МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 532.517.2

ЕДИНЫЙ ПОДХОД К СИСТЕМАТИЗАЦИИ МУЛЬТИДИСЦИПЛИНАРНЫХ МНОГОМЕРНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

А.В. Коровайцев[1], **профессор, Е.А. Коровайцева**[2], **научный сотрудник,**
В.А. Ломовской, заведующий кафедрой

кафедра Прикладной механики и основ конструирования МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия

[1]*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, 125993 Россия*

[2]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182 Россия*

e-mail: lomovskoy@phyche.ac.ru

Предложен подход к систематизации связанных задач различных областей научного знания, основанный на их математической постановке. Описана единая методология решения таких задач. Использование методологии проиллюстрировано примерами решения контактной задачи и задачи химического машиностроения.

Ключевые слова: *мультидисциплинарные задачи, начально-краевые задачи, метод конечных элементов, метод дифференцирования по параметру, метод Ньютона-Рафсона.*

С развитием компьютерного моделирования на этапе проведения предпроектных работ по созданию новых образцов техники весьма актуальны стали вопросы отказа от простейших математических представлений. Насущными стали задачи создания единого математического аппарата решения замкнутых систем разрешающих и дополнительных соотношений при моделировании комплекса процессов, изучаемых не близкими областями науки. Формально единство обеспечивается математической постановкой: взаимосвязанная совокупность линейных и нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, дополненная различного типа алгебраическими соотношениями. Причем в этой совокупности далеко не всегда дифференцирование соотношений в какой-либо из мультидисциплинарных задач приводит к краевым задачам. В целом для совокупности мультидисциплинарных задач характерно произвольное сочетание начально-краевых и начальных задач для взаимосвязанных переменных всей задачи в целом.

В общем случае основной целью мультидисциплинарной систематизации научных задач является расширение возможностей моделирования комплексных природных процессов. В данной работе инструментарием достижения целей систематизации является единый символьный математический аппарат теории дифференциальных уравнений. Среди форм инструментария избран метод конечного элемента в варианте слабых соотношений Галеркина. Кроме того, в качестве единого инструментария решения внутренних задач для многодисциплинарной задачи используются:

1) в нелинейных начально-краевых задачах метод дифференцирования по параметру Д.Ф. Давиденко и неявный метод Хуболта;

2) в квазилинейных начальных и начально-краевых задачах одно-, двух- и трехмерные конечные изопараметрические элементы в зависимости от мерности соответствующей задачи;

3) в нелинейных алгебраических задачах модифицированный метод Ньютона-Рафсона.

В итоге его использования формируется разрешающая система квазилинейных алгебраических уравнений блочной структуры из двух структурных элементов: обычной матрицы жесткости и окаймляющего столбца календарного параметра согласно работам В.И. Шалашилина. Размерность матрицы жесткости разрешающей матрицы коэффициентов определяется топологией конкретной задачи. Блочная структурность матрицы коэффициентов разрешающей системы квазилинейных алгебраических уравнений позволяет использовать при решении системы уравнений разработанные варианты прогонок и триангуляции.

Наиболее детально проработанные задачи механики деформируемого твердого тела (МДТТ), после их должного представления, формально являющиеся задачами одного из разделов теории дифференциальных уравнений, и метод конечных элементов составляют базу для получения решений задач мультидисциплинарной принадлежности. Но вследствие автономии задач даже МДТТ, без универсальной систематизации мультидисциплинарных многомерных начально-краевых задач существенно затрудняется их замкнутая постановка, невозможны осмысление и толкование получаемых результатов даже при использовании известных вычислительных комплексов. Причина одна: комплексность задачи, несмотря на резкую разнородность математических характеристик каждой из них. Примером могут служить хотя бы связанные задачи термоупругости, задачи аэрогидроупругости, химической кинетики, электромагнетизма и многие другие. Попытки их совместного решения вынуждают либо использовать специальные гибридные конечно-элементные сетки на стыке разнородных сред, либо соответствующие приемы высокоточной интерполяции для адекватного сращивания качественно разнородных сеток.

