

# ИДЕНТИФИКАЦИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ЗАДАЧ МОМЕНТНОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ

Д.Б. Волков-Богородский, С.А. Лурье, В.И. Зубов, С.А. Харченко, Ю.П. Рогов

Для описания аномальных механических свойств тонких структур и композиционных материалов на их основе (с нановключениями) развита теория сред с масштабными эффектами, алгоритм и методика расчета, учитывающая масштабные эффекты, связанные с локальным характером взаимодействий между различными фазами в зоне контакта. Теоретической основой является континуальная модель среды [1-5], учитывающая масштабные эффекты, связанные с локальным характером взаимодействий между различными фазами в зоне контакта. Масштабные эффекты определяются когезионными взаимодействиями в окрестности границ отдельных фаз, и адгезионными взаимодействиями на границах контактирующих элементов. Взаимодействия этого типа имеют локальный характер и концентрируются около границ фаз. Тем не менее, влияние их на эффективные макро характеристики материала может быть весьма существенным для сред, с большой протяженностью границ контакта фаз. Такая ситуация возникает в композитах, дисперсно- армированных микро- и нано-включениями. Вычисление эффективных и прочностных характеристик нанокompозитов с учетом межфазных слоев по границам контакта включения – матрица, а также решение проблемы идентификации параметров модели проводится с помощью специально разработанного численного метода блоков.

В отличие от классической теории упругости обобщенная физическая модель среды, учитывающая локальные эффекты кроме классических модулей упругости содержит неклассические физические постоянные. Часть из них имеют ту же размерность, что и классические модули упругости, позволяя учесть поврежденность материала и характеризуют взаимное возмущение классического поля перемещений и локального поля перемещений, сконцентрированного около границ контакта фаз. Другая часть физических постоянных имеет размерность отличную от размерности классических модулей упругости и определяет масштабные эффекты. В целом модель содержит некоторое количество дополнительных постоянных, которые требуется определить по данным некоторых испытаний.

Сформулирована общая математическая вариационная постановка краевой задачи [1-5]. В рамках этой постановки записывается полная система разрешающих уравнений и граничных условий. Краевая задача сводится к решению связанных задач градиентной теории упругости [1-5]. Ее решение определяет взаимодействие двух полей перемещений, удовлетворяющих классическому и неклассическому уравнению теории упругости. Определяются поля перемещений, напряжений и деформаций. Затем решается проблема определения эффективных свойств микро- и нано-композитов, как на основе осреднения по энергии деформаций (метод Эшелби), так и с помощью процедуры асимптотического осреднения Бахвалова. В дальнейшем решение, построенное на основе теории межфазного слоя, применяется для прогнозирования эффективных свойств современных материалов (нано-композитов).

Численное моделирование рассматриваемой проблемы сводится к решению системы уравнений высокого порядка. Особенностью данной задачи является необходимость моделирования локальных полей с экспоненциальной изменяемостью типа погранслоя с высокой точностью, и учета одновременно кривизны границы контакта фаз. При этом для обеспечения необходимых условий контакта требуется обеспечивать высокую точность вычислений производных до третьего порядка включительно. Высокая градиентность погранслоев в задаче моделирования межфазного слоя затрудняет использование традиционных численных методов. Развиваемый подход учитывает особенности локальных состояний аналитически, т.е. используется точная аппроксимация локальных полей с учетом их аналитических особенностей. Тем не менее численная реализация метода с контролем точности требует больших вычислений даже на этапе прямого решения краевых задач. Тем более, на этапе проблемы идентификации (обратная задача) и прогнозирования проблема больших вычислений становится еще более актуальной.

В работе [6,7] был предложен численно-аналитический метод для решения задач механики и акустики, который используется для решения базовых задач в алгоритме идентификации и прогнозирования. Этот метод основан на разбиении исходной области на более простые подобласти-блоки, и на представлении решения в каждом из блоков в виде обобщенных рядов Тейлора по фундаментальным системам функций, точно удовлетворяющих пространственному уравнению Лапласа или Гельмгольца. Сшивка локальных представлений осуществляется с помощью системы квадратичных функционалов. Внешне метод напоминает метод конечных элементов, но имеет принципиальные отличия, поскольку вычисляет поле напряжений не в отдельных точках интегрирования, а во всей области, и позволяет контролировать точность получаемого решения, т.к. метод основан на точных аналитических представлениях решения в подобластях.

