



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 13 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Гасилов В.А., Круковский А.Ю.,
Повещенко Ю.А., Цыгвинцев И.П.

Однородные разностные
схемы для решения
сопряжённых задач
гидродинамики и упругости

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Однородные разностные схемы для решения сопряжённых задач гидродинамики и упругости / В.А.Гасилов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 13. 17 с. doi:[10.20948/prepr-2018-13](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-13)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-13>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

В.А. Гасилов, А.Ю. Круковский
Ю.А. Повещенко, И.П. Цыгвинцев

**Однородные разностные схемы
для решения сопряжённых задач
гидродинамики и упругости**

Москва — 2018

В.А. Гасилов, А.Ю. Круковский, Ю.А. Повещенко, И.П. Цыгвинцев

Однородные разностные схемы для решения сопряжённых задач гидродинамики и упругости

В препринте рассмотрены различные конечно-разностные аппроксимации упругих сил в уравнениях гидродинамики идеальной жидкости. Построены полностью консервативные конечно-разностные схемы для уравнений динамики как с выделением диагональной компоненты тензора деформации в качестве гидродинамического давления, так и без него. Обсуждается вопрос влияния учёта нелинейных членов в тензоре деформации на инвариантность результатов относительно твердотельного вращения.

Ключевые слова: конечно-разностная схема, тензор деформации, метод опорных операторов

V.A. Gasilov, A.Yu. Krukovskiy, Yu.A. Poveschenko, I.P. Tsygvintsev

Homogeneous difference schemes for solving conjugate problems of hydrodynamics and elasticity

In the preprint we consider various finite-difference approximations of elastic forces in the equations of an ideal fluid hydrodynamics. We construct completely conservative finite-difference schemes for full strain tensor and for split hydrodynamic pressure and deviator. The question of the nonlinear terms in the strain tensor influence on the invariance of results under rotation is discussed.

Key words: finite-difference scheme, strain tensor, support-operator method

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №14-11-00699.

Оглавление

Введение	3
Физические приближения	3
Дискретизация и конечно-разностная схема	6
Аппроксимация упругих сил.....	7
Тестирование методики	11
Литература	17

Введение

Отправной точкой для выполнения настоящей работы является идея построения численной методики для сквозного расчёта совокупности процессов, возникающих при воздействии на вещество, находящееся первоначально в конденсированном состоянии, высокоинтенсивного потока энергии, переносимой излучением. Такого рода методики востребованы в области физики высоких плотностей энергии. Например, взаимодействие лазерного излучения с материалом твердой мишени может протекать в различных режимах, в зависимости от интенсивности воздействия и общей поглощённой энергии. Если интенсивность лазерного импульса достаточно велика, чтобы ионизовать испарённое вещество, над поверхностью мишени возникает слой плазмы — “корона”, или “подушка”, в которой поглощается основная доля лазерной мощности. Перенос энергии в плотное вещество мишени происходит за счёт процессов электронной и лучистой теплопроводности, а также из-за импульса отдачи аблированной плазмы. По веществу распространяется ударная волна, амплитуда которой уменьшается по мере продвижения вглубь мишени. На некотором расстоянии от поверхности температура и давление за фронтом ударной волны оказываются недостаточными, чтобы осуществить фазовый переход, и вещество остаётся в твёрдом состоянии. В этом случае для корректного описания динамики мишени необходим учёт упругих сил и сдвиговых напряжений.

В данной работе мы рассматриваем несколько различных реализаций основанной на методе опорных операторов дискретной модели упругих сил [1] для двумерного плоского случая.

Физические приближения

Движение вещества определяется уравнением неразрывности и уравнениями Эйлера. В интегральной форме в Лагранжевых переменных $\mathbf{r}_s = (x_s, y_s)$ они записываются следующим образом [2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_O \rho dV &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \int_O \rho \mathbf{v}^a dV &= \int_{\partial O} \sigma^{ab} d\mathbf{S}^b = - \int_{\partial O} P d\mathbf{S}^a + \int_{\partial O} \tilde{\sigma}^{ab} d\mathbf{S}^b. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь t — время, ρ — плотность вещества, $\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = (u, w)$ — вектор скорости, $\mathbf{r} = (x, y)$ — декартовы координаты, σ — тензор напряжений, $P = -\frac{1}{3} \text{Tr}(\sigma)$ — гидродинамическое давление, $\tilde{\sigma} = \sigma - \frac{1}{3} \text{Tr}(\sigma) \delta$ — сдвиговая компонента тензора напряжений, δ — метрический тензор, dV и $d\mathbf{S}$ — элемент произвольного жидкого объёма O и внешняя нормаль к его поверхности ∂O .