При создании универсальной систематизации одномерных линейных краевых задач МДТТ удалось провести эту работу введением трех простейших канонических форм [1]. Это позволило резко упростить контроль над обусловленностью краевой задачи на каждом из ее этапов и разработать новый автоматический метод контроля с выдачей рекомендаций по сегментации задачи. Обобщение его на иные типы краевых задач, включая нелинейные, несложно и является лишь делом техники.

В настоящей работе делается попытка такого же типа систематизации мультидисциплинарных задач. Структура таких задач в общем случае определяется соотношениями начальных, начально-краевых и алгебраических задач. Замкнутость математической формулировки и их взаимосвязь обеспечивается как функциональными соотношениями этих задач, так и произвольной совокупностью начальных, граничных условий и условий сопряжения при произвольной топологии каждой из задач в составе их взаимосвязанного комплекса. В общем случае предполагается, что все эти соотношения и ограничения на входящие в них искомые величины, описывающие замкнутую математическую формулировку мультидисциплинарной задачи, получены только вариационными методами каждой из составляющих общей задачи.

В качестве примера рассматриваются задачи канонических форм в универсальной постановке с расширением типа задач на многомерные. Системы обыкновенных дифференциальных уравнений для простоты считаются разрешенными относительно векторов разрешающих переменных $\mathbf{y}_i$, где i – индекс мультидисциплинарности задачи, а под разрешающими понимаются переменные, входящие в состав граничных условий мультидисциплинарной задачи.

Мультидисциплинарность задачи приводит к тому, что в общем случае задачи канонической формы I неприменимы к таким задачам, которые даже в простейшем случае линейных краевых задач МДТТ переходят к задачам формы II:

$$\frac{dy_i}{dx_i} = A_i(x_i, \mu_i)y_i + a_i(x_i, \mu_i),\ i \in [1, N], \qquad (1)$$

где μ_i – вектор исходных данных, a_i – вектор распределенных внешних нагрузок на i-м элементе, N – число краевых задач в составе мультидисциплинарной задачи.

Кроме того, для задач канонической формы более высокой иерархии характерно повышение уровня, то есть появляются комплексные непредвидимые иерархии типов задач, обусловленные ее мультидисциплинарностью. Структурные особенности основных элементов мультидисциплинарной задачи наиболее просто иллюстрируются на примере одномерных нелинейных начальных, линейных начально-краевых и нелинейных алгебраических задач:

1) для нелинейной начальной задачи с индексом i типовые дифференциальные соотношения задач Коши имеют вид

$$\frac{dy_i}{dt} = f_i(x_i, y_i, z_j, \mu_i),\ i \in [1, L],\ j \in [1, M], \qquad (2)$$

где L – число задач Коши в составе мультидисциплинарной задачи, M – число векторов взаимосвязи i-ой неизвестной с другими векторными неизвестными решениями мультидисциплинарной задачи,

2) для линейной начально-краевой задачи с индексом i типовые дифференциальные соотношения задачи при использовании векторно-матричной формы записи имеют вид

$$\frac{\partial y_i}{\partial x_i} = A_i(x_i, \mu_i)y_i + B_j(x_i, \mu_i)z_j + a_i(x_i, \mu_i) + M_i\frac{\partial^2 y_i}{\partial t^2},\ i \in [1, L],\ j \in [1, K], \qquad (3)$$

где M_i – матрица распределенных инерционных свойств материала на i-ом элементе, L – число начально-краевых задач в составе мультидисциплинарной задачи, K – число векторов взаимосвязи i-ой неизвестной с другими векторными неизвестными решениями мультидисциплинарной задачи,

3) для алгебраических задач с индексом i типовые соотношения задачи при использовании векторной формы записи имеют вид

$$f_i(x_i, y_i, z_j, \mu_i) = 0,\ i \in [1, L],\ j \in [1, M], \qquad (4)$$

где L – число алгебраических задач в составе мультидисциплинарной задачи, M – число векторов взаимосвязи i-ой неизвестной с другими векторными неизвестными решениями мультидисциплинарной задачи.