Структура алгоритмов блочного метода хорошо согласуется с архитектурой современных многоядерных вычислительных комплексов, которые сочетают в себе возможность интенсивных вычислений в блоке на нескольких ядрах на общей памяти, и взаимодействие между блоками в разреженной структуре разбиения исходной области на уровне распределенной памяти. В качестве структуры разбиения исходной области на подобласти в методе блоков используется конечно-элементная сетка, и при этом точно учитывается кривизна границы включения. Благодаря этому обеспечивается взаимодействие аналитического метода с другими конечно-элементными комплексами, которые могут использовать данные идентификации и прогнозирования эффективных свойств в полномасштабных расчетах конструкций, использующих нано-материалы.

В аналитическом блочном методе используется несколько подходов: а) интенсивные вычисления на нескольких ядрах при относительно небольшом числе блоков; б) распределенные вычисления для независимых блоков при большом числе блоков и относительно небольшой степени аппроксимации в блоке; в) адаптация к аналитическим особенностям задачи за счет варьирования аппроксимирующей системы функций. Для вычисления аппроксимирующей системы функций в аналитическом методе блоков была разработана специальная методика квазиразделения переменных, позволяющая строить для решений уравнения Гельмгольца полные системы функций с заданными аналитическими свойствами.

Эти функции определяются как продолжения (полиномиальные) стандартных решений уравнения Гельмгольца меньшей размерности в классе функций комплексной переменной, наиболее подходящим объектом является комплексная степенная функция  $w^\mu$ , где  $w = x + iy$ . Необходимая система функций определяется с помощью формального ряда на основе анализа уравнения Гельмгольца в комплексных переменных  $w$ ,  $\bar{w} = x - iy$  и  $z$ :

$$\Phi(P) = \Phi(w, \bar{w}, z) = \sum_p \phi_p(w, \bar{w}) U_p(z), \quad 4 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial w \partial \bar{w}} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + \kappa^2 \Phi = 0 \quad (1)$$

Фактически ряд (1) определяется продолжаемой в 3D функцией комплексной переменной  $\phi(w)$  и законом продолжения  $U(z)$  вдоль оси  $z$ ,  $\Phi(P) = \Phi[\phi(w); U(z)] \sim \phi(w)U(z)$ , см. [8]. Отметим некоторые классы построенных функций, используемых в комплексе программ, реализующих аналитический метод блоков. Это “полиномиальные” функции  $\Phi_v^\mu(P)$  при целых показателях  $\nu$  и  $\mu$ , предназначенные для аппроксимаций общего вида; они однозначно определяемые главным членом ряда, задающим продолжаемую комплексную степень в соотношениях (1):

$$\Phi_v^\mu(P) : z^{\nu-\mu} w^\mu \quad (2)$$

Система дифференциальных и рекуррентных соотношений для этих функций связывает между собой функции с показателями  $\nu$ , отличающимися на 2, см [8].

Другой класс функций определяется другим законом продолжения в (1):

$$\Phi_v^\mu(P) : \frac{J_{\nu+1/2}(\kappa z)}{z^{\mu+1/2}} w^\mu \quad (3)$$

Это – известный класс функций разделения переменных для уравнения Гельмгольца в сферической системе координат, записанный в форме ряда (1). Представление в виде ряда (1) позволяет получить систему дифференциальных соотношений для этих функций, которая эффективно используется в алгоритме блочного метода при качественной визуализации решения.

Для аппроксимации решений в областях типа пластины (см. рис. 1) в окрестности зоны погранслоного поведения функций в методе блоков используется класс “полиномиальных” функций, учитывающий экспоненциальное поведение решения и определяемый при целых неотрицательных значениях  $\nu$  и  $\mu$  соотношениями:

$$\Phi_v^{(+)\mu}(P) : x^{\nu-\mu} y^\mu \operatorname{ch}(\kappa z), \quad \Phi_v^{(-)\mu}(P) : x^{\nu-\mu} y^\mu \operatorname{sh}(\kappa z)/\kappa \quad (4)$$

Все эти классы функций обладают свойством полноты (при целых неотрицательных  $\nu$ ,  $\mu$ ) для представления решения в окрестности начала координат. Это следует из их дифференциальных свойств, дающих возможность построить обобщенный ряд Тейлора для решений уравнения Гельмгольца с коэффициентами, вычисляемыми через производные по переменным  $w$ ,  $\bar{w}$  и  $z$  в начале координат (см. [6-8]). Аналитические особенности функций, в частности рекуррентные и дифференциальные соотношения между ним эффективно используются также в алгоритме формирования блочной матрицы системы линейных уравнений.