Символом $\text{Tr}(\)$ мы обозначаем след тензора, индексом T^T — транспонирование, по повторяющемуся индексу ведётся суммирование.

Приведение тензора напряжения к виду $\sigma = \tilde{\sigma} - P\delta$ является необходимым шагом для построения однородной разностной схемы, работающей как в твёрдом веществе, где вклады от диагонального и недиагонального членов (отвечающих за объёмные и сдвиговые деформации соответственно) сравнимы, так и в плазме, где сдвиговые напряжения отсутствуют, но для корректного описания зависимости давления от плотности необходимо использование сложных моделей, например, [3]. В настоящей работе мы рассмотрим реализацию моделей как с выделением диагонального члена, так и без его выделения.

Для замыкания системы уравнений (1) определим тензор деформации σ как функцию вектора смещения $\mathbf{U} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_s$ и параметров вещества с помощью закона Гука [4]:

$$\begin{aligned}\sigma &= 2\mu T + \lambda \text{Tr}(T)\delta, \\ \tilde{\sigma} &= 2\mu T - \frac{2}{3}\mu \text{Tr}(T)\delta, \\ P &= -\frac{1}{3}\text{Tr}(\sigma) = -K \text{Tr}(T), \\ T^{ab} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U^b}{\partial \mathbf{r}_s^a} + \frac{\partial U^a}{\partial \mathbf{r}_s^b} + \frac{\partial U^c}{\partial \mathbf{r}_s^a} \cdot \frac{\partial U^c}{\partial \mathbf{r}_s^b}\right).\end{aligned}\tag{2}$$

Здесь T — тензор деформации Грина, записанный в лагранжевых переменных, μ — модуль сдвига, λ — первый параметр Ламе, связанный с модулем всестороннего сжатия K соотношением $K = \lambda + 2\mu/3$.

Поскольку в рамках линейного приближения $\text{Tr}(T) \approx \rho_s/\rho - 1$, где ρ_s — плотность недеформированного тела, давление в твёрдом теле имеет вид:

$$P \approx -K \frac{\rho_s - \rho}{\rho} = K \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho}\right).$$

Закон Гука (2) применим в области относительно небольших деформаций ($|T^{ab}| \ll 1$, что приводит к $|1 - \rho_s/\rho| \ll 1$). Однако пренебрежение квадратичными членами в тензоре деформации требует более сильного ограничения $\left|\frac{\partial U^a}{\partial \mathbf{r}_s^b}\right| \ll 1$, которое выполняется только в отсутствие вращения и только для тел, размеры которых во всех направлениях сравнимы [4].

Продемонстрируем необходимость учёта квадратичных членов на примере твердотельного поворота $\mathbf{r} = Q\mathbf{r}_s$, где Q — ортогональная матрица. В этом случае $\mathbf{U} = (Q - \delta)\mathbf{r}_s$ и тензор деформации в линейном приближении равен

$$T = \frac{1}{2}(Q - \delta + Q^T - \delta^T) = \begin{pmatrix} \cos \phi - 1 & 0 \\ 0 & \cos \phi - 1 \end{pmatrix} \neq 0.$$

Это приводит к появлению фиктивных сил, имеющих второй порядок малости по углу поворота ϕ . С учётом квадратичных членов фиктивных сил не возникает:

$$T = \frac{1}{2}(Q - \delta + Q^T - \delta^T + (Q^T - \delta^T)(Q - \delta)) = \frac{1}{2}(Q^T Q - \delta) = 0.$$

Таким образом, при использовании линейного приближения для тензора смещений необходимо либо предполагать малость поворота данного элемента объёма твёрдого тела, либо выделять вращательную компоненту в явном виде на основе теоремы о полярном разложении [5].

Пусть координаты в данном элементе объёма связаны с координатами в недеформированном теле соотношением $\mathbf{r} = \mathbf{A} + M\mathbf{r}_s$. Вектор \mathbf{A} отвечает за параллельный перенос, а матрица M — за деформацию и поворот. Согласно теореме о полярном разложении, матрица M однозначно представима в виде $M = RQ$, где Q — ортогональная матрица поворота, а R — положительно определённая симметричная матрица. В этом случае тензор

$$T = R - \delta \quad (3)$$

определен в эйлеровых координатах \mathbf{r} и не зависит от угла поворота. С учётом квадратичных членов

$$T = \frac{1}{2}(R^T R - \delta) = \frac{1}{2}(RR^T - \delta) = \frac{1}{2}(RQQ^T R^T - \delta) = \frac{1}{2}(MM^T - \delta). \quad (3')$$

