4	1,17	0,46	0,8	1,3	0,35	1,3	9,5	9,500

Комбинируя предыдущие результаты, режим сульфохромирования, обеспечивающий максимальную толщину физической структуры сульфохромированного слоя обрабатываемой поверхности прецизионной плунжерной пары, свяжем с решением оптимизационной задачи (3) вида:

$$\max \{F(v) : v \in R^7\}, \quad F(v) := J_1(v). \quad (14)$$

Разработка новых технологических приемов обработки металлов требует наличия адекватной математической модели, позволяющей предсказывать взаимосвязанное влияние различных факторов физико-химической среды металлообработки и механико-геометрических характеристик обрабатываемой поверхности детали на получаемые результаты. Математическая модель оптимизации (14) для многофакторного процесса сульфохромирования дает такую возможность. Утверждение 4 и формула (9), позволяющие вычислять геометрические координаты стационарной точки, применительно к задаче (14) определяют (в терминах системы (13)) следующие высокоэффективные технологические параметры режима сульфохромирования: в силу (13) стационарная точка (9) в координатно-векторном представлении имеет вид следующего вектора-столбца:

$$\omega + v^* = [1,1593 \quad 0,6791 \quad 0,3475 \quad 0,4917 \quad 0,9917 \quad 0,1835 \quad 0,9917]^T. \quad (15)$$

Поскольку собственные числа матрицы D_1 соответственно равны:

$$\lambda_1 = -246,1546; \quad \lambda_2 = -178,7824; \quad \lambda_3 = -4,334; \quad \lambda_4 = -4,334; \\ \lambda_5 = -1,3357; \quad \lambda_6 = -0,054; \quad \lambda_7 = 157,9257, \quad (16)$$

это говорит о наличии стационарной седловой точки у функционала $F(v)$; см. ниже рис.1-6.

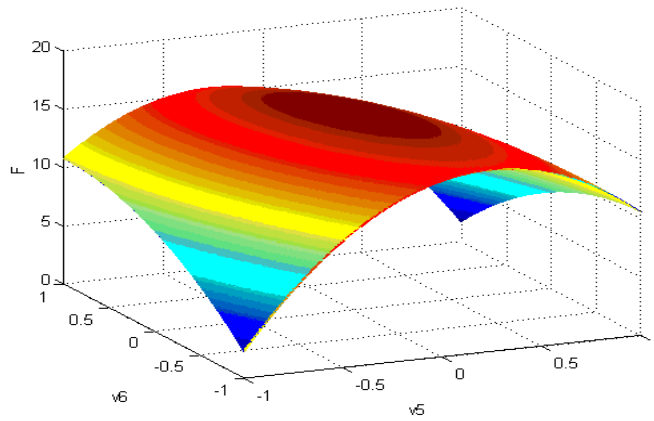


Рис.1. Фрагмент целевого функционала $F(v_5, v_6)$ в окрестности стационарной точки (15).

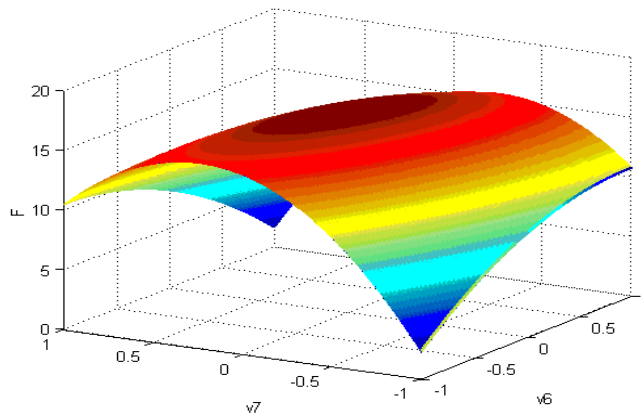


Рис.2. Фрагмент целевого функционала $F(v_6, v_7)$ в окрестности стационарной точки (15).

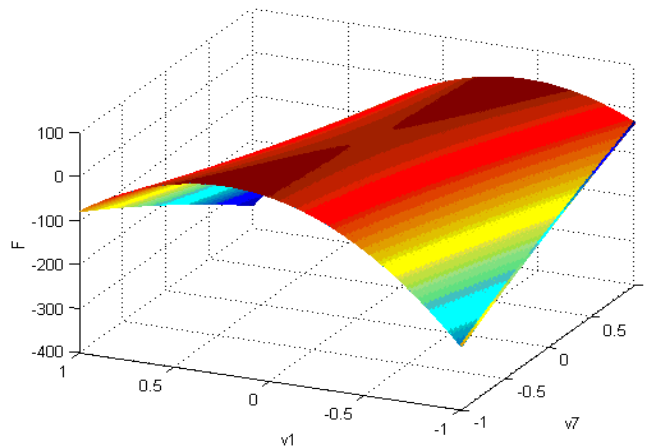


Рис.3. Фрагмент целевого функционала $F(v_7, v_1)$ в окрестности стационарной точки (15).

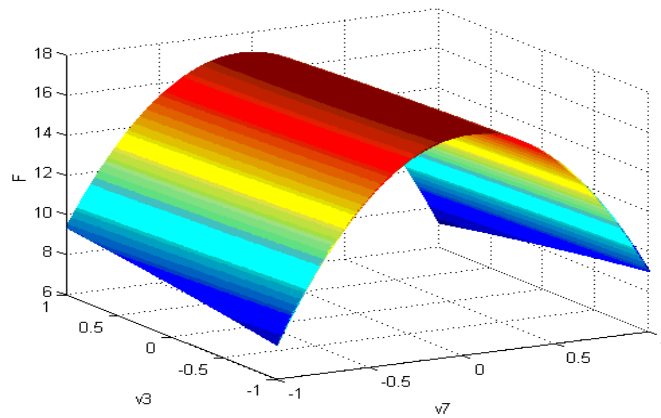


Рис.4. Фрагмент целевого функционала $F(v_7, v_3)$ в окрестности стационарной точки (15).

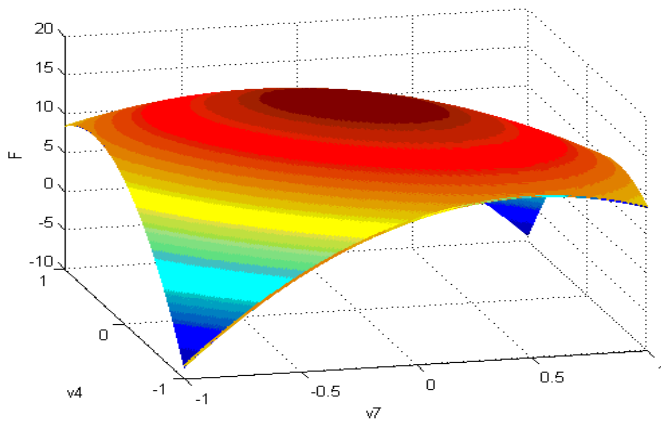


Рис.5. Фрагмент целевого функционала $F(v_7, v_4)$ в окрестности стационарной точки (15).

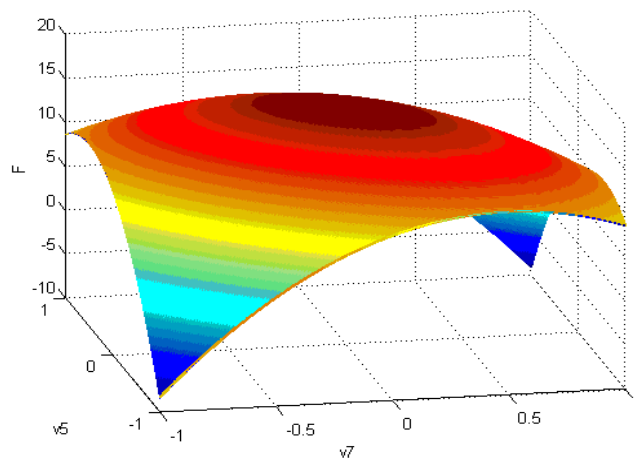


Рис.6. Фрагмент целевого функционала $F(v_7, v_5)$ в окрестности стационарной точки (15).

Согласно (12), (16) в стационарной (седловой) точке v^* функционал качества F достигает своего «max» по переменным v_1, \dots, v_6 и соответственно

«min» по v_7 (рис.1-6). Физико-химический смысл этого математического положения (гиперболический характер $F(v^*)$) в силу расчета (15) означает, что для выбранной структуры (14) функционала $F(v)$ должно выполняться следующее технологическое правило: поскольку v^* – гиперболическая точка функционала $F(v)$, то в случае, если имеет место $\omega_7=9,917\%$ CrO_3 , необходимо в процессе сульфохромирования выполнить условия:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= 115,93^\circ\text{C}, \\ \omega_2 &= 0,6791 \text{ час}, \\ \omega_3 &= 34,75\% \text{ NaOH}, \\ \omega_4 &= 0,4917\% \text{ S}, \\ \omega_5 &= 0,9917\% \text{ Na}_2\text{S}, \\ \omega_6 &= 1,835\% \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3, \end{aligned}$$

если реализуется положение $\omega_7=\beta=9,917\%$ CrO_3 , то необходимо в полном объеме (т.е. включая параметрическую идентификацию (2)) решать «коррекцию» задачи (3) вида:

$$\max \{ F(v) : \omega_7 = \beta \ \& \ v \in R^6 \};$$

в этой связи приведем еще один «качественный результат» (выявленную закономерность): независимые оптимальные факторы ω_i , $i=1, \dots, 6$ данной МКС по существу определяет фактор ω_7 .

В случае нарушения этого химико-технологического правила неминуемо будет снижаться эффективность процесса сульфохромирования в смысле достижения физико-механического показателя $F(v)$. Это правило, конечно же, в большей степени инженерное (не математическое); с чисто математической точки зрения оно лишь уточняет поведение химико-технологического процесса, обладающего седловой точкой, но содержательно все равно необходимо описать (объяснить на эвристическом уровне) исходный выбор ω_7 – процентного содержания (в растворе) CrO_3 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Задачей работы было дать точное и удобное определение многомерной нелинейной векторной регрессии на языке тензорной алгебры, то есть дать такой язык апостериорного моделирования, на который можно перевести регрессионные математические утверждения, и записи на котором были бы компактны и удобны в обращении (кроме того, новый способ записи нередко порождает новые результаты). В данном контексте разработаны алгоритмы построения нелинейной математической модели «вход-выход», позволяющей определять геометрические координаты оптимального поведения МКС в распределенной среде технологических параметров, используемых для расчета [11] эффективного режима МКС. Предложенная тензорная регрессионная модель использует идентифицированные (на базе экспериментальных данных) многомерные билинейные уравнения, что позволяет адекватно описать поведение МКС в широком диапазоне вариаций технологических параметров ее функционирования (многофакторного поведения).

Изложенные в статье идеи можно развить в нескольких направлениях теоретико-прикладных изысканий [12-14] по совершенствованию предложенных

выше алгоритмов расчета оптимальной технологии построения МКС, а также расширению рамок адекватности регрессионных уравнений МКС за счет дополнительного исследования факторов ее нелинейности:

- на разработку математической процедуры выбора весовых коэффициентов r_i , $1 \leq i \leq n$ линейной свертки (3), исходя из гарантированного удовлетворения спектральных условий (12), обеспечивающих эллиптический характер стационарной точки (10) целевого функционала F ;
- на расширение билинейной формы уравнений векторной регрессии (5) «тейлоровским разложением» вектор-функции w более высокого порядка (согласно утверждения 2);
- на статистическое описание и оптимизацию функционального поведения МКС [15];
- на включение в химико-термическую модель (13) дополнительных, к рассмотренным в п. 5, координат вектор-функции нелинейной регрессии, в частности, учет таких физико-механических параметров нанесения сульфохромированного слоя, как: поверхностная твердость, хрупкость, износостойкость, фрикционный коэффициент (коэффициент сухого трения);
- на развитие нано-метрических показателей синтеза сульфохромированного слоя и их качественный учет в структуре нелинейно-тензорной многомерной МКС-регрессии (1).

ЛИТЕРАТУРА

1. Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976.
2. Бернштейн А.В., Кулешов А.П., Бурнаев Е.В. Об одной методологии построения аппроксимаций многомерных зависимостей / IV-я Межд. конференция «Параллельные вычисления и задачи управления» РАСО'2008. Пленарные и избранные доклады. – М.: Ин-т проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, 2008. – С.56-62.
3. Андриевский Б.Р., Фрадков А.Л. Элементы математического моделирования в программных средах MATLAB и SCILAB. – СПб: Наука, 2001.
4. Ван дер Варден Б.Л. Алгебра. – М.: Наука, 1979.
5. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа – М.: Наука, 1976. – 544 с.
6. Месарович М., Такахара Я. Общая теория систем: математические основы. – М.: Мир, 1978. – 312 с.
7. Хорн Р., Джонсон Ч. Матричный анализ. – М.: Мир, 1989.
8. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – М.: Наука, 1988.
9. Ланкастер П. Теория матриц. – М.: Наука, 1982.
10. Макаров И.М., Виноградская Т.М., Рубчинский А.А., Соколов В.Б. Теория выбора и принятия решений. – М.: Наука, 1982.
11. Агафонов С.В., Шарпинский Д.Ю., Русанов В.А., Удилов Т.В. Гибридный регрессионный комплекс «ГРЕК» / Свидетельство Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам о регистрации программы для ЭВМ, № 2008614737 от 2.10.2008 г.

12. *Rosenberg A.E., Shen D.W.C.* On the scientific method and the foundation of system identification. / In: *Modelling, Identification and Robust Control*. – North Holland. Amsterdam, 1986. – P.563-580.
13. *Ljung L., Söderström T.* *Theory and Practice of Recursive Identification*. – Cambridge, Massachusetts: MIT Press, 1983.
14. *Ljung L.* A non-probabilistic framework for signal spectra / 24th Conf. Decis. Control. Proceedings. – Ft Lauderdale. Florida, 1985. – P.1056-1060.
15. *Rissanen J.* Stochastic complexity and statistical inference. – Unpublished manuscript, I.B.M. Research K54/282. – San Jose, California, 1985.

ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В МЕХАНИКЕ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД. РАЗРАБОТКА, АНАЛИЗ И ПРИЛОЖЕНИЕ

Суров В.С.¹, Березанский И.В.¹, Степаненко Е.Н.²

¹Южно-Уральский государственный университет (Национальный исследовательский университет), г. Челябинск, Россия

²Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

РЕЗЮМЕ

Обсуждается ряд гиперболических моделей многоскоростной гетерогенной среды. Показано, что модель среды с газодинамическим ядром качественно и количественно описывает поведение газожидкостных смесей во всем диапазоне изменения концентрации газа в смеси. В рамках этой модели с использованием узлового метода характеристик рассчитан ряд задач о распаде произвольного разрыва в дисперсной среде.

1. ВВЕДЕНИЕ

Ранние модели многокомпонентных гетерогенных смесей не являлись гиперболическими, что приводило при их использовании к появлению различного рода нефизичных эффектов связанных, например, с наличием волн распространяющихся с бесконечно большими скоростями. Кроме того, для этих моделей, описывающих течение гетерогенных сред, задача Коши не всегда оказывалась корректной, что затрудняет применение численных методов [1-2]. Поэтому в дальнейшем основные усилия были направлены на разработку гиперболических моделей гетерогенных сред.

Первая гиперболическая модель двухфазной среды была предложена в [3], в которой для достижения гиперболичности использовалось несколько давлений (по количеству фракций). Так как число неизвестных величин в системе, выражающих законы сохранения увеличилось, поэтому для ее замыкания потребовались дополнительные уравнения. Отметим, что эти дополнительные уравнения не имеют строгого физического обоснования. Современные модели гетерогенных сред [4-7] также построены на концепции нескольких давлений.

2. ОБЗОР ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

Классифицируем наиболее часто используемые гиперболические модели для бинарной смеси сжимаемых фракций с точки зрения характеристического анализа систем уравнений. К классу, описывающие расслоенные течения, отнесем модели Вагг'а – Nunziato и Саурел'а – Абгралл'а [8], чьи уравнения имеют вид:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u^i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \mu(p_g - p_{liq}), \quad \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_g \rho_g u_g^2 + \alpha_g p_g)}{\partial x} = p^i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \lambda(u_{liq} - u_g),$$

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g E_g}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_g (\rho_g E_g + p_g) u_g)}{\partial x} = p^i u^i \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} + \mu p^i (p_{liq} - p_g) + \lambda u^i (u_{liq} - u_g),$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}} u_{\text{liq}}}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}} u_{\text{liq}}}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}} u_{\text{liq}}^2 + \alpha_{\text{liq}} p_{\text{liq}})}{\partial x} &= -p^i \frac{\partial \alpha_{\text{g}}}{\partial x} - \lambda(u_{\text{liq}} - u_{\text{g}}), \\ \frac{\partial \alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}} E_{\text{liq}}}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_{\text{liq}} (\rho_{\text{liq}} E_{\text{liq}} + p_{\text{liq}}) u_{\text{liq}})}{\partial x} &= -p^i u^i \frac{\partial \alpha_{\text{g}}}{\partial x} - \mu p^i (p_{\text{liq}} - p_{\text{g}}) - \lambda u^i (u_{\text{liq}} - u_{\text{g}}), \end{aligned} \quad (1)$$

где $p^i = \alpha_{\text{g}} p_{\text{g}} + \alpha_{\text{liq}} p_{\text{liq}}$, $u^i = \frac{\alpha_{\text{g}} \rho_{\text{g}} u_{\text{g}} + \alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}} u_{\text{liq}}}{\alpha_{\text{g}} \rho_{\text{g}} + \alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{liq}}}$ – для модели Saurel'a – Abgrall'a

и $p^i = p_{\text{g}}$, $u^i = u_{\text{liq}}$ – для модели Baer'a – Nunziato, $E = \varepsilon + \frac{1}{2} u^2$ – удельная полная энергия, ε – удельная внутренняя энергия. Корни характеристического уравнения системы (1) равны $u_{\text{g}} \pm c_{\text{g}}$, u_{g} , $u_{\text{liq}} \pm c_{\text{liq}}$, u_{liq} , u^i (индексами g, liq и i отмечены величины, относящиеся к газу, жидкости и межфракционной границе).

Схематическое изображение распространения возмущений в компонентах представлено на рис.1.

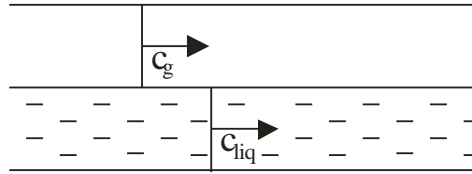


Рис.1. Схематическое изображение скоростей распространения возмущений для модели Baer'a – Nunziato.

Газо-пузырьковые течения описываются с использованием модели из [9], уравнения имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial x} &= \Phi_{c,k}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k^2}{\partial x} + \alpha_k \frac{\partial p_k}{\partial x} - (p_k - p^i) \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} &= \Phi_{m,k}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k \varepsilon_k}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k \varepsilon_k}{\partial x} &= \Phi_{\varepsilon,k}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\Phi_{c,k}$, $\Phi_{m,k}$ и $\Phi_{\varepsilon,k}$ – источниковые функции, представляющие собой некоторые алгебраические выражения (см. [9]), $k=g, \text{liq}$. Система (2) предназначена для расчета течений пузырьковых жидкостей, в которой учтены силы поверхностного натяжения. Корни соответствующего характеристического уравнения равны:

$$u_{\text{g}}, u_{\text{g}} \pm c_{\text{g}}, u_{\text{liq}}, u_{\text{liq}} \pm c_{\text{sm}},$$

где

$$c_{\text{sm}} = c_{\text{liq}} \sqrt{\frac{\rho_{\text{g}} c_{\text{g}}^2}{\alpha_{\text{liq}} \rho_{\text{g}} c_{\text{g}}^2 + \alpha_{\text{g}} \rho_{\text{liq}} c_{\text{liq}}^2}}. \quad (3)$$

Схематическое изображение отношения корней характеристического уравнения к средам представлено на рис.2.

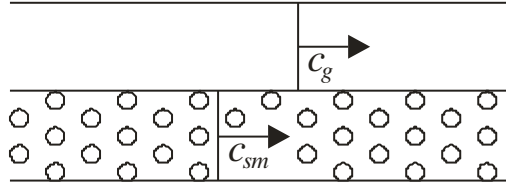


Рис.2. Схематическое изображение скоростей распространения возмущений для модели газо-пузырьковых течений.

Газо-дисперсные течения описываются моделью из [10], уравнения которой имеют вид:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \mathbf{H} \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} = \mathbf{S}, \quad (4)$$

где

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \alpha_g \rho_g \\ \alpha_g \rho_g u_g \\ \alpha_g \rho_g E_g \\ \alpha_{liq} \rho_{liq} \\ \alpha_{liq} \rho_{liq} u_{liq} \\ \alpha_{liq} \rho_{liq} E_{liq} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \alpha_g \rho_g u_g \\ \alpha_g \rho_g u_g^2 + \alpha_g p \\ \alpha_g \rho_g u_g E_g + \alpha_g u_g p \\ \alpha_{liq} \rho_{liq} u_{liq} \\ \alpha_{liq} \rho_{liq} u_{liq}^2 + \alpha_{liq} p \\ \alpha_{liq} \rho_{liq} E_{liq} + \alpha_{liq} u_{liq} p \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 \\ -p^i \\ -p^i u^i \\ 0 \\ p^i \\ p^i u^i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ -c_D \alpha_g \alpha_{liq} \rho_g (u_g - u_{liq}) \\ -u^i c_D \alpha_g \alpha_{liq} \rho_g (u_g - u_{liq}) \\ 0 \\ c_D \alpha_g \alpha_{liq} \rho_g (u_g - u_{liq}) \\ u^i c_D \alpha_g \alpha_{liq} \rho_g (u_g - u_{liq}) \end{pmatrix}.$$

Здесь c_D — коэффициент сопротивления. При специальном выборе

межфракционного давления $p^i = p - \delta \frac{\alpha_g \alpha_{liq} \rho_g \rho_{liq}}{\alpha_g \rho_{liq} + \alpha_{liq} \rho_g} (u_g - u_{liq})^2$, $\delta = 1.2$ и скорости u^i ,

которая полагалась той же, что и в модели Saurel'a – Abgrall'a, система (4) оказывается гиперболической. Корни соответствующего характеристического уравнения равны u_g , $u_g \pm c_g$, u_{liq} , $u_{liq} \pm c_{sm}$,

где

$$c_{sm} = c_{liq} \sqrt{1 - \frac{\alpha_g \gamma_g \gamma_{liq}^2 p_{\infty, liq}}{\alpha_g \gamma_g \gamma_{liq} (\gamma_{liq} - 1) p_{\infty, liq} + \alpha_{liq} \rho_g c_g^2 \gamma_{liq} + \alpha_g \rho_{liq} c_{liq}^2 \gamma_g}}. \quad (5)$$

Аналогично, как и для предыдущих моделей, схематическое изображение соотношения корней характеристического уравнения представлено на рис.3.

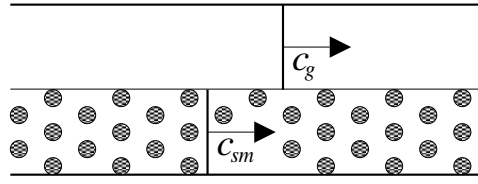


Рис.3. Схематическое изображение скоростей распространения возмущений для модели газо-дисперсных течений.

Модель Куропатенко В.Ф. [7]:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_g}{\partial x} &= 0, & \frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial x} &= 0, \\
 \frac{\partial \alpha_g \rho_g u_g}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_g (p_g + \rho_g u_g^2 + F_g)}{\partial x} &= 0, \\
 \frac{\partial \alpha_g \rho_g E_g}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_g u_g (p_g + \rho_g E_g))}{\partial x} + \frac{\partial (\alpha_g (u_g F_g + Q_g))}{\partial x} &= 0, \\
 \frac{\partial \alpha_{liq}}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha_{liq}}{\partial x} &= 0, & \frac{\partial \alpha_{liq} \rho_{liq}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_{liq} \rho_{liq} u_{liq}}{\partial x} &= 0, \\
 \frac{\partial \alpha_{liq} \rho_{liq} u_{liq}}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_{liq} (p_{liq} + \rho_{liq} u_{liq}^2 + F_{liq})}{\partial x} &= 0, \\
 \frac{\partial \alpha_{liq} \rho_{liq} E_{liq}}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_{liq} u_{liq} (p_{liq} + \rho_{liq} E_{liq}))}{\partial x} + \frac{\partial (\alpha_{liq} (u_{liq} F_{liq} + Q_{liq}))}{\partial x} &= 0,
 \end{aligned} \tag{6}$$

где

$$\begin{aligned}
 \rho &= \alpha_g \rho_g + \alpha_{liq} \rho_{liq}, & u &= \frac{\alpha_g \rho_g u_g + \alpha_{liq} \rho_{liq} u_{liq}}{\rho}, & F_g &= -\frac{1}{2} \rho_g^0 (u - u_g), \\
 F_{liq} &= -\frac{1}{2} \rho_{liq}^0 (u - u_{liq}), & Q_g &= \frac{1}{2} (u - u_g) (p_g + \rho_g^0 \varepsilon_g), \\
 Q_{liq} &= \frac{1}{2} (u - u_{liq}) (p_{liq} + \rho_{liq}^0 \varepsilon_{liq}), & E_g &= \varepsilon_g + \frac{1}{2} u_g^2, & E_{liq} &= \varepsilon_{liq} + \frac{1}{2} u_{liq}^2, \\
 \varepsilon_g &= \frac{P_g}{\rho_g^0 (\gamma_g - 1)}, & \varepsilon_{liq} &= \frac{P_{liq} - c_{liq}^{*2} (\rho_{liq}^0 - \rho_{liq}^*)}{\rho_{liq}^0 (\gamma_{liq} - 1)}.
 \end{aligned}$$

В представленной форме опущены силы внешнего воздействия, так как они не интересны с точки зрения характеристического анализа. Данная модель отличается наличием сил кластерного взаимодействия – выражения F_g , F_{liq} , Q_g и Q_{liq} полученные, как необходимые условия согласования законов сохранения компонентов и смеси. В [7] изложено молекулярно-кинетическое обоснование сил меж кластерного взаимодействия.

Вместо аналитических выражения скоростей распространения возмущений, в виду громоздкости, на рис.4 представлены их графики для покоящейся смеси воды и газа при атмосферном давлении. Из оставшихся шести скоростей системы уравнений (6), две совпадают по модулю с представленными, а четыре равны нулю.

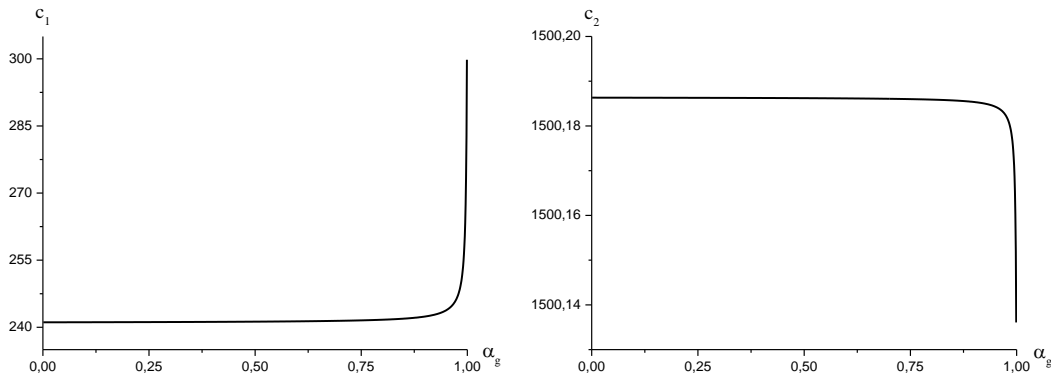


Рис.4. Зависимость корней характеристического уравнения модели Куропатенко В.Ф. от объемной концентрации газа (α_g).