Для многомерных задач используется более общая постановка, в которой структурирование знаний с позиций информационной технологии позволяет использовать единую для всех задач нотацию дифференциальных уравнений в форме:

$$e_a \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial U}{\partial t} - \nabla \cdot (c\nabla U + \alpha U - \gamma) + \beta \cdot \nabla U + aU = f \tag{5}$$

Здесь в зависимости от конкретики задачи коэффициенты $e_a, d_a, c, \alpha, \gamma, \beta, a$ являются тензорами рангов с 0 по 4, $\mathbf{U}$ - вектор обобщенных разрешающих переменных, $\mathbf{f}$ - вектор обобщенных внешних воздействий. Сопутствующие унифицированные элементы информатизации конечно-элементной формы мультидисциплинарного программного комплекса связаны с конкретными представлениями дифференциальных и алгебраических операций над функциями скалярного, векторного, матричного и тензорного аргументов. Все компоненты (5) имеют физический смысл также в зависимости от конкретики частной задачи мультидисциплинарного комплекса. Обычно компоненты левой части (5) характеризуют последовательно: массовые, демпфирующие, диффузионные, консервативные конвекционные, акустические, неконсервативные конвекционные и абсорбционные свойства.

Представленная выше методология решения мультидисциплинарной задачи продемонстрирована двумя модельными примерами решения формально совершенно разнородных задач: нелинейной контактной задачи о действии упругого цилиндра на полуплоскость из механики деформируемого твердого тела (обобщение задачи Герца) [2] и задачи химического машиностроения [3], решенных с помощью одного и того же программного комплекса. Данные модели являются мультифизическими, поскольку в них анализируется более одного физического явления.

Расчетная схема первой задачи представлена на рис. 1. Граничные условия и условия сопряжения симметричных частей имеют вид: на S_1 – условия симметрии, на S_2 – условия свободного края, на S_3 – жесткое защемление представительной площади бесконечной полуплоскости, а S_4 описывает нелинейные контактные условия сопряжения контактируемых областей с различными физическими характеристиками

$$\begin{aligned} x_1 + U_1(x_1, y_1) &= x_2 + U_2(x_2, y_2), \\ y_1 + V_1(x_1, y_1) &= y_2 + V_2(x_2, y_2), \end{aligned} \tag{6}$$

Исходными для задачи являются дифференциальные и алгебраические уравнения

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} &= F_x, & \frac{\partial U}{\partial x} &= \varepsilon_x, & \gamma_{xy} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x}\right); \\ -\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} &= F_y; & \frac{\partial V}{\partial y} &= \varepsilon_y, & \sigma &= D\varepsilon. \end{aligned} \tag{7}$$

В нотации мультидисциплинарной задачи соотношения (7) приводят к частному виду соотношений (5) в форме уравнений Навье в перемещениях

$$\nabla \cdot (c_i \nabla U_i) + f_i = 0, \tag{8}$$

где i – индекс мультидисциплинарности задачи.

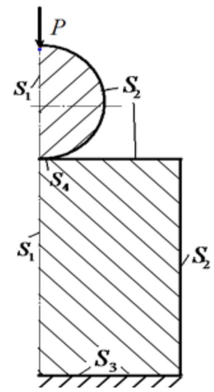

Рис. 1. Схема задачи.

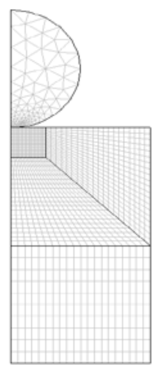

Рис. 2. Расчетная сетка задачи.