Последнее представление удобно тем, что не требует вычисления матрицы R . В двумерном случае существуют явные формулы для осуществления процедуры полярного разложения [5], но в трёхмерном случае приходится пользоваться итерационными схемами, что не только требует дополнительных затрат вычислительного времени, но и приводит к практической невозможности линеаризации уравнений. Отметим, что (2) определяет тензор T в повернутой относительно \mathbf{r} системе координат $\tilde{\mathbf{r}} = Q^{-1}\mathbf{r}$:

$$T = \frac{1}{2}(M^T M - \delta) = Q^{-1} \left[\frac{1}{2}(MM^T - \delta) \right] Q. \quad (3'')$$

Запишет теорему Остроградского-Гаусса для вектора $\sigma^{ab} \delta \mathbf{U}^a$:

$$\int_0 \delta \mathbf{U}^a \frac{\partial \sigma^{ab}}{\partial \mathbf{r}^b} dV + \int_0 \frac{\partial \delta \mathbf{U}^a}{\partial \mathbf{r}^b} \sigma^{ab} dV = \int_{\partial 0} \delta \mathbf{U}^a \sigma^{ab} d\mathbf{S}^b.$$

Первый член равен изменению кинетической энергии жидкого объёма O при изменении его координат на $\delta\mathbf{U}$, второй — изменению внутренней энергии; справа стоит работа внешних сил на границе ∂O . В области применимости закона Гука вариация внутренней энергии равна

$$\begin{aligned}\delta E_{def} &= \int_0 \frac{\partial \delta \mathbf{U}^a}{\partial \mathbf{r}^b} \sigma^{ab} dV = \int_0 \frac{\partial \mathbf{r}_s^c}{\partial \mathbf{r}^b} \frac{\partial \delta \mathbf{U}^a}{\partial \mathbf{r}_s^c} \sigma^{ab} dV \approx \int_0 \frac{\partial \mathbf{r}^b}{\partial \mathbf{r}_s^c} \frac{\partial \delta \mathbf{U}^a}{\partial \mathbf{r}_s^c} \sigma^{ab} dV_s = \\ &= \int_0 \delta \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathbf{r}^b}{\partial \mathbf{r}_s^c} \frac{\partial \mathbf{r}^a}{\partial \mathbf{r}_s^c} - \delta^{ab} \right) \right] \sigma^{ab} dV_s = \int_0 \sigma^{ab} \delta T^{ab} dV_s, \\ E_{def} &= \frac{1}{2} \int_0 \sigma^{ab} T^{ab} dV_s.\end{aligned}$$

Дискретизация и конечно-разностная схема

Мы рассматриваем класс лагранжевых схем второго порядка точности по шагу пространственной сетки с аппроксимацией скоростей \mathbf{v} , координат \mathbf{r} и сил \mathbf{F} в узлах, а параметров вещества (плотности ρ , давления P , коэффициентов Ламе λ и μ) в ячейках разностной сетки [2]. Массы сеточных элементов M определяются как для ячеек, так и для узлов (в последнем случае выделяются индексом M^*).

Далее для записи сеточных величин по возможности используется безындexсная нотация: $f = f(t_n, \mathbf{r}_i(t_n))$, $\hat{f} = f(t_{n+1}, \mathbf{r}_i(t_{n+1}))$, $f^{(\alpha)} = \alpha \hat{f} + (1-\alpha)f$, $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Здесь индекс n указывает на временной слой, индекс i — на узел пространственной сетки.

В этих обозначениях разностная схема, аппроксимирующая систему (1), имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}}{\Delta t} &= \mathbf{v}^{(\alpha)}, \\ M^* \frac{\hat{\mathbf{v}} - \mathbf{v}}{\Delta t} &= \mathbf{F}^{(\beta)}.\end{aligned}\tag{4}$$

Параметры (α, β) характеризуют явность разностной схемы. В случае $\alpha \cdot \beta = 0$ уравнения (4) разделяются, и расчёт можно проводить сквозным образом. Однако для гидродинамической схемы с аппроксимациями [6] в плоском случае предпочтительной является схема (0.5, 0.5), так как для неё работа сил давления в ячейке в точности соответствует термодинамическому соотношению PdV . Таким образом, при построении однородной разностной схемы необходимо рассматривать и неявные по времени аппроксимации. Схемы с выделением диагональной компоненты далее будем обозначать $(\alpha, \beta)^*$.