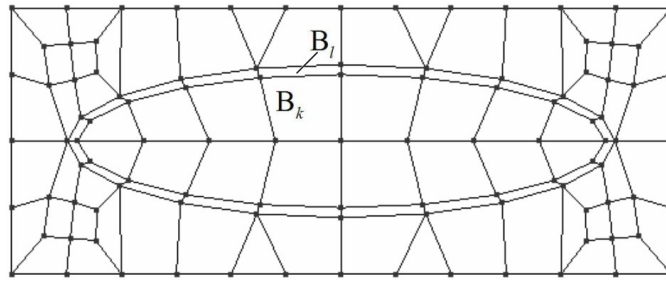


Рис. 1. Разбиение области с включением на односвязные блоки с учётом межфазного слоя

В каждом из блоков используются разложения искомых перемещений по системам функций (2) – (4) и обобщенное представление Нейбера-Папковича через вспомогательные векторные потенциалы, удовлетворяющие уравнениям Лапласа или Гельмгольца. Коэффициенты в этих разложениях определяются из условий сшивки локальных представлений по всему ансамблю блоков. Для этого с каждым блоком  $B_k$  связывается свой минимизирующий функционал, состоящий из квадратичных слагаемых в интегральной  $L_2$ -норме по границе блоков, обеспечивающих сшивку функций нужной степени гладкости, и из энергетических слагаемых, представляющих локальную энергию в блоке:

$$F_k = E_k(\vec{R}_k) + \beta \left( \sum_l \|\vec{R}_k - \vec{R}_l\|_{L_2(S_{kl})}^2 + \sum_l \left\| \frac{\partial \vec{R}_k}{\partial n} - \frac{\partial \vec{R}_l}{\partial n} \right\|_{L_2(S_{kl})}^2 \right), \quad (5)$$

$$E(\vec{R}) = \frac{1}{2} \int_G [2\mu \varepsilon_{ij} \varepsilon_{ij} + \lambda \theta^2 + C u_i u_i] dV - \frac{1}{2} \int_{\partial G} D_{ij} \frac{\partial R_i}{\partial n} \frac{\partial R_j}{\partial n} dV', \quad \vec{u} = -\mathbf{L}(\vec{R})/C, \quad (6)$$

здесь  $S_{kl}$  – общая часть границы блоков, суммирование производится по всем индексам  $l$ , для которых  $\vec{B}_k \cap \vec{B}_l \neq \emptyset$ ,  $\beta$  – некоторый коэффициент, принимающий большое значение (множитель Лагранжа), слагаемые  $E_k(\vec{R}_k)$  вычисляются по границе блоков с помощью интегральной формулы Грина. В конструкции функционала (5) энергетические слагаемые выполняют роль регуляризатора Тихонова для вырожденного функционала метода наименьших квадратов, обеспечивающего выполнение только части необходимых условий (сшивка перемещений между блоками). Одновременная минимизация всей системы функционалов реализуется в виде симметричной блочной системы уравнений для нахождения неизвестных коэффициентов в разложениях вспомогательных потенциалов, и позволяет определить все локальные решения  $\vec{R}_k$ . Оптимизация системы функционалов (5), (6) приводит к системе линейных уравнений относительно коэффициентов в разложениях решения с плотной блочно-разреженной матрицей, с относительно небольшим числом блоков и относительно большим размером каждого блока. Для решения такой блочной системы линейных уравнений развиваются свои прямые и итерационные методы решения. Интегрирование энергии (6) сводится к вычислению поверхностного интеграла от произведения матрицы моментов или вектора поверхностных сил на полный вектор перемещений и его производные первого порядка; интегрирование производится на тех же узлах и с теми же весами, что и для квадратичной невязки для перемещений и их нормальных производных. Таким образом, вычисление значений функционалов (5) сводилось к вычислению коллокационного вектора  $\vec{V}(P'_y) = \{\Phi_v^\mu(P'_y)\}$  на заданном наборе точек  $\{P'_y\}$ .