Контактируемые деформируемые тела в расчетах разбивались на конечные элементы полуавтоматически с учетом возможной концентрации напряжений в области границы S_4 (рис. 2). На границе S_4 для контактирующих тел использованы несогласованные сетки элементов с итерационным уточнением взаимодействия контактных пар с заранее заданной точностью описания контакта тел. Использован двухступенчатый встроенный алгоритм итераций метода последовательных приближений с использованием штрафных санкций для подчиненной контактирующей поверхности при коррекции контактного давления и трения. На первом этапе рассчитывалось положение подчиняющей контактной поверхности в автономном расчете состояния полуплоскости (внешний цикл итераций), на втором - расчет несогласованности подчиняющей и подчиненной контактных поверхностей и штрафных давления и трения на подчиненную поверхность (внутренний цикл итераций).

Результаты расчетов проиллюстрированы на рис. 3 – сопоставлением численного и аналитического расчетов распределения безразмерной величины контактного давления по поверхности контакта при нагрузке P = 35 кН, на рис. 4 – распределением напряжений по верхнему краю полуплоскости.

Рис. 3. Сравнение расчетов контактного давления.

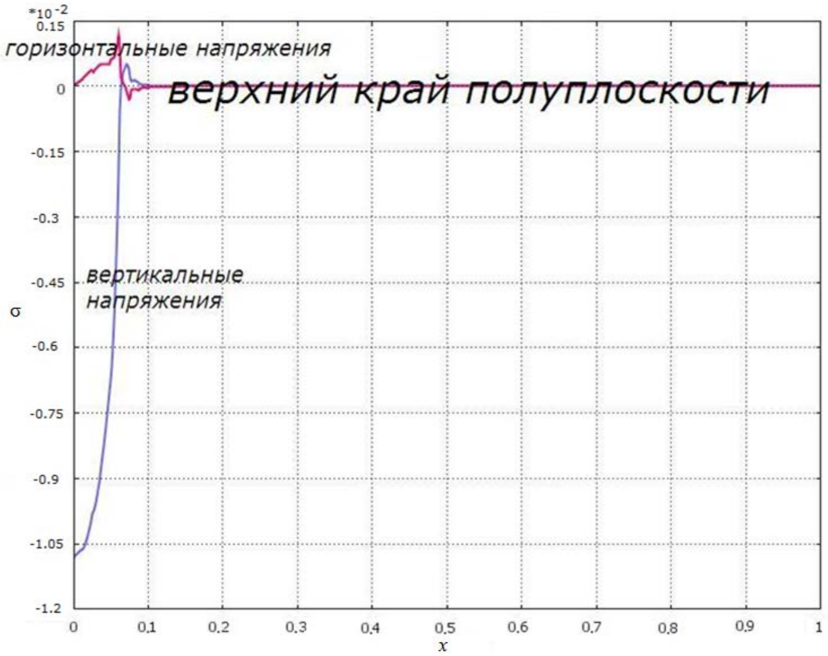

Рис. 4. Распределение напряжений по верхнему краю полуплоскости.

Вторая иллюстрационная задача связана с расчетом модели кассетного реактора низкого давления химического осаждения из паровой фазы. Химическое осаждение из паровой фазы – важный элемент технологии производства микрочипов. Он используется для напыления различных специальных материалов на подложкахв виде пакета пластин при низком давлении. Реакторы низкого давления при этом служат обеспечению высокой диффузионности газообразной фазы, которая приводит к однородной толщине напыления, потому что процесс ограничивается только кинетикой напыления [3].

Расчетная схема второй задачи представлена на рис. 5.

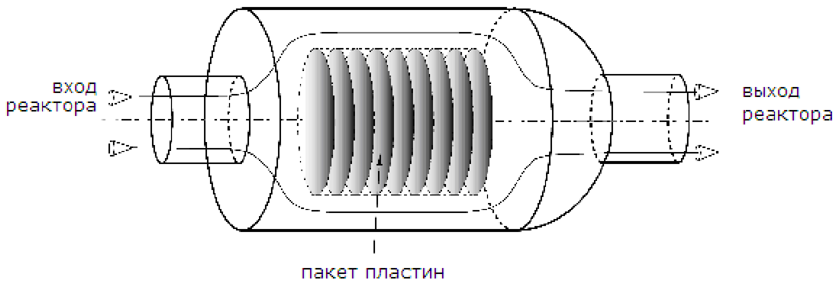

Рис. 5. Схема кассетного реактора и принципа процесса напыления.