Необходимым и достаточным условием консервативности схемы (4) при $\Delta t \rightarrow 0$ является следующее соотношение между силой и потенциальной

энергией: $\mathbf{F} = -\frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}}$. Найдём изменение полной энергии на шаге разностной схемы (4):

$$\begin{aligned}\Delta E &= \hat{E}_{kin} - E_{kin} + \hat{E}_{def} - E_{def} = \frac{1}{2} \sum_i (\hat{M}_i^* \hat{\mathbf{v}}_i^2 - M_i^* \mathbf{v}_i^2) + \hat{E}_{def} - E_{def} = \\ &= \sum_i M_i^* (\hat{\mathbf{v}}_i - \mathbf{v}_i) \mathbf{v}_i^{(0.5)} + \hat{E}_{def} - E_{def} = \Delta t \sum_i \mathbf{F}_i^{(\beta)} \mathbf{v}_i^{(0.5)} + \hat{E}_{def} - E_{def}.\end{aligned}$$

Разложим \hat{E}_{def} и $\mathbf{F}_i^{(\beta)}$ в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned}\hat{E}_{def} &= E_{def} + \sum_i \frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} (\hat{\mathbf{r}}_i^a - \mathbf{r}_i^a) + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a \partial \mathbf{r}_j^b} (\hat{\mathbf{r}}_i^a - \mathbf{r}_i^a) (\hat{\mathbf{r}}_j^b - \mathbf{r}_j^b) + O(\Delta t^3) = \\ &= E_{def} + \Delta t \sum_i \frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} (\mathbf{v}_i^a)^{(\alpha)} + \frac{\Delta t^2}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a \partial \mathbf{r}_j^b} (\mathbf{v}_i^a)^{(\alpha)} (\mathbf{v}_j^b)^{(\alpha)} + O(\Delta t^3). \\ (\mathbf{F}_i^a)^{(\beta)} &= -(1-\beta) \frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} - \beta \frac{\partial \hat{E}_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} = -\frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} - \beta \sum_j \frac{\partial^2 E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a \partial \mathbf{r}_j^b} (\hat{\mathbf{r}}_j^b - \mathbf{r}_j^b) + O(\Delta t^2) = \\ &= -\frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} - \Delta t \beta \sum_j \frac{\partial^2 E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a \partial \mathbf{r}_j^b} (\mathbf{v}_j^b)^{(\alpha)} + O(\Delta t^2).\end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned}\Delta E &= \Delta t \sum_i (\mathbf{v}_i^a)^{(0.5)} \left[-\frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} - \Delta t \beta \sum_j \frac{\partial^2 E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a \partial \mathbf{r}_j^b} (\mathbf{v}_j^b)^{(\alpha)} + O(\Delta t^2) \right] + \\ &+ \Delta t \sum_i \frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} (\mathbf{v}_i^a)^{(\alpha)} + \frac{\Delta t^2}{2!} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a \partial \mathbf{r}_j^b} (\mathbf{v}_i^a)^{(\alpha)} (\mathbf{v}_j^b)^{(\alpha)} + O(\Delta t^3) = \\ &= \Delta t \sum_i \frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a} \left[(\mathbf{v}_i^a)^{(\alpha)} - (\mathbf{v}_i^a)^{(0.5)} \right] + \Delta t^2 \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_{def}}{\partial \mathbf{r}_i^a \partial \mathbf{r}_j^b} \left[\frac{1}{2} (\mathbf{v}_i^a)^{(\alpha)} - \beta (\mathbf{v}_i^a)^{(0.5)} \right] (\mathbf{v}_j^b)^{(\alpha)} + O(\Delta t^3).\end{aligned}$$

Если энергия деформации является квадратичной формой координат, то схема (0.5,0.5) полностью консервативна и для аппроксимации упругих сил. В противном случае, для схемы (0.5,0.5) дисбаланс полной энергии на шаге имеет третий порядок малости по Δt , а полный дисбаланс за фиксированное время — второй порядок малости по Δt .

Аппроксимация упругих сил

Опишем алгоритм вычисления упругих сил на сетке, состоящей из треугольных и четырёхугольных ячеек. Рассмотрим произвольную треугольную ячейку. Обозначим её вершины 0, 1 и 2 (рис. 1) и введём обозначения для векторов её рёбер: в текущий момент времени $\mathbf{d}_{10,20} = \mathbf{r}_{1,2} - \mathbf{r}_0$, на

