

На правах рукописи



НЕФЕДОВА ОЛЬГА АНАТОЛЬЕВНА

**АНАЛИЗ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ
ПЛОСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ КОНСТРУКЦИЙ
В УСЛОВИЯХ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА**

Специальность 01.02.04 - Механика деформируемого твёрдого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Екатеринбург – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки
Институте машиноведения Уральского отделения Российской академии наук

Научный руководитель: Федотов Владимир Петрович,
доктор технических наук,
старший научный сотрудник

Официальные оппоненты: Емельянов Игорь Георгиевич,
доктор технических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки Институт машиноведения Уральского отделе-
ния Российской академии наук,
главный научный сотрудник

Добычин Иван Александрович,
доктор технических наук, доцент,
Федеральное государственное бюджетное образова-
тельное учреждение высшего профессионального об-
разования «Уральский государственный университет
путей сообщения», профессор

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего профессио-
нального образования «Уральский федеральный уни-
верситет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина»

Защита состоится 19 декабря 2013 г. в 15-00 часов на заседании диссертаци-
онного совета Д 004.023.01 при Федеральном государственном бюджетном учреж-
дении науки Институте машиноведения Уральского отделения Российской академии
наук по адресу: 620049, г. Екатеринбург, ул. Комсомольская, 34.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государст-
венного бюджетного учреждения науки Института машиноведения Уральского от-
деления Российской академии наук.

Автореферат разослан “ ” ноября 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор технических наук, профессор



Коновалов А.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Цели и задачи, возникающие при анализе поведения сложных технических систем, диктуют соответствующие требования к теории и расчетному аппарату. Если для оценки прочности крупных объектов, например, моста, достаточно использовать экспериментальные данные по деформации стандартного образца, а для математических расчетов использовать схему конечных разностей или метод конечных элементов, то для соответствующего анализа конструкций в экстремальных условиях эксплуатации этого уже недостаточно. При воздействии различных физических полей могут происходить фазовые превращения, что приводит к изменению свойств, необходимых для расчетов. Путь экспериментального определения этих изменений зачастую невозможен, поскольку эксперимент требует учета только одного вида воздействия при прочих равных условиях. Если при расчете крупных объектов достаточно приписать материальной точке свойства, полученные для стандартного образца, причем только при механическом воздействии, то при наличии физических воздействий возникает проблема согласования, связанная с различными представительными объемами и характерными временами механических и физических процессов для одного и того же объекта. Среди агрессивных технологических примесей водород занимает особое место. Водород – самый подвижный из всех газов, поэтому в большинстве технологических операций возникают процессы сорбции водорода металлом, которые могут протекать при любых температурных режимах. Водородосодержащая среда, проникая в элементы конструкций, приводит к существенному ухудшению важнейших служебных характеристик металлов. В настоящее время потребление водорода в ряде областей промышленности и техники постоянно растет. Это связано с использованием водорода в качестве высокоэффективного и безопасного топлива. Поэтому разработка методов анализа напряженного состояния, роста и развития трещин в деформируемом материале в условиях диффузии водорода становится одной из основных задач для моделирования процессов производства и эксплуатации металлических изделий в химической и нефтегазовой промышленности.

Степень разработанности темы исследования. Различают несколько форм вредного влияния водорода на процесс разрушения деталей металлических конструкций, обусловленных разными факторами: давлением молекулярного водорода в полостях металла; ослаблением водородом межатомных связей в кристаллической решетке металла; взаимодействием атомов водорода с дислокациями; адсорбционными явлениями; хемосорбцией водорода на внутренних поверхностях микротрещин и др. Различные модели, описывающие влияние водорода на прочность металлов, приведены в теоре-

тических работах А.Е. Андрейкива, А.В. Гапонцева, В.В. Кондратьева, А.А. Трещева, В.С. Харина, Р.В. Херцберга и др., а также в экспериментальных работах R.W. Davidge, H. Gao, P. Oliveira, F.L. Riley и др. Для моделирования процесса накопления поврежденности в металлах, находящихся под нагрузкой в агрессивных средах, используют концепции накопления поврежденности, предложенные А.В. Березиным, В.Л. Колмогоровым, В.В. Новожиловым, Ю.Н. Работновым, M. Chrzanowski, S. Taira, R.A. Oriani, E.O. Orowan и другими авторами. Однако в основе большинства расчетных моделей лежат алгоритмы, разработанные для реализации последовательных вычислений – метод сеток, метод граничных элементов, метод конечных элементов. С развитием вычислительных технологий представляется актуальным развитие методов решения сложных задач, в алгоритмы которых изначально закладывается принцип распараллеливания.

Цель работы. Построение математической модели и алгоритма решения связанной деформационно-диффузионной задачи с возможностью численной реализации на многопроцессорных вычислительных комплексах, создание компьютерной программы для оценки влияния диффузии водорода на напряженное состояние в теле с полостью.

Задачи исследования.

Разработать алгоритм решения задачи упругопластического деформирования, позволяющий выполнять расчеты с высокой скоростью и точностью в широком диапазоне параметров состояния материала.

Разработать алгоритм решения диффузионной задачи, позволяющий выполнять расчеты с высокой скоростью и точностью.

Построить математическую модель связанной деформационно-диффузионной задачи.

Разработать алгоритм и программное обеспечение для решения связанной задачи.

Получить возможные качественные и количественные оценки влияния диффузии водорода на прочность деформируемых металлических изделий.

Научная новизна результатов работы заключается в следующем.

Разработан алгоритм решения модифицированным методом граничных элементов (ММГЭ) задачи упругопластического деформирования, в структуре которого заложен принцип распараллеливания вычислений.

Разработан алгоритм решения двумерной задачи диффузии на основе ММГЭ, в структуре которого заложен принцип распараллеливания вычислений. Для решения задачи построены удовлетворяющие уравнению диффузии непрерывные аналитические функции для аппроксимации параметров задачи на граничном элементе. Получены аналитические формулы вычисления интегралов от произведения аппроксимирующих функций и функций влияния

по произвольно ориентированному прямолинейному граничному элементу для произвольной точки наблюдения.