Заметим, что в экспериментах по распространению возмущений в пузырьковых жидкостях отсутствуют волны, перемещающиеся со скоростью звука в газе, существование которых предсказывается упомянутыми выше моделями. Связано это с тем, что при построении моделей многокомпонентной среды законы сохранения выписываются для каждой из фракций смеси.

В работе [11] предложена модель среды с газодинамическим ядром, свободная от этого дефекта, присущего упомянутым выше моделям. В этой модели вводится в рассмотрение такое состояние среды как смесь в целом, характеризующая осредненными значениями величин, уравнения для которых совпадают с газодинамическими. К этим уравнениям добавляются соотношения, выражающие законы сохранения для тех компонентов смеси, в которых скорости перемещения возмущений не превосходят скорость звука в смеси в целом. При этом полагалось, что волны, относящиеся к другим фракциям, «поглощаются» средой, формируя волну в смеси в целом. Давление считалось общим для всех фракций смеси. Для этой модели система уравнений n -компонентной смеси с первыми m сжимаемыми фракциями, описывающая течение многоскоростной гетерогенной среды, включает уравнения законов сохранения массы, импульса и энергии как для смеси в целом, так и для отдельных компонентов смеси:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} - c_{sm}^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) = 0,$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_i \rho_i^0 u_i}{\partial x} = 0, \quad \alpha_i \rho_i^0 \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial \alpha_i p}{\partial x} = \lambda_i (u - u_i), \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_i \rho_i^0 \left(\varepsilon_i + \frac{1}{2} u_i^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\alpha_i \rho_i^0 \left(\varepsilon_i + \frac{1}{2} u_i^2 \right) u_i \right] + \frac{\partial \alpha_i p u_i}{\partial x} = \lambda_i u_i (u - u_i), \quad i=1, \dots, m-1.$$

$$\frac{\partial \alpha_j}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_j u_j}{\partial x} = 0, \quad \alpha_j \rho_j^0 \left(\frac{\partial u_j}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_j}{\partial x} \right) + \frac{\partial \alpha_j p}{\partial x} = \lambda_j (u - u_j), \quad j=m+1, \dots, n.$$

Для определенности полагалось, что скорость перемещения возмущений в m -й фракции превышает c_{sm} , поэтому уравнения для этого компонента не включены в (7). При расчете плотностей сил сопротивления считалось, что они пропорциональны разнице скорости смеси в целом и отдельного компонента

с коэффициентами λ_i и λ_j соответственно для сжимаемых и несжимаемых компонентов. Возможны и другие способы определения этих сил.

Так как смесь в целом является односкоростной средой, поэтому при вычислении скорости звука в смеси использовалась формула из обобщенно-равновесной модели [12]:

$$c_{sm} = \sqrt{\frac{\frac{p}{\rho} - \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} - \sum_{i=1}^{m-1} \left[\frac{p}{\rho_i^0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_i^0} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} + \alpha_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_i} \left(1 - p \left(\rho_i^0 \right)^2 \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} \right]}{\rho \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} + \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} \left(\frac{\alpha_i}{\rho_i^0} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_i} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho_i^0} \right) \right]} - \sum_{j=m+1}^n \alpha_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial \alpha_j}} \quad (8)$$

Скорость звука из выражения (8) близка к рассчитанной по аппроксимирующей экспериментальные данные формуле Вуда [13]:

$$\frac{1}{\rho c_{sm}^2} = \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k}{\rho_k^0 c_k^2}, \quad (9)$$

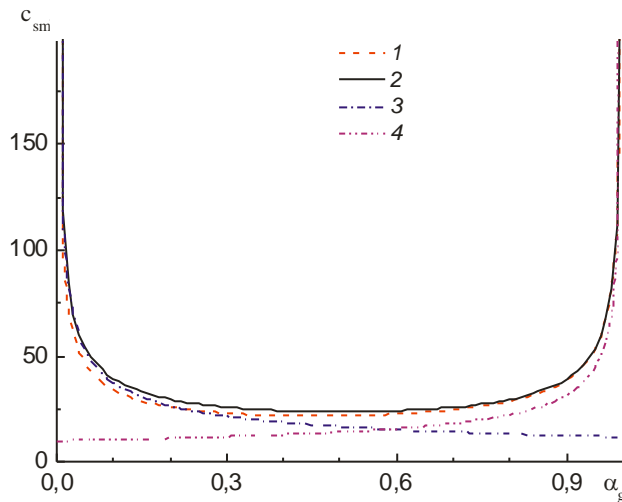


Рис.5. Зависимости $c_{sm}(\alpha_g)$, рассчитанные по формулам (8), (9), (3) и (5) (кривые 1, 2, 3 и 4).

что видно из рис.5, где представлены зависимости $c_{sm}(\alpha_g)$, вычисленные по формулам (8) и (9) для водно-воздушной смеси с учетом сжимаемости жидкой фракции (для несжимаемой жидкости формулы (8) и (9) совпадают). На этом же рисунке приведены зависимости, рассчитанные по формулам (3) и (5). Из рис.5 видно, что модель Chung'a М.-S., Chang'a К.-S., Lee S.-J. может использоваться в расчетах течений пузырьковых жидкостей, модель Yeom'a G.-S., Chang'a К.-S. – для дисперсных сред, и лишь модель среды с газодинамическим ядром (7)-(8) удовлетворительно аппроксимирует экспериментальную зависимость Вуда во всем диапазоне изменения концентрации газа в смеси.

3. УЗЛОВОЙ МЕТОД ХАРАКТЕРИСТИК

Для демонстрации некоторых расчетов для модели (7) воспользуемся одной из модификаций узлового метода характеристик. Изложение метода характеристик произведем на обобщенно равновесной модели (10). Сути метода это не меняет, но математические выкладки оказываются на много короче и доступнее для понимания.

Уравнения, описывающие совместное движение сред, следующие [14]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p + \rho c^2 \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0; \quad \frac{\partial \rho_i^0}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho_i^0 + \rho_i^0 G_i \operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \alpha_i + \alpha_i (1 - G_i) \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0, \quad i=1, \dots, n-1, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$G_i = \frac{1}{\rho_i^0} \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} \right)^{-1} \left(\frac{p}{\rho_i^0} - \rho c^2 \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p} \right), \quad c = c_{sm} \text{ из (8).}$$

Для одномерных течений систему (10) перепишем в векторно-матричной форме:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0, \quad (11)$$

где

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \\ \alpha_1 \\ \rho_1^0 \\ \dots \\ \alpha_{n-1} \\ \rho_{n-1}^0 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} u & -\rho & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & u & -\frac{1}{\rho} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\rho c^2 & u & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\rho_1^0 G_1 & 0 & u & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 (G_1 - 1) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -\rho_{n-1}^0 G_{n-1} & 0 & 0 & \dots & u & 0 \\ 0 & \alpha_{n-1} (G_{n-1} - 1) & 0 & 0 & \dots & 0 & u \end{pmatrix}.$$

При описании термодинамических свойств каждой из фракций используются калорические уравнения состояния, в общем случае имеющие вид $\varepsilon_i = \varepsilon_i(p, \rho_i^0)$. Соотношение для удельной внутренней энергии смеси ε определяется равенством:

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i^0 \varepsilon_i. \quad (12)$$

Как показано в [14] система уравнений (11) является гиперболической с корнями характеристического уравнения:

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = \dots = \lambda_{2n} = u, \quad \lambda_{2n+1} = u + c.$$

Если при описании поведения компонентов смеси использовать уравнения состояния вида:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i(p, \rho_i^0) = \frac{p - c_{*i}^2(\rho_i^0 - \rho_{*i})}{\rho_i^0(\gamma_i - 1)} = \frac{b_i + pB_i}{\rho_i^0} - d_i,$$

где $B_i = 1/(\gamma_i - 1)$, $d_i = c_{*i}^2 B_i$, $b_i = d_i \rho_{*i}$ ($\gamma_i, \rho_{*i}, c_{*i}$ – константы, индивидуализирующие i -ю фракцию), то выражение для удельной внутренней энергии смеси (12) примет вид:

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho} \left[\sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i (pB_{in} - d_{in} \rho_i^0 + b_{in}) + pB_n + b_n \right] - d_n,$$

а соотношения для G_i и скорости звука (8) переписутся как:

$$G_i = \frac{\rho c^2 B_i - p}{b_i + pB_i},$$

$$c = \sqrt{\rho^{-1} \left[B_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i (b_n B_i - b_i B_n)}{b_i + pB_i} \right]^{-1} \left\{ b_n + p \left[1 + B_n - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i (b_{in} + pB_{in})}{b_i + pB_i} \right] \right\}},$$

где $B_{in} = B_i - B_n$, $d_{in} = d_i - d_n$, $b_{in} = b_i - b_n$.

Характеристические соотношения вдоль характеристических направлений $dx/dt = u \pm c$ могут быть получены из уравнения:

$$\left| \begin{array}{ccccccccc} \xi - u & -\rho & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & -u \frac{d\rho}{dt} - \rho \frac{du}{dt} & \\ 0 & \xi - u & -\frac{1}{\rho} & 0 & \dots & 0 & \dots & -u \frac{du}{dt} - \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} & \\ 0 & -\rho c^2 & \xi - u & 0 & \dots & 0 & \dots & -\rho c^2 \frac{du}{dt} - u \frac{dp}{dt} & \\ 0 & -\rho_1^0 G_1 & 0 & \xi - u & \dots & 0 & \dots & -\rho_1^0 G_1 \frac{du}{dt} - u \frac{d\rho_1^0}{dt} & \\ 0 & \alpha_1 (G_1 - 1) & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & -\alpha_1 (1 - G_1) \frac{du}{dt} - u \frac{d\alpha_1}{dt} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ 0 & -\rho_{n-1}^0 G_{n-1} & 0 & 0 & \dots & \xi - u & \dots & -\rho_{n-1}^0 G_{n-1} \frac{du}{dt} - u \frac{d\rho_{n-1}^0}{dt} & \\ 0 & \alpha_{n-1} (G_{n-1} - 1) & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & -\alpha_{n-1} (1 - G_{n-1}) \frac{du}{dt} - u \frac{d\alpha_{n-1}}{dt} & \end{array} \right| = 0,$$

где $\xi = dx/dt$. После вычисления определителя имеем следующие выражения:

$$dp \pm \rho c du = 0, \quad (13)$$

справедливые вдоль характеристических направлений $dx/dt = u \pm c$.

Вдоль траекторной характеристики $dx/dt = u$ выполняются равенства:

$$dp - c^2 d\rho = 0, \quad d\alpha_i - \frac{\alpha_i (1 - G_i)}{\rho} d\rho = 0, \quad d\rho_i - \frac{\rho_i}{\rho} d\rho = 0, \quad i=1, \dots, n-1, \quad (14)$$

которые следуют из системы (11).

УМХ относится к бессеточному типу. Для его описания достаточно рассмотреть способ определения значений искомым величин в узле (x_k, t_{m+1}) по известным данным в узлах на m -м временном слое. Для регулярных узлов решение поставленной задачи получим с использованием следующей

итерационной процедуры [15-16]. На «нулевой» итерации ($v=0$) полагаем, что значения искомым переменных в точке (x_k, t_{m+1}) совпадают с данными из (x_k, t_m) , поэтому характеристические направления $dx/dt = u$, $dx/dt = u \pm c$ аппроксимируются выражениями:

$$x_k - x_C^v = u^v \Delta t, \quad x_k - x_L^v = (u^v + c^v) \Delta t, \quad x_k - x_R^v = (u^v - c^v) \Delta t,$$

где $\Delta t = t_{m+1} - t_m$. Из последних равенств определяем положения точек пересечения характеристик с прямой $t=t_m$ (рис.6):

$$x_L^v = x_k - (u^v + c^v) \Delta t, \quad x_C^v = x_k - u^v \Delta t, \quad x_R^v = x_k - (u^v - c^v) \Delta t, \quad (15)$$

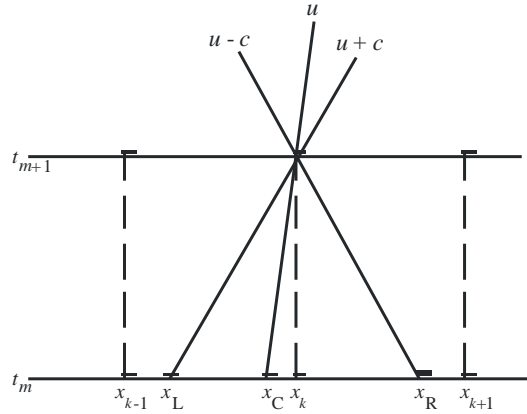


Рис.6. Схема расчета для регулярных узлов.