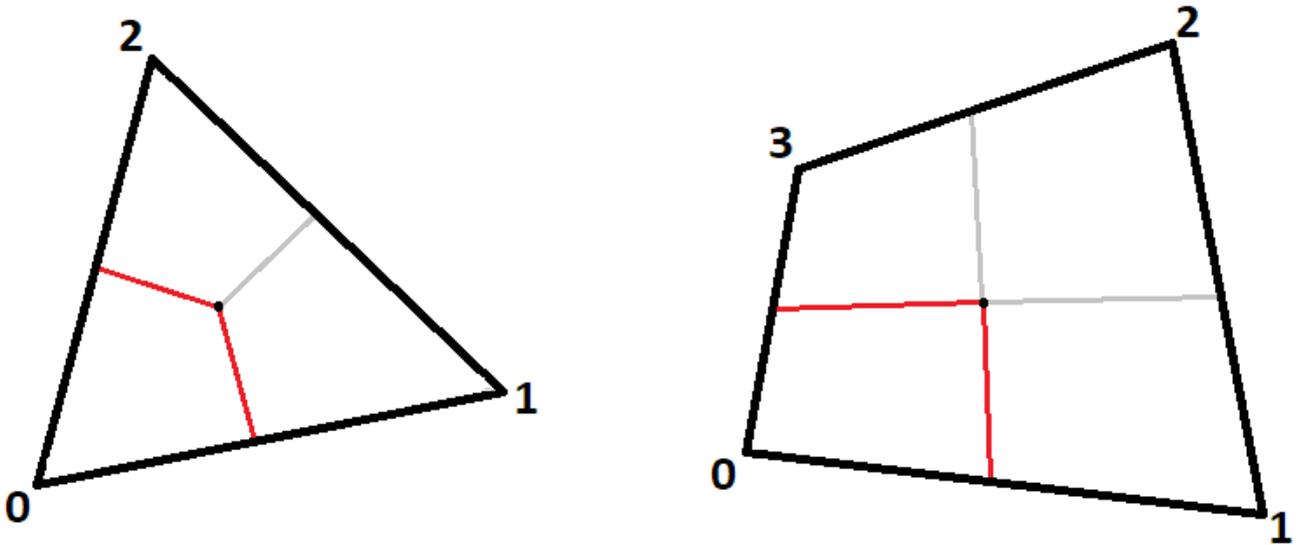


Рис. 1. Разбиения треугольной и четырёхугольной ячейки для вычисления вкладов в массы и силы. Красным выделена граница приузлового объёма узла 0.

недеформированной сетке $\mathbf{h}_{10,20} = (\mathbf{r}_{1,2} - \mathbf{r}_0)|_s$. В предположении однородной деформации эти вектора связаны соотношением $\mathbf{d}_{i0} = M\mathbf{h}_{i0}$, где матрица M имеет вид

$$M = \frac{1}{\mathbf{h}_{10}^x \mathbf{h}_{20}^y - \mathbf{h}_{10}^y \mathbf{h}_{20}^x} \begin{pmatrix} \mathbf{d}_{10}^x & \mathbf{d}_{20}^x \\ \mathbf{d}_{10}^y & \mathbf{d}_{20}^y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{h}_{20}^y & -\mathbf{h}_{20}^x \\ -\mathbf{h}_{10}^y & \mathbf{h}_{10}^x \end{pmatrix},$$

а координаты в ячейке

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + M(\mathbf{r}|_s - \mathbf{r}_0|_s) = (\mathbf{r}_0 - M\mathbf{r}_0|_s) + M\mathbf{r}|_s = \mathbf{A} + M\mathbf{r}|_s.$$

Вектор \mathbf{A} отвечает за параллельный перенос ячейки как целого, а матрица M — за деформацию и поворот. Эти величины определяются однозначно и не зависят от выбора нумерации узлов: $\mathbf{A} = \mathbf{r}_0 - M\mathbf{r}_0|_s = \mathbf{r}_1 - M\mathbf{r}_1|_s = \mathbf{r}_2 - M\mathbf{r}_2|_s$.

Выражение для производной вектора деформации по координате недеформированного тела имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{U}^a}{\partial \mathbf{r}_s^b} = \frac{\partial \mathbf{r}^a}{\partial \mathbf{r}_s^b} - \delta^{ab} = M^{ab} - \delta^{ab}.$$

Данное точное (для однородно деформируемой треугольной ячейки) выражение совпадает с аппроксимацией из работы [1]. В терминологии этой статьи, вектор $\mathbf{d}_{10,20} - \mathbf{h}_{10,20} = \Delta_{10,20} \mathbf{U}$ — сеточная функция изменения вектора

смещения вдоль ребра, а вектора $\frac{1}{\mathbf{h}_{10}^x \mathbf{h}_{20}^y - \mathbf{h}_{10}^y \mathbf{h}_{20}^x} \begin{pmatrix} -\mathbf{h}_{10}^y \\ \mathbf{h}_{10}^x \end{pmatrix} = \mathbf{e}'_{201}$ (20) и