Построена математическая модель связной деформационно-диффузионной задачи.

Разработан алгоритм решения на основе ММГЭ связной задачи с возможностью численной реализации на многопроцессорных вычислительных комплексах.

Теоретическая и практическая значимость работы.

Предложенные алгоритмы решения задачи упругопластического деформирования, задачи диффузии и связной задачи, допускающие значительное распараллеливание вычислений и существенно сокращающие время решения задач, могут быть использованы для решения краевых задач деформирования и диффузии, а также в качестве основы для написания высокопроизводительных компьютерных программ.

Построенные непрерывные аналитические аппроксимирующие функции для задачи диффузии могут быть использованы для решения задач диффузии и теплопроводности методом граничных элементов (МГЭ), снижая вычислительную погрешность, которая возникает при дифференцировании приближенного решения.

Разработана компьютерная программа, позволяющая выполнять оценку взаимного влияния диффузии и напряженного состояния в теле с полостями. Программа является универсальным средством для исследования водородного охрупчивания в теле с полостями.

Результаты исследования используются в курсе лекций по дисциплине «Механика пластической деформации и разрушения материалов» на кафедре «Обработка металлов давлением» Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н.Ельцина.

Отдельные разделы диссертационной работы выполнялись в рамках работ по планам научно-исследовательских работ Института машиноведения УрО РАН, по госбюджетным темам «Построение математических и компьютерных моделей деформирования и разрушения материалов и конструкций и разработка методов совершенствования процессов изготовления изделий из материалов различной структуры с применением современных вычислительных методов и информационных технологий» (гос. рег. № 01201354600, 2013г.); «Разработка методов оценки и управления ресурсом элементов конструкций машиностроительных систем на основе создания новых фундаментальных моделей и методов механики деформирования, прочности, разрушения, применения компьютерных методов проектирования технологии их изготовления, современного математического аппарата, алгоритмов и программ параллельного действия» (гос. рег. № 01200951982, 2009-2012 гг.); Программам Президиума РАН №14 «Интеллектуальные информационные техноло-

гии, математическое моделирование, системный анализ и автоматизация», №15 «Математическое моделирование нелинейных связанных физико-механических процессов на основе модифицированного метода граничных элементов»; Региональной целевой программы развития вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН, проекты №№ РЦП-12-П11, РЦП-13-П4.

Методология и методы исследования. В работе были использованы теоретические и вычислительные методы исследования. Решение задачи упругопластического деформирования, диффузионной задачи и связанной задач осуществлялось с помощью модифицированного метода граничных элементов. Компьютерная программа была написана на языках программирования с++ и Java, с использованием библиотеки параллельных вычислений MPI, и была реализована на суперкомпьютере «Уран» ИММ УрО РАН. С помощью созданной программы был решен ряд задач, результаты сравнивались с экспериментальными и расчетными данными других авторов.

Положения, выносимые на защиту.

Алгоритм решения двумерной задачи упругопластического деформирования модифицированным методом граничных элементов.

Алгоритм решения двумерной задачи диффузии модифицированным методом граничных элементов.

Непрерывные аналитические аппроксимирующие функции для решения двумерной задачи диффузии.

Математическая модель связанной деформационно-диффузионной задачи.

Алгоритм и программное обеспечение для решения двумерной связанной задачи на основе ММГЭ.

Качественные оценки влияния водорода на прочность металлических деталей на примерах решения задач.

Достоверность результатов подтверждается сопоставлением результатов моделирования с экспериментами, а также с расчетами, проведенными другими авторами.

Апробация результатов работы. Основные положения и результаты диссертационной работы доложены на следующих конференциях: IV Российская научно-техническая конференция «Ресурс и диагностика материалов и конструкций», Екатеринбург, 2009 г.; X Международная конференция «Актуальные проблемы современной науки», Самара, 2009 г.; VI Российская научно-техническая конференция «Механика микронеоднородных материалов и разрушение», Екатеринбург, 2010 г.; VIII Всероссийская научная конференция с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи», Самара, 2011 г.; V Российская научно-техническая конференция «Ресурс и диагностика материалов и конструкций», Екатеринбург, 2011 г.;

VII Российская научно-техническая конференция «Механика микронеоднородных материалов и разрушение», Екатеринбург, 2012 г.; IX Всероссийская научная конференция с международным участием «Математическое моделирование и краевые задачи», Самара, 2013 г.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели работы, указаны ее научная новизна и практическая значимость, сформулированы положения, выносимые на защиту, указаны печатные работы, в которых отражены ее основные результаты.

Первая глава посвящена обзору исследований совместного влияния силовых воздействий и коррозионных сред на прочность деталей металлических конструкций. Представлено несколько механизмов, определяющих водородное охрупчивание деформируемого материала. Приведен обзор методов и существующих подходов к решению связанных задач в механике деформируемого твердого тела.

Вторая глава посвящена разработке алгоритма, наиболее адаптированного к высокому уровню распараллеливания, для решения краевой задачи деформирования при малых упругопластических деформациях. В систему уравнений краевой задачи для некоторой области Ω входят уравнения равновесия, записанные в компонентах тензора напряжений Коши σ_{ij} ,

$$\sigma_{ij,j} = 0; \quad (1)$$

соотношения Коши, записанные для компонент тензора деформации ε_{ij} ,

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}); \quad (2)$$

определяющие соотношения в рамках деформационной теории пластичности, характеризующие свойства материала,

$$\sigma = \frac{\varepsilon}{3k}; \quad (3)$$

$$s_{ij} = \psi e_{ij}; \quad (4)$$

$$\psi = \frac{2I_\sigma}{I_\varepsilon}; \quad (5)$$

$$I_\sigma = \begin{cases} GI_\varepsilon, & I_\sigma \leq \tau_S; \\ \sigma_T + \frac{4(\sigma_B - \sigma_T)}{3\sqrt{\varepsilon_B - \varepsilon_T}} \sqrt{I_\varepsilon - \varepsilon_T} - \frac{(\sigma_B - \sigma_T)}{3(\varepsilon_B - \varepsilon_T)^2} (I_\varepsilon - \varepsilon_T)^2, & \tau_S < I_\sigma < \sigma_B \end{cases} \quad (6)$$