После решения блочной системы уравнений фактическое достигнутое значение невязки функционала в  $k$ -м блоке позволяет контролировать качество полученного решения; если невязка функционалов достаточно близка к нулю, то и полученное решение близко к точному решению. С увеличением максимальной степени используемых функций  $M$  погрешность  $\delta_{\max}$  функциональной  $L_2$ -невязки быстро падает, обеспечивая сшивку высокого порядка для функций и их производных; на этом основан механизм контроля точности; характерное поведение невязки представлено на рис. 2.

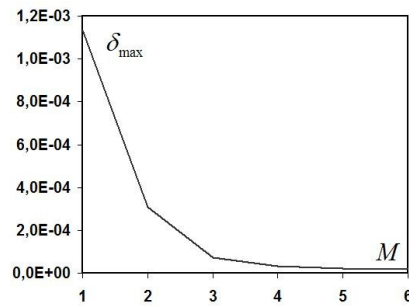


Рис. 2. Механизм контроля точности аппроксимации

Для идентификации и прогнозирования свойств наноматериалов с произвольной формой включений применяется процедура асимптотического осреднения для композитных материалов с периодической структурой, в качестве представительного элемента может быть выбрана ячейка со множеством включениями; при этом требуется большой объем вычислений с высокой степенью точности вспомогательных задач на представительном элементе. Для решения этих задач применяется параллельная версия алгоритмов аналитического метода блоков. Минимизация системы функционалов (5) – (6) приводит к системе линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов в решении, имеющую естественную блочную структуру:

$$T_k \vec{X}_k + \sum_l T_{kl} \vec{X}_l = \vec{H}_k, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (7)$$

где  $T_k$  – матрица Грама используемой системы функций,  $\vec{X}_k$  – неизвестные коэффициенты в разложении вспомогательных функций в блоке  $V_k$ ,  $T_{kl}$  – матрицы, обеспечивающие сшивку локальных решений между блоками,  $\vec{H}_k$  – вектор граничных условий в блоке,  $N$  – общее число блоков, совпадающее с числом минимизируемых функциональных соотношений. Размер каждого блока совпадает с числом неизвестных коэффициентов в локальном представлении решения.

Общий алгоритм решения краевой задачи блочным методом может быть сформулирован следующим образом:

- 1) построение блочной структуры с помощью конечно-элементного разбиения области с включением на элементарные треугольники и четырехугольники с указанием криволинейных частей границы блоков;
- 2) построение узлов и весов квадратуры Гаусса для граничных элементов каждого блока;
- 3) вычисление коллокационного вектора  $\vec{V}(P'_y)$  в узлах квадратуры и необходимых моментных характеристик для формирования функционалов (5) (производных, напряжений и т.д.), сводящихся к вычислению рекуррентных соотношений между компонентами коллокационного вектора;
- 4) заполнение блочной матрицы через вычисление скалярных произведений коллокационного вектора и его моментных характеристик;
- 5) решение системы (7) при помощи развиваемого параллельного итерационного решателя блочной системы линейных уравнений;
- 6) обработка результата: визуализация картины НДС в блоке, вычисление эффективных характеристик.

Следует отметить, что на каждом шаге блочного алгоритма имеется значительный ресурс параллелизма. Блоки обрабатываются независимо, за исключением самого решения блочной системы уравнений.

Основная специфика системы линейных уравнений (7) состоит в следующем:

- 1) аппроксимация строится на относительно небольшом числе элементов;
- 2) качество аппроксимации достигается, прежде всего, за счет увеличения числа базисных функций в блоке.

Распределение вычислительной работы по процессорам осуществляется и на этапе генерации, и на этапе решения систем линейных уравнений на основе анализа графа блочной разреженности матрицы по блочным строкам/столбцам матрицы исходной системы уравнений. В некотором упорядочивании система уравнений (7) является блочно окаймленной:

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & & 0 & C_1 \\ & \ddots & & \vdots \\ 0 & & A_p & C_p \\ B_1 & \dots & B_p & D \end{bmatrix} \quad (8)$$

в соответствии с этой формой и производилось распределение данных по процессорам: строки и столбцы матрицы соответствующие блоку  $A_i$  отдаются процессору с номером  $i$ , а данные блока  $D$  отдаются процессору с номером 0.