$\frac{1}{\mathbf{h}_{10}^x \mathbf{h}_{20}^y - \mathbf{h}_{10}^y \mathbf{h}_{20}^x} \begin{pmatrix} \mathbf{h}_{20}^y \\ -\mathbf{h}_{20}^x \end{pmatrix} = \mathbf{e}'_{201}(10)$ — взаимные орты к ребрам недеформированного базиса. Представление тензорного поля $\frac{DU}{Dr_s}$ в базисе 201, образованном рёбрами 10 и 20, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}^a}{\partial \mathbf{r}_s^b} &= \Delta_{10} \mathbf{U}^a (\mathbf{e}'_{201}(10))^b + \Delta_{20} \mathbf{U}^a (\mathbf{e}'_{201}(20))^b = \\ &= \frac{\mathbf{d}_{10}^a - \mathbf{h}_{10}^a}{\mathbf{h}_{10}^x \mathbf{h}_{20}^y - \mathbf{h}_{10}^y \mathbf{h}_{20}^x} \begin{pmatrix} \mathbf{h}_{20}^y \\ -\mathbf{h}_{20}^x \end{pmatrix}^b + \frac{\mathbf{d}_{20}^a - \mathbf{h}_{20}^a}{\mathbf{h}_{10}^x \mathbf{h}_{20}^y - \mathbf{h}_{10}^y \mathbf{h}_{20}^x} \begin{pmatrix} -\mathbf{h}_{10}^y \\ \mathbf{h}_{10}^x \end{pmatrix}^b = M^{ab} - \delta^{ab}. \end{aligned}$$

Поскольку деформация ячейки предполагается однородной, а коэффициенты Ламе — постоянными, тензор напряжений в ячейке σ_{012} не зависит от пространственной координаты и вычисляется по формулам (2) – (3).

Вклад ячейки в энергию деформации тела имеет вид

$$\delta E_{def} = \frac{1}{2} V_s \text{Tr}(\sigma_{012} T_{012}),$$

где V_s — объём недеформированной ячейки. Вклад в силу $\delta \mathbf{F}_0$, соответственно, равен

$$\delta \mathbf{F}_0^a = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0^a} \delta E_{def} = -\frac{V_s}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0^a} \text{Tr}(\sigma_{012} T_{012}) = -V_s \sigma_{012}^{bc} \frac{\partial T_{012}^{bc}}{\partial \mathbf{r}_0^a}.$$

Использование этой формулы обеспечивает асимптотическую консервативность разностной схемы (4) при $\Delta t \rightarrow 0$. Выпишем в явном виде соответствующие формулы для линейного тензора деформации из работы [1]. В терминологии этой работы объём приузлового домена $V_s/3$ — объём базиса 201, образованного рёбрами 20 и 10; $\mathbf{e}'_{201}(20) = -\mathbf{n}_{01}/2V_s$ и $\mathbf{e}'_{201}(10) = -\mathbf{n}_{20}/2V_s$ — взаимные орты к ребрам 20 и 10 в базисе 201, (\mathbf{n}_{01} , \mathbf{n}_{12} и \mathbf{n}_{20} — внешние нормали к соответствующим граням недеформированной ячейки).

Вклад ячейки 012 в упругие силы, действующие на узел 0, получается из суммирования вкладов по базисам 012, 201 и 120. Он равен

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{F}_0 &= \frac{V_s}{3} \sigma_{012} \mathbf{e}'_{201}(10) + \frac{V_s}{3} \sigma_{012} \mathbf{e}'_{120}(01) + \frac{V_s}{3} \sigma_{012} \mathbf{e}'_{201}(20) + \frac{V_s}{3} \sigma_{012} \mathbf{e}'_{012}(02) = \\ &= \sigma_{012} \left(\frac{\mathbf{n}_{12} - \mathbf{n}_{01}}{6} + \frac{\mathbf{n}_{12} - \mathbf{n}_{20}}{6} \right) = \sigma_{012} \frac{1}{2} \mathbf{n}_{12} = -\sigma_{012} \frac{1}{2} (\mathbf{n}_{01} + \mathbf{n}_{20}). \end{aligned}$$

Для вычисления вклада ячейки 012 в массы приузловых объёмов разобьём её отрезками, соединяющими центры рёбер и центр масс ячейки (см. рис. 1). Члены $(\mathbf{n}_{12} - \mathbf{n}_{01})/6$ и $(\mathbf{n}_{12} - \mathbf{n}_{20})/6$ отвечают внешним нормальям к участкам

границы приузлового объёма узла 0, выделенным красным на рис. 1. Вклад ячейки 012 в массу узла 0 равен $\rho V/3$ или $\rho_s V_s/3$.