и граничные условия:

$$\begin{aligned} \text{на } \Gamma_u : u &= u^* ; \\ \text{на } \Gamma_f : \sigma_{ij} n_j &= f_i = f_i^* . \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь u_i – компоненты вектора перемещений; σ – среднее давление в точке; ε – относительное изменение объема; k – коэффициент объемного сжатия, $k=(1-2\nu)/E$; ν – коэффициент Пуассона; E – модуль сдвига; s_{ij} – компоненты девиатора напряжений; e_{ij} – компоненты девиатора деформации; I_σ – интенсивность касательных напряжений; I_ε – интенсивность деформации сдвига; G – модуль сдвига, $G=E/2/(1+\nu)$; τ_s – предел текучести материала при чистом сдвиге; $\sigma_T = \tau_s/\sqrt{3}$ – предел текучести материала при растяжении; σ_B – временное сопротивление материала на разрыв; напряжения σ_B и σ_T соответствуют деформациям ε_B и ε_T ; $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_f$ – гладкая граница области Ω ; f_i – компоненты вектора поверхностных напряжений, n_i – компоненты вектора внешней нормали к поверхности; по повторяющемуся индексу производится суммирование; звездочкой отмечены известные функции. Для разделения упругой и пластической областей было использовано условие текучести Мизеса.

В области пластического течения были приняты физические уравнения связи, разработанные В.П. Федотовым:

$$I_\sigma(I_\varepsilon) = \sigma_T + \frac{4(\sigma_B - \sigma_T)}{3\sqrt{\varepsilon_B - \varepsilon_T}} \sqrt{I_\varepsilon - \varepsilon_T} - \frac{(\sigma_B - \sigma_T)}{3(\varepsilon_B - \varepsilon_T)^2} (I_\varepsilon - \varepsilon_T)^2 . \quad (8)$$

Для расчета прочности и прогнозирования разрушения материала в рамках модели (8) достаточно задать две экспериментальные характеристики – предел текучести при растяжении σ_T и временное сопротивление на разрыв σ_B , которые имеют ясный физический смысл и зависят от параметров состояния (температуры, концентрации примеси и т.д.).

Использование физических уравнений связи (8) в краевой задаче упругопластического деформирования (1) – (7) позволило построить алгоритм решения задачи в широком диапазоне физических воздействий. Алгоритм был построен для случая плоского деформированного состояния. Решение осуществлялось по шагам деформации, деформации на шагах суммировались. На каждом расчетном шаге решается линейная задача с применением модифицированного метода граничных элементов, разработанного для решения линейных задач. Выбор ММГЭ был обусловлен тем, что в его структуре изначально заложены возможности, позволяющие распараллелить счет на всех этапах решения задачи и, следовательно, увеличить скорость вычислений с привлечением технологий параллельного программирования.

В результате применения алгоритма на каждом шаге определяются перемещения, по ним вычисляются деформации, по известным деформациям рассчитываются первый инвариант тензора деформации и интенсивность де-

формации сдвига. Первый инвариант тензора напряжений и интенсивность касательных напряжений вычисляются с использованием определяющих соотношений по точным характеристикам деформированного состояния.

В области пластического течения на каждом шаге решается такая же линейная задача в предположении, что в качестве модуля сдвига G принимается касательный модуль \hat{G} к нелинейному участку кривой нагружения (6) в точке, соответствующей началу шага. Выбирая достаточно малый шаг по деформациям, можно получить для рассчитанного значения интенсивности касательных напряжений погрешность, не превышающую разности между экспериментальными данными и моделью. Отметим, что принимая на каждом шаге в качестве параметра касательный модуль, мы в начале шага “возвращаемся” на кривую нагружения.

Разработанный алгоритм дает возможность моделировать поведение упругопластического материала в процессе деформации по известным крайевым условиям задачи и по известным физическим характеристикам: модулю Юнга E , коэффициенту Пуассона ν , пределу текучести при растяжении σ_T и временному сопротивлению на разрыв σ_B .

Разработанный на основе ММГЭ алгоритм был распараллелен на каждом этапе решения. На каждом шаге коэффициенты системы линейных уравнений вычисляются независимо, следовательно, процесс построения системы линейных уравнений полностью распараллеливается. Решение системы осуществляется методом LU-разложения, допускающим распараллеливание. Расчет напряженно-деформированного состояния во внутренних точках области также можно производить независимо, т.е. параллельно. Алгоритм был реализован в виде программы. Программа позволяет решать задачу упругопластического деформирования в рамках постановки (1) – (7) для двумерных областей любой геометрии.

В качестве примера применения разработанного пошагового алгоритма и программы была решена модельная задача упругопластического деформирования в условиях плоского деформированного состояния. На рисунке 1 изображена схема процесса.

Результаты расчетов показаны на рисунках 2, 3. На рисунке 2 приведено сравнение графиков изменения I_σ вдоль оси Ox_2 , построенных с помощью предложенного алгоритма и с использованием ANSYS.

На рисунке 3 показаны результаты расчетов I_σ по ММГЭ при различных значениях параметров σ_T и σ_B , соответствующих различным значениям концентрации водорода. Из рисунка видно, что расчетные интенсивности касательных напряжений заметно различаются. Таким образом, при решении деформационной задачи необходимо учитывать процесс диффузии, а значит решать связную деформационно-диффузионную задачу.