Параметры $(\rho, u, p, \rho_1^0, \alpha_1, \dots, \rho_{n-1}^0, \alpha_{n-1})^{(0)}$ в найденных точках $(x_L, x_C, x_R)^{(0)}$ находятся интерполяцией по их известным значениям в узлах x_{k-1} , x_k и x_{k+1} . Соотношения (13)-(14) перепишем в конечноразностном виде как:

$$\begin{aligned} \rho(x_k^{m+1})^{v+1} - \rho(x_L^m)^v + \rho(x_L^m)c(x_L^m)^v \left[|u(x_k^{m+1})|^{v+1} - |u(x_L^m)|^v \right] &= 0, \\ \rho(x_k^{m+1})^{v+1} - \rho(x_R^m)^v - \rho(x_R^m)c(x_R^m)^v \left[|u(x_k^{m+1})|^{v+1} - |u(x_R^m)|^v \right] &= 0, \\ \rho(x_k^{m+1})^{v+1} - \rho(x_C^m)^v - c^2(x_C^m)^v \left[\rho(x_k^{m+1})^{v+1} - \rho(x_C^m)^v \right] &= 0, \\ \rho(x_C^m)^v \left[\alpha_i(x_k^{m+1})^{v+1} - \alpha_i(x_C^m)^v \right] - \alpha_i(x_C^m)^v \left[1 - G_i(x_C^m)^v \right] \left[\rho(x_k^{m+1})^{v+1} - \rho(x_C^m)^v \right] &= 0 \\ \rho(x_C^m)^v \left[\rho_i^0(x_k^{m+1})^{v+1} - \rho_i^0(x_C^m)^v \right] - \rho_i^0(x_C^m)G_i(x_C^m)^v \left[\rho(x_k^{m+1})^{v+1} - \rho(x_C^m)^v \right] &= 0, \\ i=1, \dots, n-1. \end{aligned} \quad (16)$$

Решая систему (16) при $v=0$ относительно переменных $(\rho, u, p, \rho_1^0, \alpha_1, \dots, \rho_{n-1}^0, \alpha_{n-1})^{(1)}$ найдем уточненные значения искомым функций в точке (x_k, t_{m+1}) . Затем по этим данным из выражений (15) вычисляются новые координаты $(x_L, x_C, x_R)^{(1)}$, которые в свою очередь используются для определения $(\rho, u, p, \rho_1^0, \alpha_1, \dots, \rho_{n-1}^0, \alpha_{n-1})^{(2)}$ из (16), где необходимо положить $v=1$. Описанный итерационный процесс продолжается вплоть до сходимости.

Для тестирования описанного выше численного метода, рассмотрено несколько примеров взятых из [17-18].

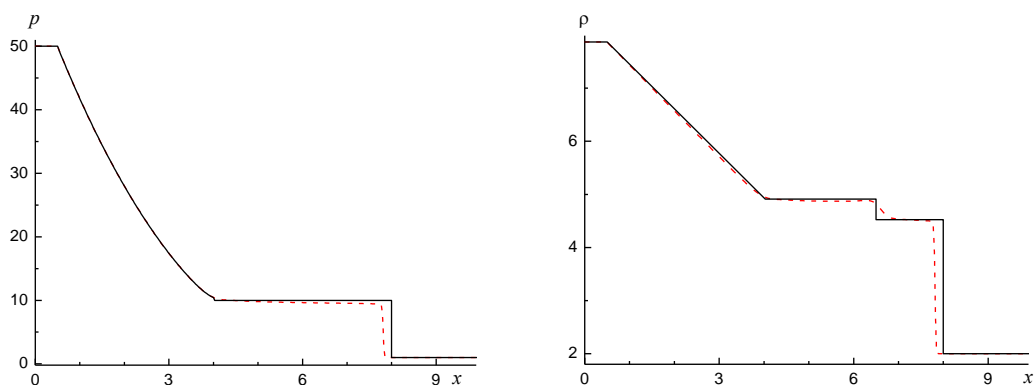


Рис.7. Зависимости параметров течения к моменту времени $t=1.0$ с, полученные с помощью УМХ (штриховые кривые); точное решение – сплошные кривые.

Пример 1. Рассмотрена задача Римана при следующих значениях параметров на момент времени $t=0$ [17]: «слева» ($x < 5$) от контактной границы, разделяющей различные среды, – $(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*)_L = (50, 0, 7.87, 3, 7.87, 1)$; и «справа» от нее ($x > 5$) – $(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*)_R = (1, 0, 2, 2, 2, 1)$.

На рис.7 представлены данные численных расчетов течения, полученные с использованием УМХ на равномерной сетке из 400 ячеек в сравнении с точным решением к моменту времени $t=1.0$ с.

Пример 2. Рассчитана задача Римана при следующих значениях параметров на момент времени $t=0$ [17]: «слева» ($x < 5$) от контактной границы, разделяющей различные среды, – $(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*)_L = (1, 0, 7.87, 1.4, 7.87, 1)$; и «справа» от нее ($x > 5$) – $(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*)_R = (10, -2, 8.5, 3, 8.5, 1)$.

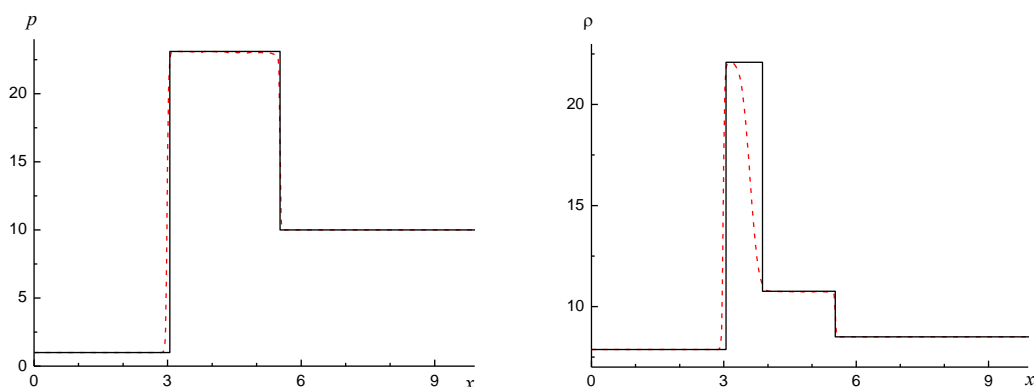


Рис.8. Зависимости параметров течения к моменту времени $t=1.0$ с, полученные с помощью УМХ (штриховые кривые); точное решение – сплошные кривые.

На рис.8 приведены данные численных расчетов течения, полученные с использованием УМХ на равномерной сетке из 400 ячеек в сравнении с точным решением к моменту времени $t=1.0$ с.

Для следующего тестового примера расчеты проводились также с использованием схемы КИР (см. [19]):

$$\frac{\mathbf{U}_i^{m+1} - \mathbf{U}_i^m}{\Delta t} + A_i^m \frac{\mathbf{U}_{i+1/2}^m - \mathbf{U}_{i-1/2}^m}{\Delta x} = 0,$$

где

$$\mathbf{U} = (\rho, u, p, \rho_1^0, \alpha_1, \rho_2^0, \alpha_2)^T,$$

$$\mathbf{U}_{q+1/2}^m = \frac{1}{2}(\mathbf{U}_q^m + \mathbf{U}_{q+1}^m) + \frac{1}{2}\{\Omega^{-1}[\text{sign}(\Lambda)]\Omega\}_q^m (\mathbf{U}_q^m - \mathbf{U}_{q+1}^m), \quad q=i-1, i.$$

Здесь Λ – диагональная матрица собственных значений матрицы A_i^m , Ω – матрица, строками которой являются левые собственные векторы матрицы A_i^m .

Пример 3. Рассмотрена задача Римана для трех различных газов при следующих значениях параметров на момент времени $t=0$ [18]:

$$(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*) = (0.8 \times 10^5, 0, 2.5, 1.2, 2.5, 0), \quad x < 0.3,$$

$$(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*) = (1.0 \times 10^5, 0, 1.5, 1.4, 1.5, 0), \quad 0.3 \leq x < 0.6,$$

$$(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*) = (1.2 \times 10^5, 0, 0.5, 1.67, 0.5, 0), \quad x \geq 0.6.$$

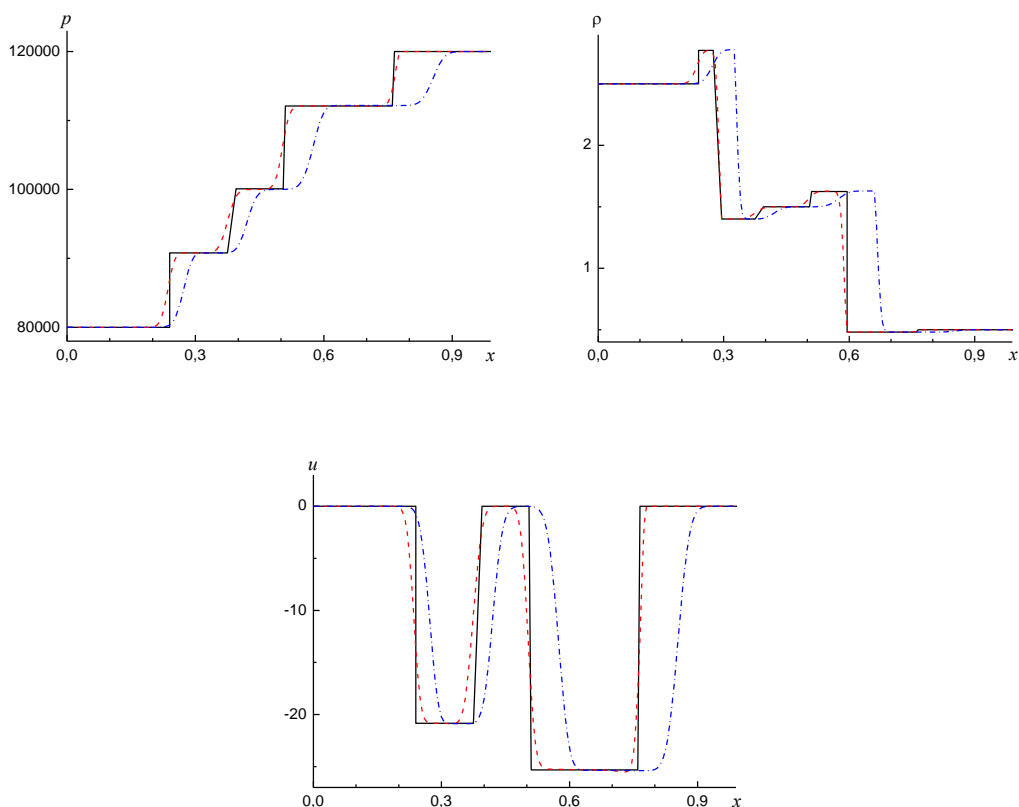


Рис.9. Зависимости параметров течения к моменту времени $t=0.3$ мс, полученные с помощью УМХ (штриховые кривые); КИР (штрихпунктирные); точное решение – сплошные кривые.

На рис.9 представлены данные численных расчетов течения, полученные с использованием УМХ и метода КИР к моменту времени $t=0.3$ мс

на равномерной сетке из 200 ячеек в сравнении с точным решением. Следует отметить при использовании метода КИР положения контактных разрывов и ударных скачков существенно разнятся с точными. Не исправляет ситуацию и измельчение расчетной сетки.

Пример 4. Рассмотрена задача Римана для трех различных газов при следующих значениях параметров на момент времени $t=0$ [18]:

$$(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*) = (1.8 \times 10^5, 0, 1.5, 1.4, 1.5, 0), \quad x < 0.3,$$

$$(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*) = (1.0 \times 10^5, 0, 1.0, 1.2, 1.0, 0), \quad 0.3 \leq x < 0.6,$$

$$(p, u, \rho, \gamma, \rho_*, c_*) = (0.2 \times 10^5, 0, 0.15, 1.67, 0.15, 0), \quad x \geq 0.6.$$

На рис.10 представлены результаты численных расчетов течения, полученные с использованием УМХ на равномерной сетке из 200 ячеек к моменту времени $t=0.28$ мс в сравнении с точным решением.

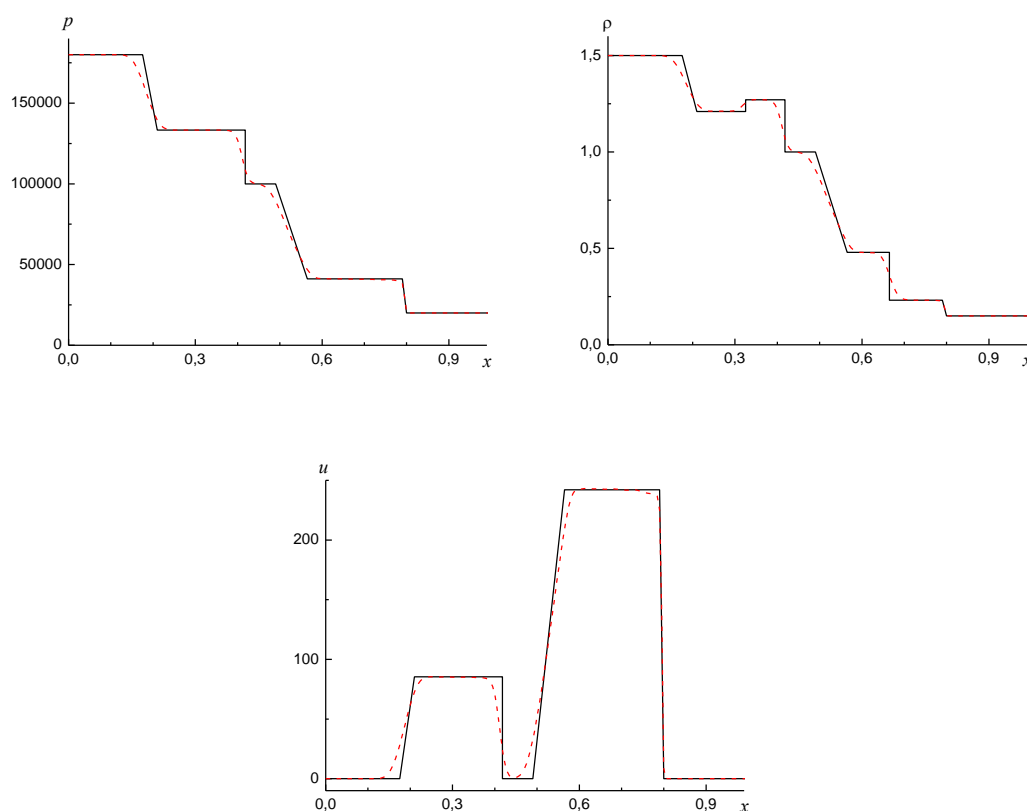


Рис.10. Зависимости параметров течения к моменту времени $t=0.28$ мс, полученные с помощью УМХ (штриховые кривые); точное решение – сплошные кривые.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

Произведено численное исследование модели (7) при помощи описанного выше узлового метода характеристик.