Таким образом, вклады ячейки 012 в массы и силы равны

$$\begin{aligned}
 \delta M_0^* &= \delta M_1^* = \delta M_2^* = \frac{1}{3} \rho V = \frac{1}{3} \rho_s V_s, \\
 \delta \mathbf{F}_0 &= \sigma_{012} \frac{1}{2} \mathbf{n}_{12} = -\sigma_{012} \frac{1}{2} (\mathbf{n}_{01} + \mathbf{n}_{20}), \\
 \delta \mathbf{F}_1 &= \sigma_{012} \frac{1}{2} \mathbf{n}_{20} = -\sigma_{012} \frac{1}{2} (\mathbf{n}_{12} + \mathbf{n}_{01}), \\
 \delta \mathbf{F}_2 &= \sigma_{012} \frac{1}{2} \mathbf{n}_{01} = -\sigma_{012} \frac{1}{2} (\mathbf{n}_{20} + \mathbf{n}_{12}).
 \end{aligned} \tag{5}$$

Мы видим, что для треугольных ячеек и линейного тензора деформации аппроксимация [1] имеет простую геометрическую интерпретацию: это приближение однородно деформируемой треугольной ячейки, вклад которой в массы приузловых доменов и силы, действующие на них, вычисляется в соответствии с разбиением, изображённым на рис. 1.

В случае нелинейного тензора деформации для вычисления упругих сил следует использовать общее соотношение $\mathbf{F} = -\frac{\partial E_{def}}{\partial \mathbf{r}}$.

Для четырёхугольной ячейки подобной простой геометрической интерпретации не существует. В ячейке 0123 тензор деформации может быть вычислен по четырём парам рёбер, и значения σ_{012} , σ_{123} , σ_{230} и σ_{301} в общем случае не совпадают. Консервативные для линейного тензора аппроксимации упругих сил [1] при этом имеют вид

$$\begin{aligned}
 \delta M_0^* &= \delta M_1^* = \delta M_2^* = \delta M_3^* = \frac{1}{4} \rho_s V_s, \\
 \delta \mathbf{F}_0 &= \frac{1}{4} (\sigma_{301} \mathbf{n}_{01} + \sigma_{301} \mathbf{n}_{30} - \sigma_{012} \mathbf{n}_{12} - \sigma_{230} \mathbf{n}_{23}), \\
 \delta \mathbf{F}_1 &= \frac{1}{4} (\sigma_{012} \mathbf{n}_{12} + \sigma_{012} \mathbf{n}_{01} - \sigma_{123} \mathbf{n}_{23} - \sigma_{301} \mathbf{n}_{30}), \\
 \delta \mathbf{F}_2 &= \frac{1}{4} (\sigma_{123} \mathbf{n}_{23} + \sigma_{123} \mathbf{n}_{12} - \sigma_{230} \mathbf{n}_{30} - \sigma_{012} \mathbf{n}_{01}), \\
 \delta \mathbf{F}_3 &= \frac{1}{4} (\sigma_{230} \mathbf{n}_{30} + \sigma_{230} \mathbf{n}_{23} - \sigma_{301} \mathbf{n}_{01} - \sigma_{123} \mathbf{n}_{12}).
 \end{aligned} \tag{5'}$$

Участки границы, выделенные красным на рис. 5, имеют внешние нормали $\frac{\mathbf{n}_{23} - \mathbf{n}_{01}}{4}$ и $\frac{\mathbf{n}_{12} - \mathbf{n}_{20}}{4}$, однако на разные составляющие этих нормалей умножается тензор деформации, вычисленный в различных базисах. Объём, ограниченный

этой границей, равен среднему арифметическому четверти объёма недеформированной ячейки $V_s/4$ и базисного объёма $V_{301} = \frac{1}{4}|\mathbf{h}_{10} \times \mathbf{h}_{30}|$.

Отметим, что на практике целесообразно вычислять формулы (5') в цикле, обходя ячейку 0123 по узлам (парам базисных рёбер). При этом в базисе 301 вычисляется тензор σ_{301} и его вклады в силы $\delta\mathbf{F}_0$, $\delta\mathbf{F}_1$ и $\delta\mathbf{F}_3$. Сумма этих вкладов равна нулю, что обеспечивает строгое выполнение в разностной схеме третьего закона Ньютона и закона сохранения импульса.

Потенциальная (внутренняя) энергия деформированной ячейки в случае четырёхугольной ячейки имеет вид

$$\delta E = \frac{1}{2} [V_{012} \text{Tr}(\sigma_{012} T_{012}) + V_{123} \text{Tr}(\sigma_{123} T_{123}) + V_{230} \text{Tr}(\sigma_{230} T_{230}) + V_{301} \text{Tr}(\sigma_{301} T_{301})].$$

При выделении диагональной компоненты вклад массы ячейки в массу узла вычисляется аналогично, а силы давления, в соответствии с аппроксимацией [6], — по формуле $\delta\mathbf{F}^{(\beta)} = P^{(\beta)} \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \right)^{(\beta)}$. Внутренняя энергия, термодинамически согласованная с давлением $P = K(1 - \rho_s/\rho)$, имеет вид

$$\delta E = \frac{1}{2} V_s K \left(1 - \frac{\rho_s}{\rho} \right)^2.$$

Вклады недиагональной компоненты в силы и внутреннюю энергию вычисляются аналогично исходным формулам с заменой σ на $\tilde{\sigma}$.