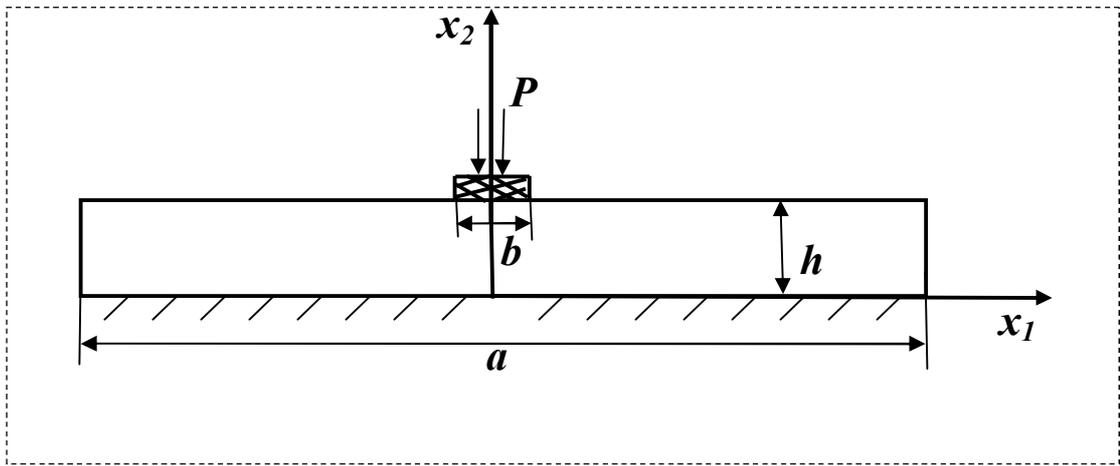
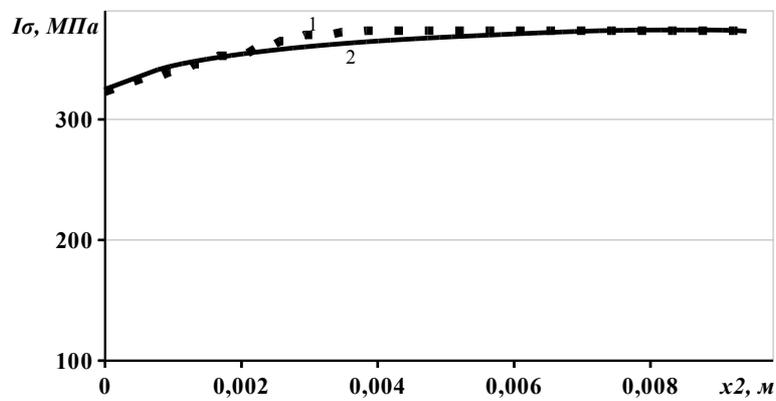
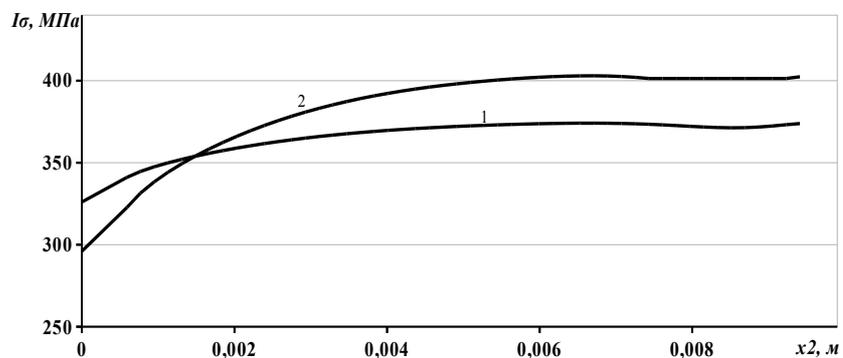


Рисунок 1 – Схема задачи упругопластического деформирования в условиях плоского деформированного состояния



1 – ANSYS; 2 – ММГЭ

Рисунок 2 – Изменение I_σ вдоль оси Ox_2



1 – $\sigma_T=578$ МПа, $\sigma_B=648$ МПа; 2 – $\sigma_T=598$ МПа, $\sigma_B=628$ МПа

Рисунок 3 – Изменение I_σ вдоль оси Ox_2 при различных значениях физических параметров

Третья глава посвящена разработке алгоритма решения двумерной задачи диффузии с заложенной в нем¹ возможностью распараллеливания счета. Выбор метода решения диффузионной задачи вновь был сделан в пользу ММГЭ в силу его адаптированности для проведения параллельных вычислений. Краевая задача диффузии включает в себя уравнение параболического типа

$$\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x_i^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = 0; \quad (9)$$

начальные и граничные условия

$$c(x, t_0) = c_0^*(x); \quad (10)$$

$$\text{на } \Gamma_c : c(x_0, t) = c^*(x_0, t);$$

$$\text{на } \Gamma_q : q(x_0, t) = q^*(x_0, t). \quad (11)$$

Здесь функция $c(x,t)$ – концентрация в точке x в момент времени $t \geq t_0$; t_0 – начальный момент времени; D – коэффициент диффузии; $\Gamma = \Gamma_c \cup \Gamma_q$ – гладкая граница области Ω ; x_0 – граничная точка; $q(x,t)$ – диффузионный поток; $c_0^*(x)$, $c^*(x_0, t)$, $q^*(x_0, t)$ – известные функции.

Решение краевой задачи диффузии (9) – (11) осуществлялось по шагам по времени $[t_{k-1}, t_k]$, $k=1, 2, \dots, K$ в предположении постоянства значений концентрации и диффузионного потока в узлах граничных элементов на каждом временном шаге. На каждом временном шаге решалось граничное интегральное уравнение

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} c(x_0, \tau) = & D \sum_{k=1}^K \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma} c(x, t) F^*(x_0, x, \tau, t) - D \sum_{k=1}^K \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma} q(x, t) G^*(x_0, x, \tau, t) + \\ & + \int_{\Omega} c_0^*(x) G^*(x_0, x, \tau, t_0) d\Omega(x), \end{aligned} \quad (12)$$

где τ – момент наблюдения; $F^*(x_0, x, \tau, t)$ и $G^*(x_0, x, \tau, t)$ – функции влияния, которые в двумерном случае определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} G^*(x_0, x, t_k, t) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi D(\tau - t)}} \exp\left(\frac{-r^2}{4D(\tau - t)}\right); \\ F^*(x_0, x, t_k, t) &= -\frac{\partial G^*}{\partial x} n_x = \frac{|r|}{4D(\tau - t)\sqrt{\pi D(\tau - t)}} \exp\left(\frac{-r^2}{4D(\tau - t)}\right), \end{aligned} \quad (13)$$

где $r^2 = r_i r_i$; $r_i = x_i - x_{0i}$.