Пример 1. Рассчитана задача распада произвольного разрыва в газожидкостной смеси. Плотность несжимаемой жидкой фракции $\rho_s=200$ кг/м³, показатель адиабаты газа в смеси $\gamma=1.4$, плотность газа $\rho_{g0}^0=1.19$ кг/м³.

Коэффициент λ_s принимался равным нулю. Параметры смеси до распада следующие: слева от диафрагмы ($x < 0$) – $p_{0(1)} = 0.1$ МПа, $u_{0(1)} = -20$ м/с, $u_{s0(1)} = 0$, $\alpha_{s0(1)} = 0.05$; справа от нее ($x > 0$) – $p_{0(2)} = 0.1$ МПа, $u_{0(2)} = 5$ м/с, $u_{s0(2)} = 0$, $\alpha_{s0(2)} = 0.05$. В момент времени $t=0$ диафрагма мгновенно удаляется, при этом реализуется режим течения с двумя волнами разрежения, перемещающимися вправо и влево.

На рис.11,а-г представлены результаты расчетов, полученные методом характеристик к моменту времени $t=0.05$ с. В расчетах использовалась равномерная сетка с шагом $\Delta x=0.1$ м. Штриховыми кривыми представлены результаты решения задачи Римана к тому же моменту времени, выполненные на той же расчетной сетке, но с использованием одной из простейших разновидностей конечноразностной схемы Куранта-Изаксона-Риса (КИР).

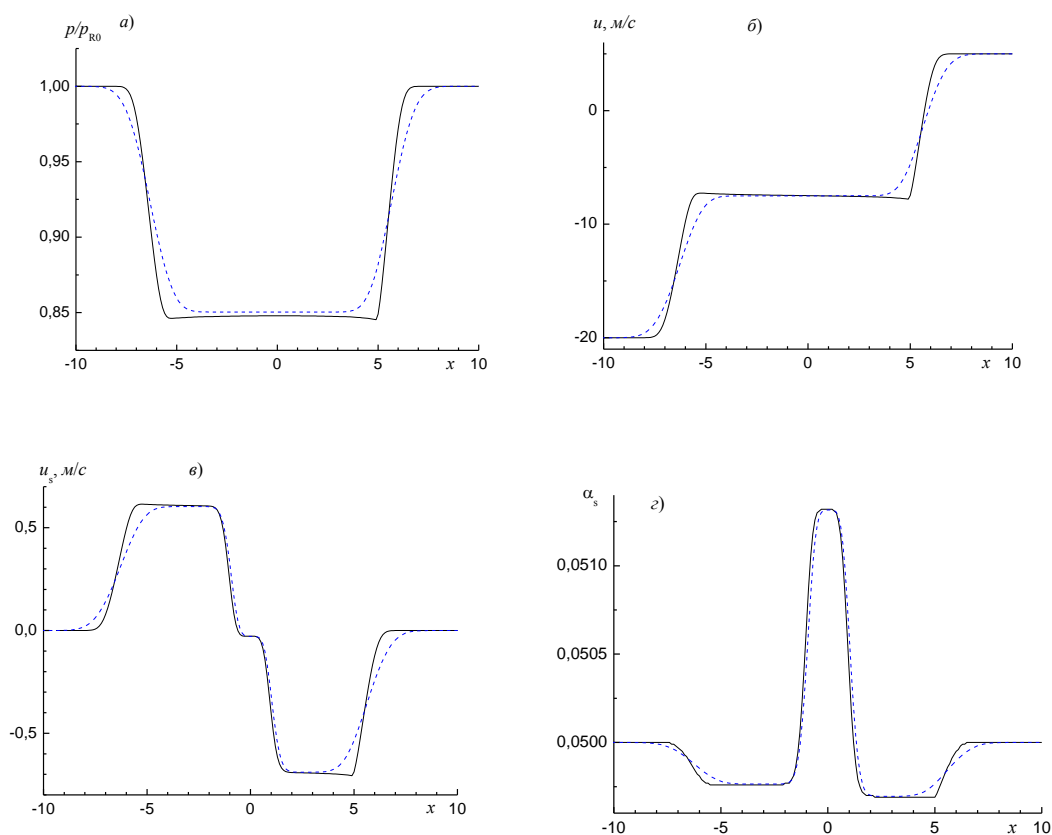


Рис.11. Зависимости параметров для режима течения с двумя волнами разрежения к моменту времени $t=0.05$ с, полученные с использованием УМХ (сплошные кривые, $\Delta t=10^{-3}$ с) и метода КИР (штриховые, $\Delta t=10^{-4}$ с).

Пример 2. Рассмотрено течение смеси с ударным скачком. А именно, рассчитывалась задача Римана с параметрами: слева от диафрагмы ($x < 0$) – $p_{0(1)} = 0.15$ МПа, $u_{0(1)} = 0$, $u_{s0(1)} = 0$, $\alpha_{s0(1)} = 0.05$; справа от нее ($x > 0$) – $p_{0(2)} = 0.1$ МПа, $u_{0(2)} = 0$, $u_{s0(2)} = 0$, $\alpha_{s0(2)} = 0.05$. Несжимаемая фракция, газ и коэффициент λ_s те же, что и в первом примере. В момент времени $t=0$ диафрагма мгновенно удаляется, при этом реализуется режим течения с волной разрежения, перемещающейся влево и ударной волной, движущейся вправо.

На рис.12,*a-z* приведены результаты расчетов, полученные с помощью УМХ и схемы КИР к моменту времени $t=0.05$ с на той же сетке, что и ранее.

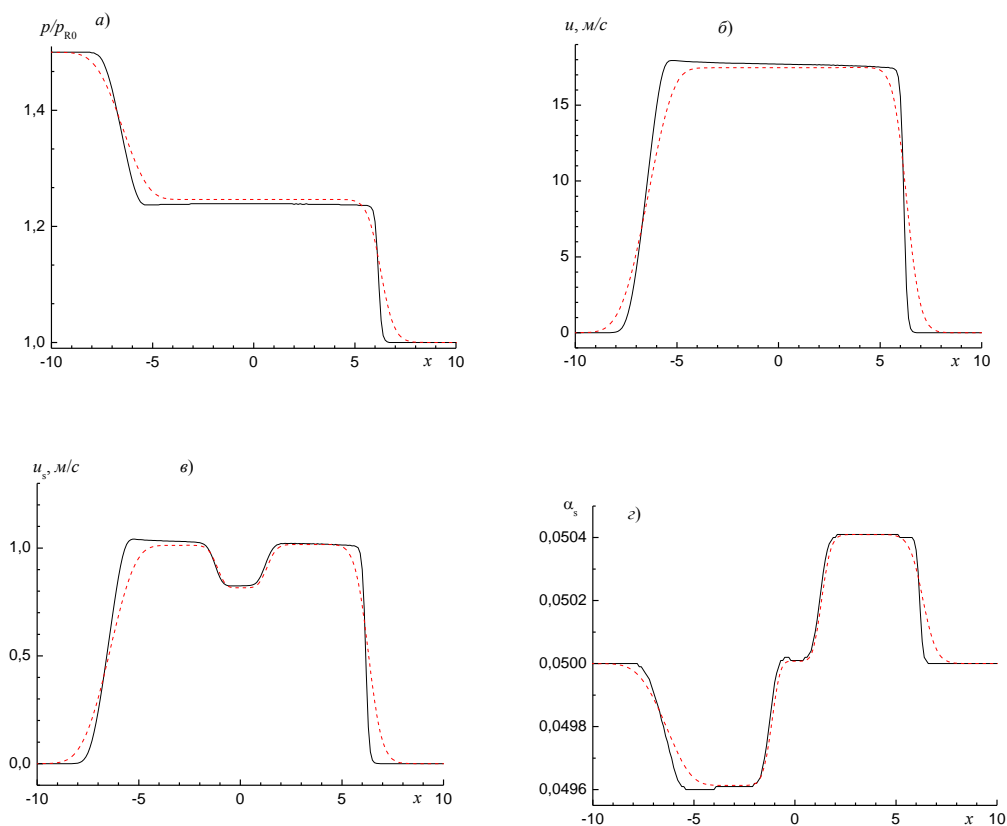


Рис.12. Зависимости параметров для режима течения с ударным скачком и волной разрежения к моменту времени $t=0.05$ с, полученные с помощью УМХ (сплошные кривые) и методом КИР (штриховые).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлен обзор наиболее часто используемых гиперболических моделей гетерогенных сред. Показано, что среди рассмотренных моделей лишь модель среды с газодинамическим ядром качественно и количественно описывает поведение газожидкостных смесей. Описан узловый метод характеристик, относящийся к бессеточному типу, предназначенный для интегрирования одномерных уравнений многоскоростной многокомпонентной смеси в адиабатическом приближении со «сквозным» расчетом ударных скачков. Расчеты с помощью узлового метода характеристик, в отличие от сеточных методов, могут быть выполнены при числах Куранта превышающих единицу.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Stewart H., Wendroff B.* Two-phase flow: Models and methods // J. Comput. Phys. – 1984. – Vol.56. – P.363-409.
2. *Суров В.С.* Односкоростная модель гетерогенной среды // Матем. моделирование. – 2001. – Т.13. – №10. – С.27-42.

3. *Baer M., Nunziato J.* A two-phase mixture theory for deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials // *Int. J. Multiphase Flow.* – 1986. – Vol.12. – P.861-889.
4. *Romenski E., Toro E.F.* Hyperbolicity and one-dimensional waves in compressible two-phase flow model // *Shock Waves.* – 2004. – Vol.13. – P.473-487.
5. *Gavrilyuk S., Saurel R.* Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia // *J. Comput. Phys.* – 2002. – Vol.175. – P.326-360.
6. *Herard J.-M.* A three-phase flow model // *Mathematical and computer modeling.* – 2007. – Vol.45. – P.732-755.
7. *Куропатенко В.Ф.* Модель многокомпонентной среды // *Докл. РАН.* – 2005. – Т.403. – №6. – С.761-763.
8. *Zein A., Hantke M., Warnecke G.* Modeling phase transition for compressible two-phase flows applied to metastable liquids // *J. Comput. Phys.* – 2010. – Vol.229. – P.2964-2998.
9. *Chung M.-S., Chang K.-S., Lee S.-J.* Numerical solution of hyperbolic two-fluid two-phase flow model with non-reflecting boundary conditions // *Int. J. of Engineering Science.* – 2002. – Vol.40. – P.789-803.
10. *Yeom G.-S., Chang K.-S.* A modified HLLC-type Riemann solver for the compressible six-equation two-fluid model // *Computers & Fluids.* – 2013. – Vol.76. – P.86-104.
11. *Суров В.С.* Гиперболическая модель многоскоростной гетерогенной среды // *Инженерно-физический журнал.* – 2012. – Т.85. – №3. – С.495-502.
12. *Суров В.С.* Односкоростная модель гетерогенной среды с гиперболическим адиабатическим ядром // *Журнал вычислительной математики и математической физики.* – 2008. – Т.48. – №6. – С.1111-1125.
13. *Уоллис Г.* Одномерные двухфазные течения. – М.: Мир, 1972.
14. *Березанский И.В., Суров В.С.* Узловой метод характеристик для расчета задач многожидкостной гидродинамики // *Вестник Челябинского государственного университета. Физика.* – 2013. – Вып.18. – №25(316). – С.57-63.
15. *Суров В.С.* Об одном варианте метода характеристик для расчета течений односкоростной многокомпонентной смеси // *Инженерно-физический журнал.* – 2010. – Т.83. – №2. – С.345-350.
16. *Суров В.С., Степаненко Е.Н., Березанский И.В.* Узловой метод характеристик для гиперболических систем / XVIII-я межд. конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам. Материалы. – М.: МАИ, 2013. – С.668-671.
17. *Guoxi N., Song J., Shuanghu W.* A remapping-free, efficient Riemann-solvers based, ALE method for multi-material fluids with general EOS // *Computers & Fluids.* – 2013. – Vol.71. – P.19-27.
18. *Caia L., Feng J.-H., Xie W.-X.* An efficient ghost fluid method for compressible multifluids in Lagrangian coordinate // *Applied Numerical Mathematics.* – 2008. – Vol.58. – P.859-870.
19. *Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: Физматлит, 2012. – 656 с.