В связи с конкретными относительными размерами элементов реактора используются следующие допущения расчета:

- плотность газа и температура в реакторе считаются постоянными,
- в пакете пластин конвекцией между пластинами в первом приближении пренебрегается и учитывается только диффузия,
- при описании геометрии пакета пластин он моделируется анизотропной монолитной средой с нулевой диффузией в продольном направлении,
- в радиальном направлении диффузия считается переменной и зависящей от степени упаковки пластин в связку по методу смесей.

В итоге модель реактора заменяется на плоскую, представленную симметричной своей частью на рис. 6. В модели выделяются две области: V_1 – область связки напыляемых пластин и V_2 – область свободного течения газа в пристеночном канале реактора.

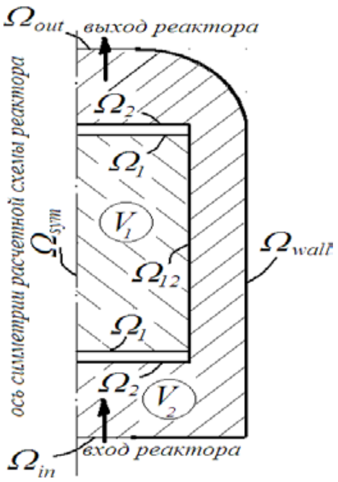

Рис. 6. Схема задачи.

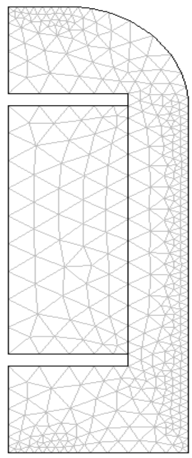

Рис. 7. Расчетная сетка задачи.

Исходными для второй задачи являются дифференциальные уравнения:

- для течения газа в канале V_2 уравнения Навье-Стокса, уравнения неразрывности для ламинарного течения и диффузии изотропного газа в цилиндрических координатах

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial r}\left(-\eta r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(-\eta r\frac{\partial u}{\partial z}\right)+\rho r\left(u\frac{\partial u}{\partial r}+v\frac{\partial u}{\partial z}\right)+r\frac{\partial p}{\partial r}=0,\\
&\frac{\partial}{\partial r}\left(-\eta r\frac{\partial v}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(-\eta r\frac{\partial v}{\partial z}\right)+\rho r\left(u\frac{\partial v}{\partial r}+v\frac{\partial v}{\partial z}\right)+r\frac{\partial p}{\partial z}=0,\\
&r\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial z}\right)+v=0,\\
&\frac{\partial}{\partial r}\left(-Dr\frac{\partial c}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(-Dr\frac{\partial c}{\partial z}\right)+ru\frac{\partial c}{\partial r}+rv\frac{\partial c}{\partial z}=0;
\end{aligned}
\tag{9}
$$

- в области связки напыляемых пластин V_1 в тех же координатах уравнение анизотропной модли диффузии газа

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(-D_{eff}\,r\frac{\partial c}{\partial r}\right)=-rkS_{eff}\,, \tag{10}$$

где D_{eff} – эффективный коэффициент диффузии газа, переменный только вдоль радиуса реактора, k – коэффициент кинетики реакции диссоциации газа, а S_{eff} – эффективная площадь поверхности связки пластин. Приведение физических констант газа и характеристик связки пластин к их эффективным значениям для области V_1 проводится по теории смесей.