В соответствии с методом граничных элементов граница Γ исследуемой двумерной области Ω была разбита на конечное число граничных элементов – отрезков $[a_{j-1}, a_j]$, $j=1, 2, \dots, N+M$, на одной части которых $\{[a_{j-1}, a_j], j=1, 2, \dots, N\}$ были заданы граничные условия для концентрации, а на другой

$\{[a_{j-1}, a_j], j=N+1, N+2, \dots, N+M\}$ – для диффузионного потока. Тогда граничное интегральное уравнение (12) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}c(x_0, \tau) = & D \sum_{k=1}^K \int_{t_{k-1}}^{t_k} \sum_{j=1}^N \int_{a_{j-1}}^{a_j} (c^{(j)*}(x, t)F^*(x_0, x, \tau, t) - q^{(j)}(x, t)G^*(x_0, x, \tau, t)) dx dt + \\ & + D \sum_{k=1}^K \int_{t_{k-1}}^{t_k} \sum_{j=N+1}^{N+M} \int_{a_{j-1}}^{a_j} (c^{(j)}(x, t)F^*(x_0, x, \tau, t) - q^{(j)*}(x, t)G^*(x_0, x, \tau, t)) dx dt + \\ & + \int_{\Omega} c_0^*(x)G^*(x_0, x, \tau, t_0) d\Omega(x). \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь $c^{(j)*}(x, t) = c^*(x, t)$, $q^{(j)}(x, t) = q(x, t)$ при $x \in [a_{j-1}, a_j]$, $j=1, 2, \dots, N$; $c^{(j)}(x, t) = c(x, t)$, $q^{(j)*}(x, t) = q^*(x, t)$ при $x \in [a_{j-1}, a_j]$, $j=N+1, N+2, \dots, N+M$; звездочкой обозначены известные величины.

Обычно в качестве аппроксимирующих функций на граничных элементах в граничном интегральном уравнении (14) при решении задачи методом граничных элементов используют постоянные или линейные функции. При этом во время определения диффузионного потока накапливается вычислительная погрешность, которая возникает от дифференцирования приближенного решения. Чтобы уменьшить эту погрешность, в работе предлагается в качестве аппроксимирующих функций использовать аналитическое решение одномерной задачи диффузии. Поскольку такие аппроксимирующие функции удовлетворяют уравнению диффузии, их использование позволяет сократить количество граничных элементов при решении задачи.

На каждом шаге по времени уравнение (14), записанное для всех узлов граничных элементов, порождает систему линейных уравнений, решение которой определяет значения концентрации и диффузионного потока в узлах границы, не заданные граничными условиями. Коэффициенты системы являются интегралами от произведений аппроксимирующих функций, удовлетворяющих уравнению диффузии, и функций влияния (13). Это различные комбинации произведений функции ошибок $\text{erf}(x_0, \tau, t)$ и функции $\text{exp}(x_0, \tau, t)$. Подход ММГЭ предполагает переход от интегралов по произвольному граничному элементу к интегралам по удобному “базовому” элементу. С использованием такого преобразования были получены аналитические формулы для вычисления всех необходимых при решении двумерной задачи диффузии интегралов.

После численного решения системы уравнений и определения всех значений граничных функций концентрации и диффузионного потока осуществляется расчет концентрации в произвольной внутренней точке ξ области Ω на текущем шаге:

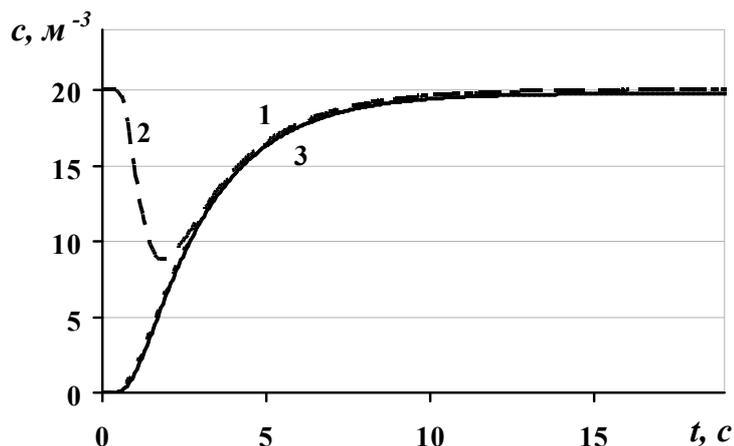
$$\begin{aligned}
c(\xi, \tau) = & D \sum_{k=1}^K \int_{t_{k-1}}^{t_k} \sum_{j=1}^N \int_{a_{j-1}}^{a_j} (c^{(j)*}(x, t) F^*(\xi, x, \tau, t) - q^{(j)}(x, t) G^*(\xi, x, \tau, t)) dx dt + \\
& + D \sum_{k=1}^K \int_{t_{k-1}}^{t_k} \sum_{j=N+1}^{N+M} \int_{a_{j-1}}^{a_j} (c^{(j)}(x, t) F^*(\xi, x, \tau, t) - q^{(j)*}(x, t) G^*(\xi, x, \tau, t)) dx dt + \\
& + \int_{\Omega} c_0^*(x) G^*(\xi, x, \tau, t_0) d\Omega(x). \tag{15}
\end{aligned}$$

Интегралы в правой части уравнения (15) также вычисляются по полученным аналитическим формулам.