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЛЕЕВ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНЫХ СВЯЗУЮЩИХ

Яновский Ю.Г.¹, Никитина Е.А.¹, Никитин С.М.², Карнет Ю.Н.¹

¹ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

²Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцина
МГУ им.М.В.Ломоносова, г. Москва, Россия

РЕЗЮМЕ

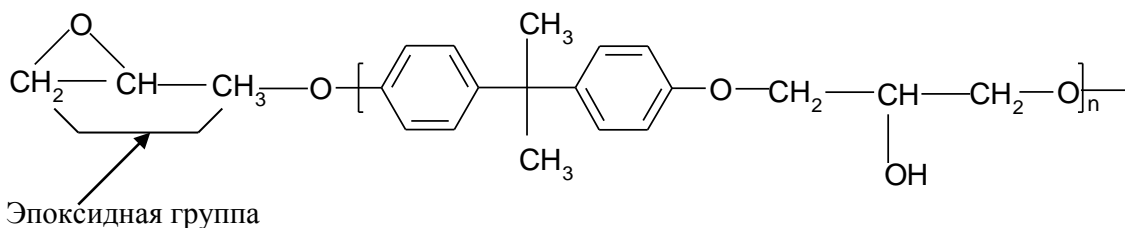
Оптимальный подбор наполнителей эпоксидных клеев позволяет увеличивать их механическую прочность и стабильность склеенных ими конструкций. В настоящей работе в рамках квантово-механического подхода рассматривались различные наполнители, которые предполагалось использовать для улучшения свойств эпоксидных клеев. При этом исследовались механизмы взаимодействия эпоксидной матрицы с поверхностью частиц различных наполнителей (алюминия, окиси алюминия, шунгита и двух его основных составляющих – аморфного углерода и силиката, графена, оксида графена, фуллерена и углеродных нанотрубок (УНТ)). Энергетические и прочностные характеристики межфазных слоев наполненных эпоксидных клеев определяли на основе квантово-механического подхода, в рамках кластерного метода и подхода микроскопической координаты трения (метод NDDO). На основе проведенного компьютерного моделирования даны рекомендации по использованию наиболее эффективных типов наполнителей эпоксидных клеев.

1. ВВЕДЕНИЕ

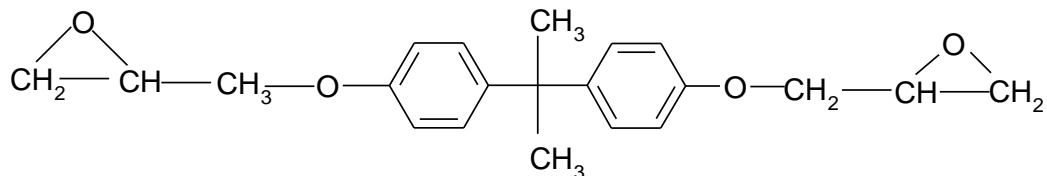
Эпоксидные связующие широко используются в качестве основы клеевых соединений в авиастроении и ракетостроении [1-3]. Преимущества подобных клеев объясняются тем, что они обладают высокой специфической адгезией к гладким твердым поверхностям различной природы. Наиболее распространенным применением этих клеев является склеивание разнородных материалов, например склеивание спутниковых солнечных батарей, приклеивание медной фольги к фенольной пластмассе для изготовления печатных схем и др. Эпоксидные клеи широко используются для склейки полиэфирных слоистых пластиков, например при производстве баков для горючего в военных самолетах, для ремонта судов, изготовленных из полиэфирных стеклопластиков, и др. Специальные клеи используются для приклейки фторопластовых прокладок и нейлонофенольных покрытий.

По своему строению эпоксидные связующие (смолы) являются олигомерами, содержащими эпоксидные группы, и способны под действием отвердителей образовывать сшитые полимеры. Получаются они при поликонденсации эпихлоргидрина с фенолами, чаще всего – с бисфенолом А. Свойства этих смол определяются их химической структурой. Единственной связью, кроме -С-С-, в линейном полимере является простая эфирная связь, причем ее химическая стойкость значительно выше сложноэфирной связи.

Эпоксидные смолы имеют общую формулу:



Обычно используют эпоксидные смолы с количеством эпоксидных групп меньше 10. Например, смола марки ЭД-20 имеет только 2 эпоксидные группы, и ее формула выглядит следующим образом:



Чем выше степень полимеризации, тем более вязкая смола. Например, если n приблизительно равно 25, то смола при комнатной температуре является твердым пластиком. Для смол с меньшим содержанием n для ее отверждения нужно в ее состав вводить отвердители, при этом смола становится пластичной и твердой. Отверждение эпоксидных смол обычно осуществляется аминами и полиамидами, содержащими первичные и (или) вторичные аминогруппы. Реакционные гидроксильные и эпоксидные группы располагаются вдоль молекулярной цепи на достаточном расстоянии, так что отвердители, которые «сшивают» линейные макромолекулы смолы и делают ее термореактивной, достаточно удалены друг от друга, чтобы обеспечить определенную гибкость отвержденной смолы. Полярная природа макромолекул обеспечивает хорошую адгезию клеев на основе эпоксидных смол. Благодаря длине и природе макромолекул эпоксидной смолы отвержденная пленка на ее основе имеет большую гибкость и механическую прочность.

Эксплуатационные свойства клеев, повышение прочности склеенных ими конструкций можно регулировать введением различных наполнителей и модифицирующих добавок. Как правило, подбор новых наполнителей проводится чисто эмпирически и свойства нового вида клея определяются экспериментально [4]. При этом выбор типа наполнителя часто бывает далек от оптимального. Используемый в настоящей работе компьютерный метод подбора перспективных наполнителей позволяет сузить возможные варианты выбора наполнителей для получения новых видов эпоксидных клеев с улучшенными эксплуатационными свойствами. В данном подходе энергетические и механические свойства межфазных слоев, образованные эпоксидной матрицей и частицами наполнителя, рассматривались с помощью кластерного метода и подхода микроскопической координаты трения в рамках оригинального пакета квантово-механических программ NDDO/sp-spd [5].

Ранее этот метод был использован нами для исследования углеродных нанотрубок (УНТ) и их модифицированных форм в качестве перспективных наполнителей для эпоксидных клеев [6-7]. В настоящей работе рассмотрены другие типы наполнителей: минерал шунгит и две его основные составляющие - аморфный углерод и силикат, а также фуллерен, графен, оксид графена, частицы оксида алюминия и алюминия.

2. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Компьютерный подбор наполнителей эпоксидных клеев проводился в рамках полуэмпирического метода NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap, пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием) [8] с параметризацией PM3 [9], реализованного в оригинальном пакете программ NDDO/sp-spd [5]. Используемый полуэмпирический метод наиболее близок концептуально к методам *ab initio* и немногим уступает им в точности расчетов (геометрические и энергетические характеристики), будучи параметризованным по большому количеству экспериментальных данных [10].

Вычислительный эксперимент был реализован в кластерном приближении, в котором границы раздела фаз моделировались кластерами достаточно большой величины (до нескольких десятков нанометров и до нескольких сотен атомов) различного химического состава и пространственного строения. При этом были построены молекулярные модели отдельных компонентов адсорбционного комплекса, их пространственное строение оптимизировалось в квантово-механическом (КМ) расчете. Затем на основе полученных моделей компонентов строились сложносоставные кластеры, моделирующие адсорбционные комплексы, которые также рассчитывались в квантово-механическом приближении. Кластерные методы оказываются весьма эффективным средством моделирования локализованных объектов, какими являются места локального контакта двух фаз (в данной работе это место контакта наполнителя и полимерной эпоксидной цепи), физические размеры которых меньше, чем размеры доступных с вычислительной точки зрения кластеров.

Для моделирования перестройки структуры кластера при сдвиге одной частицы относительно другой в адсорбционном комплексе и для анализа микроскопических энергетических и механических характеристик трения в межфазном слое вычислительный эксперимент был построен по аналогии с механическими испытаниями в режиме трения. Однако в реальных экспериментах к одному контактирующему образцу прикладывается сдвигающая нагрузка, а затем анализируется изменение взаимного расположения двух образцов. В компьютерном эксперименте в связи со спецификой моделирования изначально пошагово задаются сдвиги одной молекулярной системы относительно другой, а сила трения рассчитывается.

Взаимосвязь структуры и энергетических характеристик поверхности раздела фаз с характеристиками его напряженного состояния, исследовали в рамках подхода микроскопической координаты трения (МКТ) [11-14]. При этом сначала осуществляется построение микроскопической модели молекулярной системы и квантово-механическая оптимизация ее структуры. Затем выбирается микроскопическая координата трения (МКТ), изменение которой позволяет описать требуемую последовательность деформационных состояний в межфазной зоне. Микроскопическая координата трения задается двумя группами атомов в системе из двух частиц, определяющими направление и плоскости приложения силы трения. Положение одной частицы фиксируется путем исключения некоторых ее атомов из процесса оптимизации. Вычислительный эксперимент состоит в последовательном пошаговом перемещении второй частицы из исходного состояния вдоль МКТ. Полная оптимизация пространственного строения молекулярной системы проводится на каждом шаге. Определяющие МКТ атомы исключены из процесса оптимизации. Сила трения F_i , полученная для i -й МКТ, определяется как градиент полной энергии системы по этой координате.

3. МОДЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

В рамках описанного выше вычислительного подхода были исследованы структуры, энергетические и механические характеристики межфазных слоев эпоксидных клеев с различными наполнителями. В качестве наполнителей были рассмотрены как традиционные наполнители, а именно, частицы алюминия, окиси алюминия, силиката, аморфного углерода, так и менее известные как наполнители вещества, а именно шунгит, графен, углеродные нанотрубки, фуллерен, оксид графена. Рассчитанные данные по которым оценивалась эффективность наполнителей, были следующие - минимальное расстояние R между фрагментом цепи эпоксидного полимера и частицей наполнителя, энергия связывания, $E_{\text{связ}}$, рассчитанная на одну мономерную единицу эпоксидного клея:

$$E_{\text{связ}} = E_{\text{комплекса}} - \sum E_{\text{компонентов комплекса в свободном состоянии}},$$

а также максимальная сила микроскопического трения, $F_{\text{сдв. MAX}}$, рассчитанная на сдвиг в 1 \AA полимера вдоль поверхности наполнителя.

В качестве модели фрагмента эпоксидной цепи была выбрана молекула, которая имеет две эпоксидные группы (ЭД-20). Этот олигомер имеет 49 атомов, расстояние между концевыми атомами углерода составляет 18 \AA . Полностью оптимизированная в КМ расчётная структура этой молекулы представлена на рис.1.

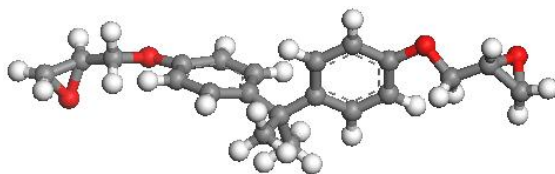


Рис.1. Оптимизированная структура модели фрагмента эпоксидной цепи.

Модельный малый кластер оксида алюминия был выбран из соображений того, что эта частица должна была быть, во-первых, не очень большой, что позволило проводить расчеты за разумное вычислительное время, однако она должна правильно представлять структуру элемента кристаллической решетки $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ с атомами алюминия с тетраэдрическим и октаэдрическим окружением. В качестве такой частицы был выбран кластер Al_8O_{12} . Его структура соответствовала наиболее устойчивому изомеру согласно [15], средние рассчитанные расстояния Al-O в нем были $\sim 1.8 \text{ \AA}$, кластер содержал только наиболее энергетически выгодные кольца – три 4-членные, шесть 6-членные и три 8-членные. КМ оптимизированная структура этого кластера представлена на рис.2.

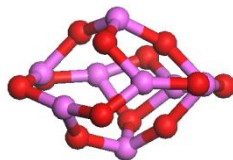


Рис.2. Оптимизированная структура малого кластера оксида алюминия Al_8O_{12} .

В качестве малого кластера алюминия была выбрана частица Al_{13} (заряд 0, мультиплетность 2), которая согласно литературным данным, например [16], является одним из наиболее устойчивых и реакционно-способных малых кластеров алюминия. Этот кластер имеет плотно упакованную структуру с малым отношением поверхности к объему, в которой центральный атом алюминия имеет максимальное в ряду изомеров число соседей, поэтому в этом кластере

оптимально стабилизированы низко лежащие молекулярные орбитали. Рассчитанные расстояния Al-Al в нем 2.45-2.50Å. КМ оптимизированная структура этого кластера представлена на рис.3.

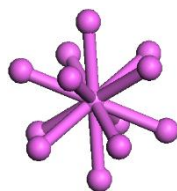


Рис.3. Оптимизированная структура малого кластера алюминия Al₁₃.

Распространенными наполнителями эпоксидных клеев являются углеродные и силикатные частицы. Природным и относительно дешевым источником этих частиц является минерал шунгит, который представляет собой композит, матрицу которого образует углерод. В углеродной матрице равномерно распределены высокодисперсные частицы силикатов. Такая структура и состав обеспечивает шунгиту ряд необычных физико-химических свойств. Его две основные составляющие – аморфный ультрадисперсный углерод и аморфный ультрадисперсный силикат – представляют собой разные по полярности фазы. Углеродная составляющая является гидрофобной, ее нерегулярная C- sp^2 -/ sp^3 -поверхность покрыта водородом. Силикатная составляющая является гидрофильной, основной мотив ее каркаса Si-O-Si замыкается на поверхности гидроксилами. Благодаря биполярности порошки шунгитовых пород смешиваются со всеми известными веществами, поэтому минерал шунгит может оказаться хорошим наполнителем для эпоксидных клеев. Следует отметить, что углерод в составе минерала шунгита может присутствовать в виде фуллеренов и нанотрубок.

Учитывая перспективность использования шунгита, в работе исследовалось действие основных компонентов шунгита как наполнителей эпоксидных клеев.

Используемая в расчетах модельная частица аморфного углерода CN170 содержала 170 атомов углерода. Эта частица имела ~15Å в диаметре, атомы углерода в ней находились как в sp^3 -, так и в sp^2 -гибридизациях, а ее поверхность была частично покрыта водородом. Частица ультрадисперсного аморфного силиката SiO₂220 включала 220 атомов с основным массивом связей Si-O-Si. Ее размеры составляли ~22x14Å, а поверхность была полностью покрыта гидроксилами. Фуллерен был представлен частицей C240, содержащей 240 атомов углерода, с диаметром ~15Å. Частица углеродной нанотрубки C288 содержала 288 атомов, (9,9), имела один конец закрытый, а другой открытый по типу “кресло”. Она имела длину ~20Å и диаметр ~15Å. Поверхность последних двух частиц не содержала каких-либо поверхностных групп и имела ароматичную природу с углеродом в sp^3 -гибридизации. КМ оптимизированные структуры этих модельных кластеров представлены на рис.4-7.