Блочная система уравнений решалась блочно масштабированным и блочно переобусловленным алгоритмом GMRES, в котором в качестве переобуславливания использовался блочное неполное LU разложение второго порядка точности.

Неполное блочное вещественное разложение для системы (8) строилось на основе соотношения  $A + E = L * U + L * R + W * U$ , где блочно-треугольные матрицы  $L$  и  $U$  содержат блочные элементы разложения “первого порядка” точности, а блочно-треугольные матрицы  $W$  и  $R$  содержат блочные элементы “второго порядка”; матрица  $E$  – некоторая матрица ошибки. Это разложение строится как несимметричное блочное обобщение алгоритма из работы [9].

Итерации по решению системы уравнений проводятся с использованием переобусловленного варианта алгоритма GMRES [10]. Сам по себе, алгоритм GMRES основан на следующих матричных соотношениях:

$$b = P_1 g_1, \quad (9)$$

$$A * (LU)^{-1} * P_k = P_{k+1} * H_k, \quad (10)$$

где  $H_k$  – верхняя хессенбергова форма с размером  $(k+1) \times k$ ,  $b$  – вектор правой части,  $P_k$  – матрица с ортонормированными столбцами размера  $N \times k$ . Для построения матричных соотношений (9) и (10) требуется на каждой итерации алгоритма: умножение на матрицу  $A$ , решение систем уравнений с треугольными матрицами  $L$  и  $U$ , а также ортогонализация. Новое приближение к решению системы линейных уравнений (9) строится по формуле  $x_k = (LU)^{-1} * P_k * y_k$ , где  $y_k$  есть решение задачи минимизации  $\|H_k y_k - e_1 g_1\| = \min$ .

Работа поддержана грантами РФФИ № 06-01-00051 и РФФИ № 07-01-13525 офи-ц.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Лурье С.А., Белов П.А. Вариационная формулировка математических моделей сред с микроструктурами // Сб. Математическое моделирование систем и процессов, 2006, № 14, стр. 114-131
2. Лурье С.А. Белов П.А. Теория сред с сохраняющимися дислокациями. частные случаи: среды коссера и аэро-кувшинского, пористые среды, среды с "двойникованием".//Современные проблемы механики гетерогенных сред. Ин-т прикл. механики РАН, 2005. Т.1. С. 235-268
3. Lurie S., Belov P., Volkov-Bogorodsky D., Tuchkova N. Nanomechanical modeling of the nanostructures and dispersed composites // Comp. Materials Science. 2003. Vol. 28. P. 529-539
4. Lurie S., Belov P., Tuchkova N. The application of the multiscale models for description of the dispersed composites// Int. Journal "Computational Materials Science" A. 2005. Vol. 36, № 2. P. 145-152
5. Lurie S., Belov P., Volkov-Bogorodsky D., Tuchkova N. Interphase layer theory and application in the mechanics of composite materials // Journal of Materials Science. Advances in Multi-Scale Modelling of Composite Material Systems and Components. 2006. V. 41, № 20. P. 6693-6707
6. Волков-Богородский Д.Б., Евтушенко Ю.Г., Зубов В.И., Лурье С.А.. Численно-аналитический учет масштабных эффектов при расчете деформаций нанокомпозитов с использованием блочного метода мультиполей // Ж. выч. мат. и матем. физ. 2006. Т. 46, № 7. С. 1318-1337
7. Волков-Богородский Д.Б. Разработка блочного аналитико-численного метода решения задач механики и акустики // Сборник трудов школы-семинара “Композиционные материалы”. - М.: ИПРИМ РАН, 2000. - С. 44-56
8. Волков-Богородский Д.Б. Применение аналитических расчетов на основе метода блоков в связанных задачах механики сплошных сред // “Прикладные исследования в механике”. Труды научно-практической конференции “Инженерные системы – 2008”, 7-10 апреля 2008 (принято к печати)
9. Karorin I.E., “High quality preconditioning of a general symmetric positive definite matrix based on its  $U^T U + U^T R + R^T U$  decomposition”. Numer. Linear Algebra Appl. 1998. 5. 483-509

10. Saad Y., Schultz M.H., "GMRES: A generalized minimum residual algorithm for solving non-symmetric linear systems". SIAM J. Sci. Comput. 1986. 7. 856-869