На каждом шаге по времени вычисление интегралов для различных граничных точек при формировании системы линейных алгебраических уравнений может выполняться независимо. Вычисление значения концентрации во внутренних точках также можно выполнять независимо друг от друга. Это позволило распараллелить алгоритм на всех этапах решения задачи. Следовательно, как и для деформационной задачи, для задачи диффузии был построен алгоритм решения на основе ММГЭ, использующий аналитическое интегрирование и распараллеливание счета. Алгоритм был реализован в виде программы.

В качестве примера применения предложенного алгоритма и программы была рассмотрена модельная задача диффузии газа в тонкой квадратной пластине. На границе пластины была задана постоянная концентрация газа $c=20 \text{ м}^{-3}$, в начальный момент времени концентрация во всей пластине принималась равной нулю. На рисунке 4 приведено сравнение результатов решения для концентрации, полученных разными методами: с помощью предложенного алгоритма (кривая 1), по методу рядов Фурье (кривая 2) и с помощью метода конечных элементов (МКЭ) (кривая 3). Все расчеты выполнялись для точки, расположенной в центре пластины.

Вблизи начального момента времени результаты расчетов ММГЭ и МКЭ отклоняются от аналитического решения. Это объясняется тем, что принятый в качестве аналитического решения ряд Фурье (алгебраическая сумма косинусоидальных функций) дает на этом интервале времени заведомо неточное приближение, что обусловлено разрывом между начальными и граничными условиями задачи. К тому же в данной постановке задачи поведение решения на начальном интервале времени является несущественным, поскольку основной интерес представляет развитый процесс диффузии. Начиная с некоторого момента времени, все три решения асимптотически приближаются к значению концентрации, заданному на границе.



1 – ММГЭ; 2 – метод рядов Фурье; 3 – МКЭ

Рисунок 4 – Сравнения результатов решения для концентрации, полученных разными методами

Для рассмотренного примера было проведено сравнение времени счета по предложенному алгоритму при различных количествах задействованных процессоров и с помощью МКЭ. В таблице 1 представлены результаты при различных количествах шагов по времени. Граница пластины была разбита на 400 элементов, в методе конечных элементов область разбивалась на 200 элементов.

Таблица 1 – Время расчета модельной задачи с помощью метода конечных элементов и с помощью модифицированного метода граничных элементов при различных количествах шагов по времени

Количество шагов по времени	Время расчета МКЭ, с.	Время расчета ММГЭ, с.		
		4 процессора	80 процессоров	400 процессоров
20	155	220	23	3
80	720	1065	95	10
100	840	1264	129	15
200	5620	6260	564	60

В таблице 2 представлено время расчета задачи с помощью ММГЭ при различных количествах задействованных процессоров. Приведены результаты при различных количествах граничных элементов.

Таблица 2 – Время расчета модельной задачи ММГЭ при различных количествах граничных элементов

Количество граничных элементов	Время расчета ММГЭ, с.		
	4 процессора	80 процессов	400 процессоров
80	60	3	3
400	1500	75	15
800	4500	225	45

Все результаты были получены на многопроцессорном вычислительном комплексе «Уран» ИММ УрО РАН. Как видно из представленных таблиц, при увеличении числа задействованных процессоров время расчета уменьшается на 1-2 порядка.

Четвертая глава посвящена построению математической модели и разработке алгоритма решения связанной задачи деформирования двумерной области произвольной геометрии, содержащей полости – поры и трещины, в условиях протекающего одновременно процесса диффузии.

В работе рассматривается модель водородной хрупкости, обусловленная высоким давлением молекулярного водорода в полостях. Реальные металлические изделия никогда не обладают однородной структурой. Они содержат широкий набор полостей – пор и трещин, распределенных случайным образом. Атомарный водород, диффундируя в металле, проникает в полости, где ассоциируется в не диффундирующий молекулярный водород. В результате возникает избыточное внутреннее давление водорода внутри полостей, которое приводит к водородному охрупчиванию.

Система уравнений связанной диффузионно-деформационной задачи включает в себя уравнение диффузии в поле высоких механических напряжений:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c - \frac{DV_H}{RT} \nabla c \cdot \nabla \sigma \quad (16)$$

с заданными начальными и граничными условиями:

$$c(x, t_0) = 0; \quad (17)$$

$$\text{на } \Gamma_{out} : c(x, t) = c^*(x, t);$$

$$\text{на } \Gamma_{in} : c(x, t) = 0; \quad (18)$$

уравнения механики деформируемого твердого тела:

$$\sigma_{ij,j} = 0; \quad (19)$$

$$\varepsilon_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2; \quad (20)$$

$$\sigma_{ij} = 2G \varepsilon_{ij} + \frac{2G\nu}{1-2\nu} \delta_{ij} \varepsilon_{mm} \quad (21)$$

и граничные условия:

$$\begin{aligned} \text{на } \Gamma_{in}: f(x, c) &= P_1^*(x, c); \\ \text{на } \Gamma_{out}: f(x) &= P_2^*(x). \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь Δ – оператор Лапласа; V_H – парциальный молярный объем водорода в металле; R – газовая постоянная; T – абсолютная температура; ∇ – градиент функции; $\nabla \sigma \cdot \nabla c$ – скалярное произведение векторов $\Gamma = \Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}$; Γ_{in} – внутренняя граница области Ω (граница полости); Γ_{out} – внешняя граница области Ω . P_1^* – внутреннее давление в дефектах; P_2^* – действующее на внешней границе области внешнее механическое напряжение. Звездочкой, как и прежде, отмечены заданные функции. Связность задачи (16) – (22) состоит в наличии градиента напряжений в правой части уравнения диффузии (16), а также обусловленного диффузией давления в первом из граничных условий (22) механической задачи.