Для решения задачи расчета химического осаждения из паровой фазы необходимой компоненты газа на связку напыляемых пластин уравнения (9, 10) приводятся к стандартной форме (5) мультидисциплинарных задач и выделяются 15 границ для описания задачи с расчетной схемой, представленной на рис.6. Типовые 11 границ обозначены на рисунке символами Ω с индексами, соответствующими входу и выходу из реактора, симметрии расчетной схемы, стенке реактора и внутренним областям реактора, остальные связаны с геометрией реактора и креплением связки пластин. Они позволяют сформулировать 24 граничных условия мультидисциплинарной задачи. К ним соответственно относятся:

- условия непротекания газа $u=0$, $v=0$ на Ω_{wall}, Ω_1, Ω_2, Ω_{12};

- условия симметрии $u=0$ на Ω_{sym};

- условие начальной концентрации газа $c=c_0$ на Ω_{in},;

- условие конвекционного переноса газа $-D\frac{\partial c}{\partial r}=0,\ -D\frac{\partial c}{\partial z}=0$ на Ω_{out}.

На рис. 8. представлено полученное в результате расчетов изменение концентрации газа на внутреннем контуре реактора Ω_{sym} - Ω_1-Ω_{12}- Ω_1.

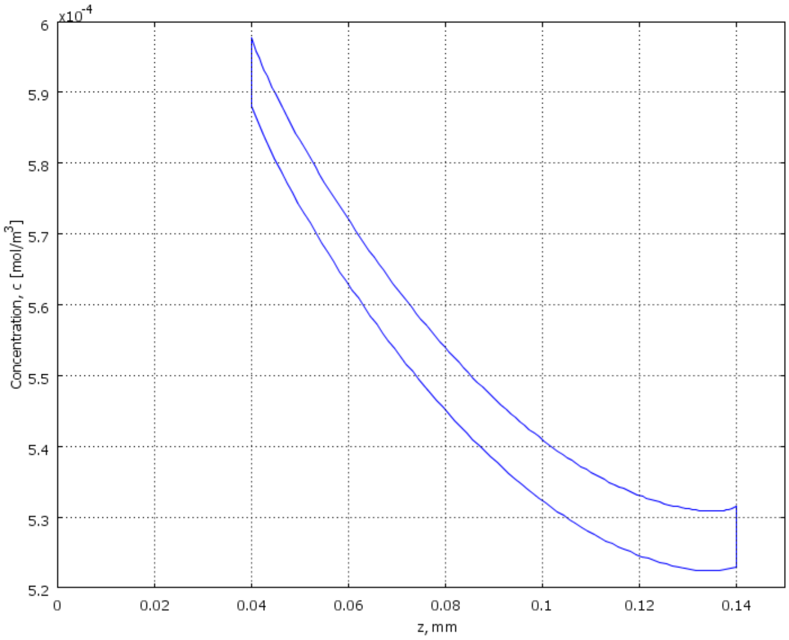

Рис. 8. Изменение концентрации газа на внутреннем контуре реактора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-08-00504-а).

ЛИТЕРАТУРА:

1. Коровайцев А.В., Коровайцева Е.А. Универсальная систематизация одномерных линейных краевых задач МДТТ // Материалы XVII Междунар. симпозиума «Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред» им. А.Г. Горшкова. М.: МАИ, 2011. С. 101.
2. Konter A.W.A. Advanced finite element contact benchmarks. NAFEMS, 2006. 62 p.
3. Fogler H.S. Elements of Chemical Reaction Engineering. Prentice Hall, 2005. 1080 p.

A UNIFIED APPROACH TO SYSTEMATIZATION OF MULTIDISCIPLINE MULTIDIMENSIONAL NONLINEAR INITIAL BOUNDARY VALUE PROBLEMS

A.V. Korovaytsev[1], E.A. Korovaytseva[2], V.A. Lomovskoy[@]

M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies, Moscow, 119571 Russia

[1]*Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, 125993 Russia*

[2]*National Research Centre (NRC "Kurchatov Institute"), Moscow, 123182 Russia*

[@]*Corresponding author e-mail: lomovskoy@phyche.ac.ru*

An approach to the systematization of coupled problems of different science areas is suggested. A unified methodology for solving such problems is described. The usage of this methodology is illustrated by examples of solving the contact problem and the problem of chemical machine-building.

Keywords: *multidiscipline problems, initial boundary value problems, finite element method, differentiation by parameter method, Newton-Raphson method.*