Углеродные наполнители в настоящей работе были также представлены графеном и оксидом графена. Графен представляет собой монослой атомов углерода, соединенных в гексагональную (шестигранную) кристаллическую решетку [17]. Его можно представить как одну плоскость (единичный слой) графита, отделенную от объемного кристалла, или же в виде графеновой пленки. Это как бы раскатанные в одной плоскости углеродные нанотрубки.

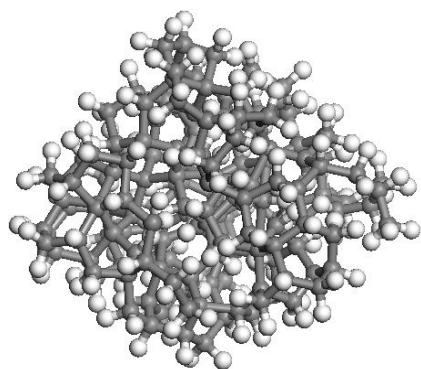


Рис.4. Оптимизированная структура модельного кластера аморфного углерода CН170.

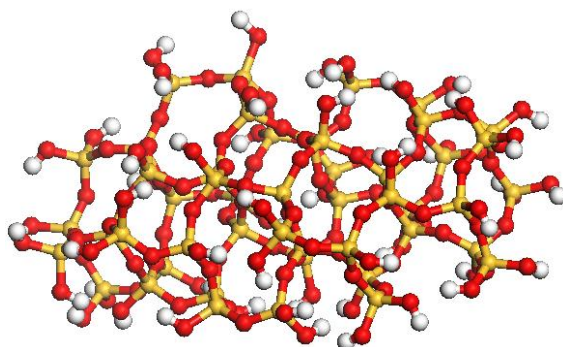


Рис.5. Оптимизированная структура модельного кластера аморфного силиката SiO₂220.

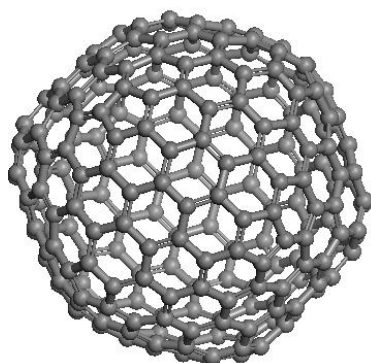


Рис.6. Оптимизированная структура частицы фуллерена C240.

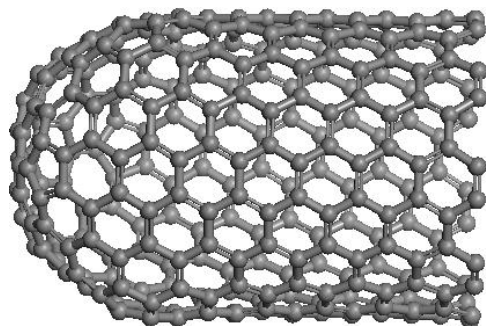


Рис.7. Оптимизированная структура частицы углеродной нанотрубки C288 (9,9).

Каждый четырехвалентный атом графеновой плоскости ковалентно связан с тремя соседними. Из “лишних” электронов формируются эффективно не спаренные электроны, определяющие особые свойства графена [18].

По оценкам [19,20] графен обладает уникально большой механической жесткостью и хорошей теплопроводностью (~ 1 ТПа [19] и $\sim 5 \times 10^3$ Вт·м⁻¹·К⁻¹). Все это делает графен перспективным материалом для использования в самых различных приложениях и поэтому он был рассмотрен как возможный эффективный наполнитель эпоксидных клеев.

Модель графеновой частицы GR190 состояла из 190 атомов и имела линейные размеры $\sim 21.5 \times 21.5$ Å. Оптимизированная структура этой модели представлена на рис.8.

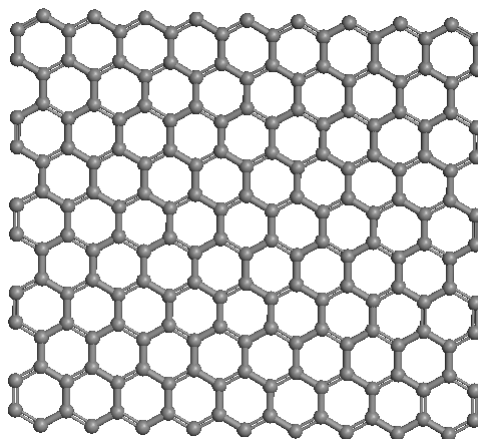


Рис.8. Оптимизированная структура частицы графена GR190.

Еще более перспективным, на наш взгляд, как наполнитель для эпоксидных клеев является оксид графена. Этот материал представляет собой комбинацию углерода, кислорода и водорода в различных соотношениях. Он напоминает одноатомный лист чистого графена, но у него есть функциональные группы, состоящие из связанных кислорода и водорода [21]. Толщина графеновых слоёв оксида составляет около $1,1 \pm 0,2$ нм. Структура и свойства оксида графена зависят от конкретного метода синтеза и степени окисленности. Известным методом химического расщепления графита является его окисление в жидкой среде с помощью перманганата калия, приводящее к образованию так называемого оксида графита. Оксид графита (гидроокись графита, графитовая кислота) не имеет постоянного состава и при максимальной степени окисления его брутто-формула может варьировать в пределах от C_2O до COH . Каждая частица оксида графита максимальной степени окисления представляет собой одиночный графеновый лист, по обе стороны которого находятся гидроксильные группы и кислород, насыщающие свободные связи углеродных атомов, составляющих структуру графена. Таким образом, этот материал и можно называть оксидом графена.

Экспериментально установлено, что поверхностные функциональные группы оксида графена представляют собой эпоксидные, гидроксильные и карбонильные группы. Существуют свидетельства «изгибов» и растрескивания графеновых листов оксида, а также появление дефектов углеродного слоя, связанное со сменой гибридизации углерода с sp^2 на sp^3 при взаимодействии с кислородом [22].

Функциональные группы оксида графена могут активно взаимодействовать с внешними атомами кислорода. Таким образом, этот материал имеет крайне полезные для наполнителя эпоксидных клеев свойства, на его поверхности располагаются готовые так называемые молекулярные «крюки», которые могут

сделать оксид графена крайне полезным предпочтительным материалом для наполнения клеев подобного типа.

Структура КМ оптимизированной модели оксида графена OXGR190 представлена на рис.9. Эта модель получена из модели графена GR190 добавлением ряда кислородсодержащих функциональных групп.

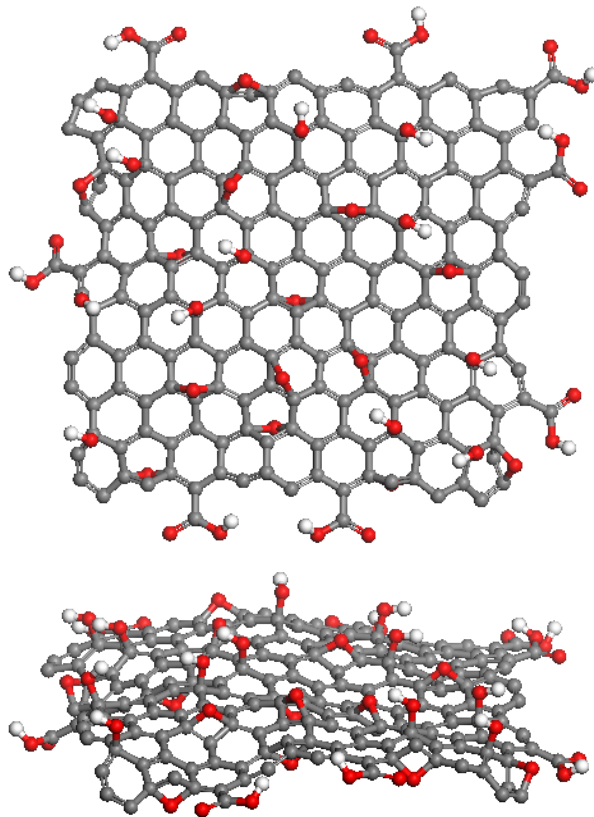


Рис.9. Оптимизированная структура частицы оксида графена OXGR190 (вид сверху и сбоку).

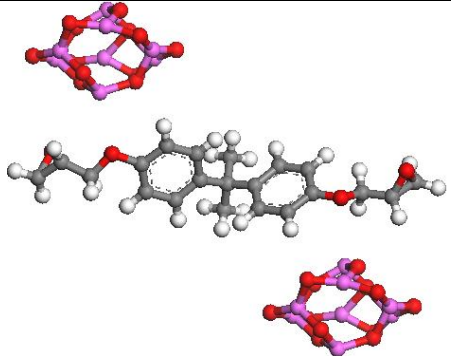
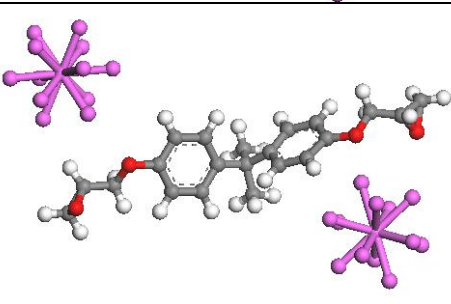
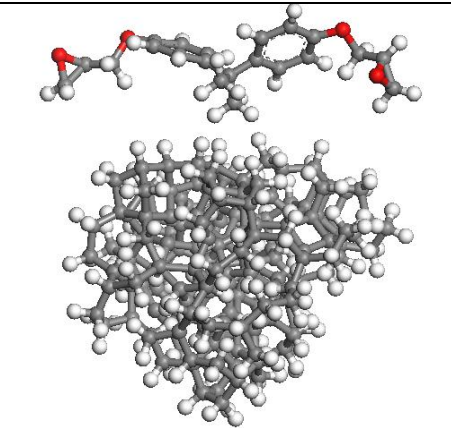
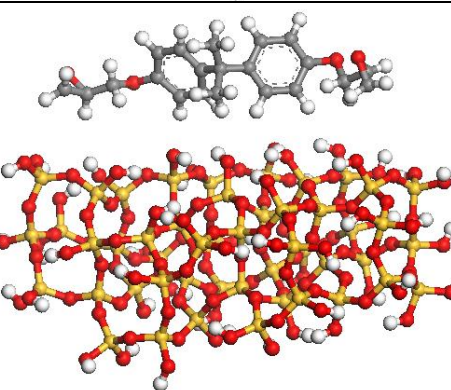
4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

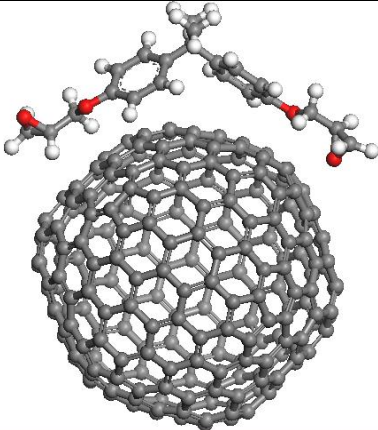
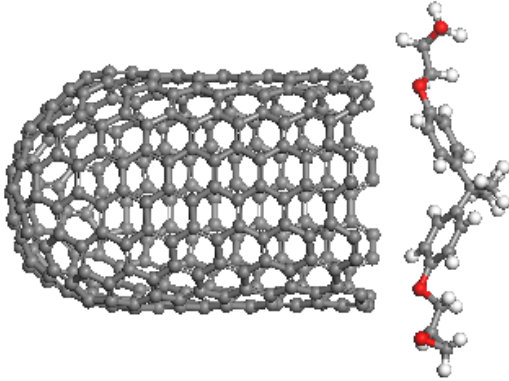
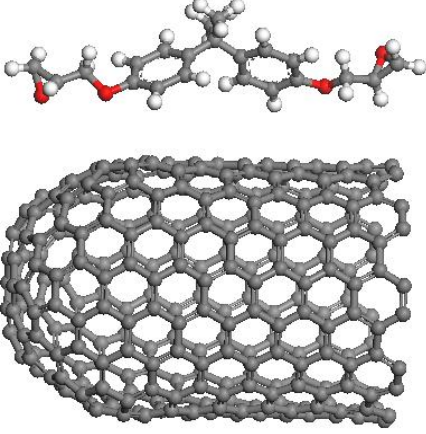
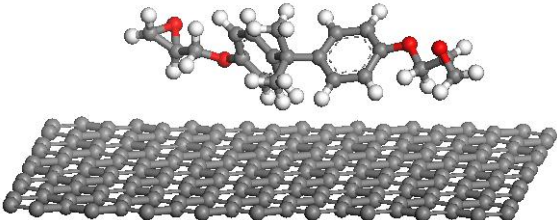
На основе оптимизированных структур молекулы олигомера ЭД-20, моделирующей фрагмент эпоксидной цепи, и кластеров, моделирующих частицы наполнителей, были построены и оптимизированы геометрии соответствующих адсорбционных комплексов. Их структуры представлены на рис.10. Так как кластеры алюминия и окиси алюминия для удобства моделирования были взяты достаточно маленькими, в адсорбционных комплексах присутствует по два таких кластера. Согласно результатам нашей ранней работы [7] энергия связывания углеродной нанотрубки с фрагментом эпоксидной цепи максимальна в случае адсорбции ЭД-20 по открытому концу трубки, эта величина была выбрана для сравнения с другими наполнителями. Однако в настоящей работе приводится также случай адсорбции ЭД-20 по длинной стороне трубки. В этом случае, хотя энергия связывания несколько меньше, однако такой вид адсорбции удобен для сравнения с наполнителями фуллереном и графеном, которые имеют такую же шестигранную ароматическую углеродную структуру.