Решение задачи (16) – (22) осуществляется по шагам по времени, на каждом шаге решение включает в себя четыре этапа. На первом этапе выполняется решение деформационной задачи в рамках линейной теории упругости, описываемой уравнениями (19) – (22). Решение осуществляется с помощью ММГЭ, в соответствии с алгоритмом уже использовавшимся в главе 2 на каждом шаге пошагового алгоритма. На первом шаге по времени полагается, что $P_1^* = 0$, на каждом последующем временном шаге P_1^* определяется из решения диффузионной задачи на предыдущем шаге. В результате решения задачи (19) – (22) внутри области Ω определяются значения перемещений, напряжений, а также пространственных производных от напряжений, необходимые для вычисления $\nabla \sigma$.

На втором этапе рассматривается краевая задача диффузии для двумерной области, подверженной внешнему механическому нагружению. Неоднородное уравнение диффузии для этого случая имеет вид (16), краевые условия имеют вид (17), (18). Решение данной задачи также осуществляется с помощью ММГЭ по алгоритму, построенному в главе 3. Граничное интегральное уравнение, соответствующее задаче (16) – (18), имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} c(x_0, t_K) &= D \int_{t_0}^{\tau} \int_{\Gamma} \{c(x, t) F^*(x_0, x, \tau, t) - q(x, t) G^*(x_0, x, \tau, t)\} d\Gamma(x) dt + \\ &+ \int_{t_0}^{\tau} \int_{\Omega} \psi(x, t) G^*(x_0, x, \tau, t) d\Omega(x) dt. \end{aligned}$$

Функция $\psi(x, t) = \frac{DV_H}{RT} \nabla \sigma \cdot \nabla c$ создает в уравнении диффузии неоднородность. Поскольку при удалении от дефекта градиент напряжения быстро убывает, функцию $\psi(x, t)$ можно учитывать только в “зонах влияния” – окре-

стностях дефектов, за границами которых градиент напряжений пренебрежимо мал. Для вычисления в произвольный момент времени интегралов по граничным элементам, необходимых для решения граничного интегрального уравнения и для вычисления концентрации и ее пространственных производных внутри области, используются полученные в третьей главе аналитические формулы.

На третьем этапе вычисляется давление молекулярного водорода в каждой из полостей в предположении, что молекулярный водород удовлетворяет уравнению состояния идеального газа

$$P_1 = \frac{m}{MV_M} RT,$$

где m – масса водорода в полости; M – молярная масса газа; V_M – молярный объем газа.

Для определения массы водорода в полости нужно вычислить количество водорода, поступающего в полость за время шага $\Delta t = t_k - t_{k-1}$, равное его полному потоку через границу полости

$$m = SD \int_{t_{k-1}}^{t_k} q(x, t) dt.$$

Здесь S – площадь поверхности полости.

На четвертом этапе проверяется условие разрушения границы каждой полости. Для этого производится сравнение внутреннего давления водорода в полости с критическим давлением на предмет выполнения неравенства:

$$P_{кр} > 3\sigma_T.$$

Здесь $P_{кр}$ – критическое давление, при котором наступает разрушение материала. Если критическое давление не достигнуто, расчеты продолжаются на следующем временном шаге с учетом перерасчета граничных условий деформационной задачи.

Поскольку каждый этап решения задачи допускает распараллеливание, как отмечалось в главах 2 и 3, алгоритм связной задачи также существенно распараллелен. Построенный алгоритм был реализован в виде программы. В качестве примера применения алгоритма и программы была рассмотрена модельная задача растяжения в водородосодержащей среде прямоугольной области с круговой полостью (порой) в условиях плоского напряженного состояния. Схема задачи показана на рисунке 5.

На рисунке 6 показано изменение диффузионного потока на поверхности поры во времени с учетом и без учета внешних растягивающих напряжений. На рисунке 7 показано изменение напряжения в поре под действием внешних растягивающих напряжений для двух случаев. В первом случае механическая задача решается без учета давления молекулярного водорода в поре, во втором – с учетом. Расчеты показали, что процессы диффузии водорода и деформирования оказывают взаимное влияние друг на друга. Таким

образом, для анализа прочности плоских деталей металлических конструкций с полостями необходимо учитывать как внутреннее напряжение в полосках вследствие процесса диффузии, так и внешнее механическое напряжение. Представленный в работе алгоритм и программа учитывают оба эти фактора.

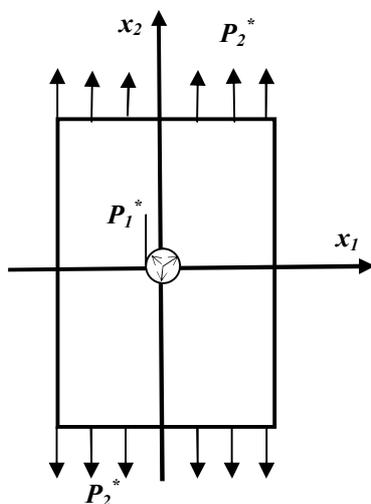
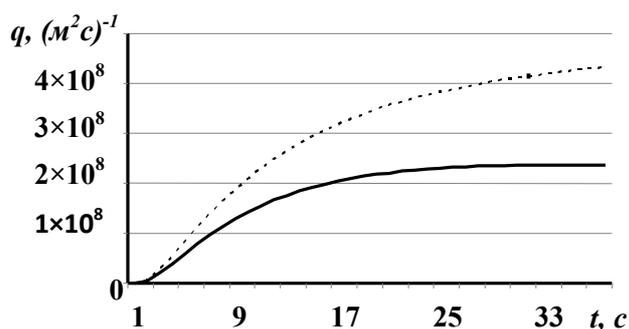
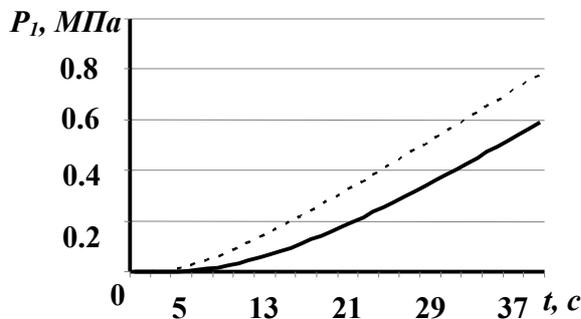


Рисунок 5 – Схема задачи растяжения пластины в водородосодержащей среде



— — нет внешнего напряжения;
 - - - - приложено растягивающее напряжение

Рисунок 6 – Изменение потока на поверхности поры во времени



— — без учета внутреннего давления в механической задаче;
 - - - - с учетом внутреннего давления в механической задаче

Рисунок 7 – Изменение давления в поре во времени

Для рассмотренного примера был проведен анализ времени решения связной задачи ММГЭ при различных количествах задействованных процессоров (таблица 3). Граница пластины была разбита на 580 элементов, рассматриваемый интервал времени был разбит на 120 шагов.

Таблица 3 – Время расчета связной задачи с помощью ММГЭ

58 процессоров, мин.	145 процессоров, мин.	290 процессоров, мин.
260	40	25

Из представленной таблицы видно, что увеличение количества процессоров в два раза ведет к пропорциональному уменьшению времени счета, что позволяет говорить об эффективности использования вычислительных ресурсов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработан пошаговый алгоритм решения двумерной задачи упругопластического деформирования на основе ММГЭ, адаптированный к распараллеливанию вычислений.

2. Разработан алгоритм решения двумерной диффузионной задачи с помощью ММГЭ, в основу которого заложена возможность распараллеливания счета.

3. Для двумерной задачи диффузии предложена аппроксимация неизвестных функций на граничных элементах, в основу которой положено решение одномерной задачи диффузии.

4. Проведено сравнение решений модельной задачи о распределении водорода в квадратной пластине, полученных при помощи ММГЭ, МКЭ и по методу рядов Фурье.

5. Построен алгоритм решения двумерной связной деформационно-диффузионной задачи на основе ММГЭ.

6. На базе алгоритмов созданы программы с графическим редактором ввода данных и расчетными модулями для решения задачи упругопластического деформирования, задачи диффузии и связной задачи.

7. На примере решения задачи деформирования в водородосодержащей среде выполнена оценка взаимного влияния процесса диффузии и напряженного состояния в теле с дефектом.

8. Для решенных задач проведен анализ времени счета в зависимости от количества задействованных процессоров, показавший эффективность применения разработанных параллельных алгоритмов.

Алгоритмы и программа могут быть использованы студентами, аспирантами и научными сотрудниками для расчетов, а также для сравнения с расчетами другими методами. Перспективным направлением в продолжении исследований является разработка алгоритмов и программы для решения связанной задачи с учетом нелинейности деформационного процесса, а также развитие алгоритмов на случай трехмерных задач.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в научных изданиях, входящих в список ВАК РФ:

1. Федотов, В.П. Применение модифицированного метода граничных элементов для решения параболических задач / В.П. Федотов, **О.А.Нефедова** // Вестник СамГТУ. Сер. Физ.-мат. науки. – 2011. – №4 (25). – С. 93–101.

2. Федотов, В.П. Параллельные алгоритмы для анализа прочности наводороженных конструкций / В.П. Федотов, Л.Ф. Спевак, **О.А.Нефедова** // Программные продукты и системы. – 2012. – №3. – С. 235-239.

3. Федотов, В.П. Моделирование процессов упругопластического деформирования модифицированным методом граничных элементов / В.П. Федотов, Л.Ф. Спевак, **О.А.Нефедова** // Программные продукты и системы. – 2013. – №4. – С. 253–257.

Основные публикации в научных изданиях, не входящих в список ВАК РФ:

1. Федотов, В.П. Нахождение аналитического решения параболических задач с использованием фундаментального решения для аппроксимации неизвестных граничных условий / В.П.Федотов, **О.А.Нефедова** // Ресурс и диагностика материалов и конструкций: тезисы докладов IV Российской научно-технической конференции. – Екатеринбург, 2009. – С. 181.

2. **Нефедова, О.А.** Применение модифицированного метода граничных элементов для решения задач теплопроводности / О.А.Нефедова, В.П.Федотов // Актуальные проблемы современной науки: тр. 5-го Международ. форума молодых ученых (10-й Международ. конф.). Естественные науки. Ч. 1 – 3: Математика. Мат. моделирование. Механика. – Самара, 2009. – С. 143–147.

3. Федотов, В.П. Влияние диффузии на прочность элементов конструкций с дефектами / В.П.Федотов, **О.А.Нефедова** // Механика микронеоднородных материалов и разрушение: тезисы докладов VI Российской научно-технической конференции. – Екатеринбург, 2010. – С. 117.

4. Федотов, В.П. Оценка влияния диффузии водорода на развитие дефектов в металле / В.П. Федотов, Л.Ф. Спевак, **О.А.Нефедова** // Математическое моделирование и краевые задачи”, Ч.1: “Математические модели механики, прочности и надежности элементов конструкций: труды восьмой Всероссийской научной конференции с международным участием. – Самара, 2011. – С. 244-247

5. Федотов, В.П. Решение связанной диффузионно-деформационной задачи для металлического образца с порой и трещиной / В.П. Федотов, Л.Ф. Спевак, **О.А.Нефедова** // Ресурс и диагностика материалов и конструкций: тезисы докладов V Российской научно-технической конференции. – Екатеринбург, 2011. – С. 143.

6. Федотов, В.П. Решение задачи диффузии с нелинейным источником методом граничных элементов / В.П. Федотов, Л.Ф. Спевак, **О.А.Нефедова** // Механика микронеоднородных материалов и разрушение: тезисы докладов VII Российской научно-технической конференции. – Екатеринбург, 2012. – С. 150.

7. Федотов, В.П. Применение итерационного метода для моделирования диссипативных процессов в задачах деформирования / В.П. Федотов, **О.А.Нефедова** // Математическое моделирование и краевые задачи: труды девятой Всероссийской научной конференции с международным участием. – Самара, 2013.