Для каждого рассмотренного адсорбционного комплекса рассчитывалась энергия связывания $E_{\text{связ}}$, в пересчете на одну мономерную единицу эпоксидного

клея и максимальная сила сдвигового трения $F_{\text{сдв_МАХ}}$ как градиент полной энергии системы по выбранной координате трения. Результаты расчетов представлены в Табл.1.

Таблица 1.

Адсорбционный комплекс	Оптимизированная структура комплекса
<p>ЭД-20 + две частицы окиси алюминия Al_8O_{12}</p>	
<p>ЭД-20 + две частицы алюминия Al_{13}</p>	
<p>ЭД-20 + углеродная частица C_{170}</p>	
<p>ЭД-20 + силикатная частица $\text{SiO}_2\text{220}$</p>	

<p>ЭД-20 + фуллерен C240</p>	
<p>ЭД-20 + углеродная трубка C288, (9,9) адсорбция по открытому концу трубки</p>	
<p>ЭД-20 + углеродная трубка C288, (9,9) адсорбция по длинной стороне трубки</p>	
<p>ЭД-20 + частица графена GR190</p>	

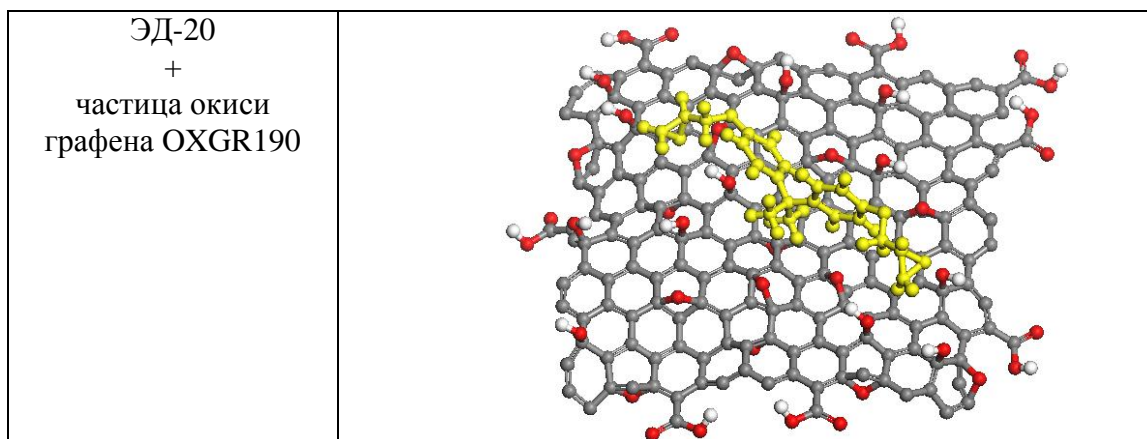


Рис.10. Оптимизированные структуры адсорбционных комплексов молекулы олигомера ЭД-20, моделирующего фрагмент эпоксидной цепи, и кластеров, моделирующих частицы наполнителей.

Таблица 1.

Геометрические, энергетические и механические характеристики (данные КМ моделирования), полученные для адсорбционных эпоксидного олигомера ЭД-20 и кластеров, моделирующих частицы наполнителя.

Адсорбционный комплекс	R, А	$E_{\text{связ.}}$, ккал/моль	$F_{\text{сдв. МАХ}}$, ккал/моль*А
ЭД-20 + две частицы окиси алюминия Al_8O_{12}	3.1	-8.1	13.6
ЭД-20 + две частицы алюминия Al_{13}	3.3	-6.5	10.9
ЭД-20 + углеродная частица C_{H170}	2.7	-14.2	19.2
ЭД-20 + силикатная частица SiO_2_{220}	2.4	-25.3	28.1
ЭД-20 + фуллерен C_{240}	2.8	-13.8	18.8
ЭД-20 + углеродная трубка C_{288} , (9,9); адсорбция по открытому концу трубки	2.5	-23.5	26.8
ЭД-20 + углеродная трубка C_{288} , (9,9); адсорбция по длинной стороне трубки	2.7	-15.4	22.7
ЭД-20 + частица графена GR190	2.8	-14.6	20.1
ЭД-20 + частица оксида графена OXGR190	2.2	-33.2	37.5

Из результатов расчетов можно сделать следующие выводы.

В компьютерном эксперименте были рассмотрены восемь потенциально высокоэффективных наполнителей эпоксидных клеев. Рассматривались

структурные, энергетические сдвиговые характеристики межфазных слоев с наполнителем. Полученные результаты показывают, что самым эффективным наполнителем, показывающим самые высокие механические сдвиговые показатели, является оксид графена. Несколько уступают ему силикатный наполнитель и открытые углеродные нанотрубки. В этих случаях частицы наполнителя удерживаются фрагментами эпоксидных цепей как водородными, так и Ван-дер-Ваальсовыми, дисперсионными силами. Таким образом, оксид графена, силикаты и открытые углеродные нанотрубки перспективно использовать в качестве наполнителей эпоксидных клеев. Поскольку взаимодействие фрагментов эпоксидных цепей с боковыми стенками углеродных нанотрубок несколько слабее, чем с открытыми концами, поэтому перед наполнением эпоксидных клеев следует стремиться к открытию концов трубок, а также использовать короткие трубки для увеличения доли открытых концов на удельное содержание наполнителя в эпоксидном клее. По энергии взаимодействия и силе сдвигового трения боковые поверхности углеродных нанотрубок имеют практически те же физико-механические показатели межфазных слоев, что и в других рассмотренных ароматических системах - графен и фуллерен. Углеродные гидрофобные частицы также не показывают высоких механических характеристик - они могут считаться неактивными наполнителями. Частицы алюминия и оксида алюминия мало влияют на улучшение механических свойств межфазных слоев в эпоксидных клеях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Компьютерное моделирование использовано для выявления перспективных наполнителей эпоксидных клеев. При этом энергетические и механические свойства межфазных слоев, образованные эпоксидной матрицей и частицами наполнителя рассматривались с помощью кластерного метода и подхода микроскопической координаты трения, в рамках оригинального пакета квантово-механических программ NDDO/sp-sp_d. Был также проведен сравнительный анализ физико-механических свойств различных наполнителей, в том числе в составе эпоксидных связующих.

Наполненные эпоксидные материалы имеют достаточно сложный физический и химический состав. Вследствие этого технологический процесс создания новых видов эпоксидных клеев с заданными свойствами является сложной научно-инженерной задачей. Для ее выполнения необходимо определить механизмы химического и физического взаимодействия эпоксидной составляющей с частицами наполнителя. Однако прямые экспериментальные оценки физико-механических свойств межфазных слоев в таких клеях требуют больших временных и материальных затрат. В этих условиях важную роль приобретают вычислительные подходы, в частности, основанные на прямых квантово-механических расчетах. Вычислительное моделирование позволяет проводить виртуальные исследования строения, свойств и механических характеристик нанообъектов, прогнозировать их поведение при деформировании, проводить компьютерный подбор структуры компонентов для прогнозирования и получения материалов с заранее заданными свойствами.

В настоящей работе в компьютерном эксперименте был рассмотрен ряд потенциально перспективных наполнителей эпоксидных клеев, а именно: природный минерал шунгит, а точнее две его основные компоненты - аморфный

углерод и силикат, а также фуллерен, графен, оксид графена, частицы оксида алюминия и алюминия.

Полученные результаты показывают, что самым эффективным наполнителем, демонстрирующим наиболее высокие механические сдвиговые показатели, является оксид графена. Несколько уступают ему силикатный наполнитель и открытые углеродные нанотрубки. При их использовании частицы наполнителя удерживаются фрагментами эпоксидных цепей как водородными, так и Ван-дер-Ваальсовыми, дисперсионными силами. Таким образом, оксид графена, силикаты и открытые углеродные нанотрубки перспективно использовать в качестве эффективных наполнителей эпоксидных клеев.

В работе установлено, что взаимодействие фрагментов эпоксидных цепей с боковыми стенками углеродных нанотрубок несколько слабее, чем с открытыми концами. Таким образом, перед наполнением эпоксидных клеев следует стремиться к открытию концов трубок. При этом важно использовать короткие трубки для увеличения доли открытых концов на удельное содержание наполнителя в эпоксидном клее. По энергии взаимодействия и силе сдвигового трения боковые поверхности углеродных нанотрубок имеют практически те же характеристики межфазных взаимодействий, что и другие рассмотренные ароматические системы - графен и фуллерен. Углеродные гидрофобные частицы также не демонстрируют высоких механических показателей в среде эпоксидных матриц. Их можно отнести к неактивным наполнителям. Частицы алюминия и оксида алюминия мало влияют на улучшение механических свойств межфазных слоев в эпоксидных клеях и относятся к инертным наполнителям.

Что касается оксида графена, то он, по сути, является поверхностно-модифицированным эпоксидными, гидроксильными и карбонильными группами графеном. Действительно, энергия связывания “модифицированного” графена на 18.6 ккал/моль ниже, чем у немодифицированного графена, а сила сдвигового трения выше на 17.4 ккал/моль*Å. Это свидетельствует о перспективности его использования в указанных полимерных матрицах в качестве усиливающего механические свойства компонента.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Фрейдлин А.С.* Прочность и долговечность клеевых соединений. – М.: Химия, 1981. – 272 с.
2. *Хозин В.Г.* Усиление эпоксидных полимеров. – Казань: Изд-во ПИК Дом печати, 2004. – 446 с.
3. *Николаев А.Ф., Крыжановский В.К., Бурлов В.В. и др.* Технология полимерных материалов. – СПб.: Изд-во Профессия, 2008. – 544 с.
4. Наполнители для полимерных композиционных материалов: Справочное пособие / Пер. с англ; Под ред. Л.Г.Бабаевского. – М.: Химия, 1986. – 726 с.
5. Оригинальный пакет квантово-механических программ NDDO/sp-sp^d / Свидетельство о государственной регистрации №2009614949 от 10.09.2009.
6. *Притыкин Л.М., Разумова О.В., Соколова Ю.А.* Разработка и оптимизация состава эпоксидных клеев, содержащих новые наполнители с повышенной адгезионной способностью // Пластические массы. – 1995. – №3. – С.39-40.
7. *Yanovsky Yu. G., Nikitina E.A., Nikitin S.M., Karnet Yu N.* Mechanisms underlying the interaction of carbon nanotubes with epoxy binders. quantum-mechanical investigations // Nanomechanics Science and Technology: An International Journal – 2011. – Vol.2. – N4. – P.323-345.

8. *Dewar M.J.S., Thie W.J.* Ground states of molecules. The AM1 method. Approximations and parameters // *Am. Chem. Soc.* – 1977. – Vol.99. – P.4899-4907.
9. *Stewart J.J.P.* Optimization of parameters for semi-empirical methods I-method // *J. Comp. Chem.* – 1989. – Vol.10. – P.209-221.
10. *Dewar M.J.S., Zoebisch E.G., Healey E.F., Stewart J.J.P.* Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: a new general purpose quantum mechanical molecular model // *J. Am. Chem. Soc.* – 1985. – Vol.107. – P.3902-3909.
11. *Яновский Ю.Г., Власов А.Н., Никитина Е.А., Карнет Ю.Н.* Анализ теоретической прочности межфазных слоев адсорбционных комплексов полимерных композитных сред // *Механика композиционных материалов и конструкций.* – 2007. – Т.13. – №1. – С.33-41.
12. *Яновский Ю.Г., Григорьев Ф.В., Никитина Е.А., Власов А.Н., Карнет Ю.Н.* Наномеханические свойства нанокластеров полимерных композитов // *Физическая мезомеханика.* – 2008. – Т.11. – №3. – С.61-74.
13. *Яновский Ю.Г., Никитина Е.А., Никитин С.М., Карнет Ю.Н.,* Композиты на основе полимерных матриц и углеродно-силикатных нанонаполнителей. квантово-механическое исследование механических свойств, прогнозирование эффекта усиления // *Механика композиционных материалов и конструкций.* – 2009. – Т.15. – №4. – С.566-589.
14. *Карнет Ю.Н., Никитин С.М., Никитина Е.А., Яновский Ю.Г.* Компьютерное моделирование механических свойств углеродных наноструктур // *Известия РАН. Механика твердого тела.* – 2010. – №4. – С.121-137.
15. *Rahane B., Deshpande M.D., Kumar V.* Structural and electronic properties of $(Al_2O_3)_n$ clusters with $n=1-10$ from first principles calculations // *J. Phys. Chem. C.* – 2011. – Vol.115. – P.18111-18121.
16. *Martin T.P.* Shells of atoms // *Physics Reports.* – 1996. – Vol.273. – P.199-241.
17. *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A.* Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science.* – Vol.306. – P.666-669.
18. *Chen Zh., Lin Y.-M., Rooks M.J., Avouris P.* Graphene nano-ribbon electronics // *Physica E.* – 2007. – Vol.40. – P.228-232.
19. *Bunch J.S., van der Zande A.M., Verbridge S.S., Frank I.W., Tanenbaum D.M., Parpia J.M., Craighead H.G., McEuen P.L.* Electromechanical resonators from graphene sheets // *Science.* – 2007. – Vol.315. – P.490-493.
20. *Lee C., Wei X., Kysar J. W., Hone J.* Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science.* – 2008. – Vol.321. – P.385-388.
21. *Loh K.P., Bao Q., Eda G., Chhowalla M.* Graphene oxide as a chemically tunable platform for optical applications // *Nat. Chem.* – 2010. – Vol.2. – N12. – P.1015-1024.
22. *Park S., Ruoff R.S.* Chemical methods for the production of graphene // *Nat. Nanotechnol.* – 2009. – Vol.4. – N4. – P.217-224.

Типография ООО «Сам Полиграфист»
г. Москва, Протопоповский пер., д.6

Подписано в печать 09.12.2013
Объем 16 п.л. Тираж 200 экз. Зак. №84