Тестирование методики

В качестве базовых тестов, позволяющих сделать вывод об корректности такой аппроксимации упругих сил, были рассмотрены следующие динамические и статические задачи: распространение плоской продольной и поперечной звуковых волн, частичное отражение звуковой волны от границы сред, деформация тела под воздействием внешних сил, направленных по нормали или по касательной к поверхности. В последнем случае для получения статического решения в схему была добавлена искусственная математическая вязкость. Аппроксимация тензора вязких напряжений была проведена аналогично аппроксимации тензора напряжений в линейном случае.

Рассматриваемая модель все эти тесты прошла успешно. Когда точным решением является однородная деформация, численное решение выходит на точное значение с произвольной точностью по мере затухания колебаний, в противном случае погрешность зависит от шага сетки.

Для исследования таких свойств рассматриваемых явных и неявных схем, как устойчивость и консервативность, было проведено моделирование нескольких задач, не имеющих аналитического решения, в том числе распространения звуковых волн в двумерной прямоугольной пластине

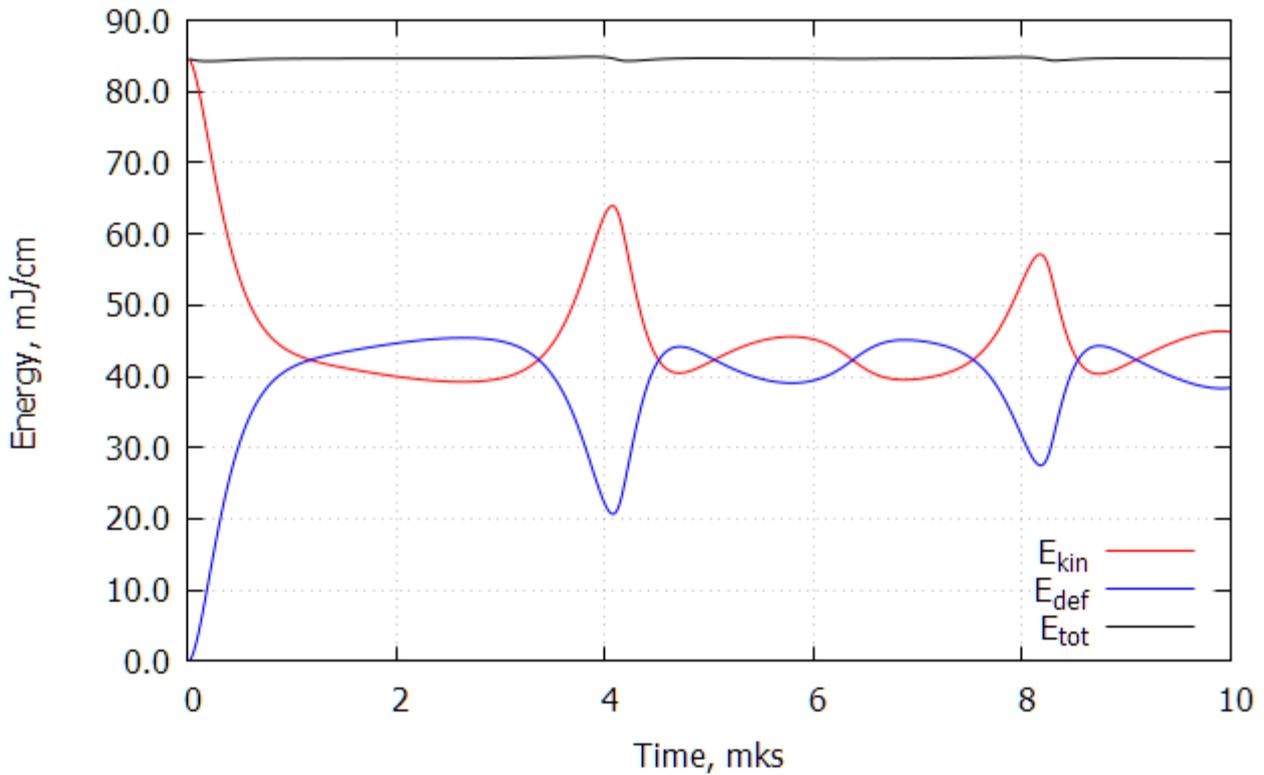


Рис. 2. Динамика полной энергии и её компонент, полученная схемой (0,1) на сетке 1000×260 с шагом 10 нс.

вследствие удара, и колебаний пластины вследствие сдвиговой деформации или деформации изгиба. Во всех этих случаях для вещества использовались параметры алюминия $\rho_s = 2.7 \text{ г/см}^3$, $\mu = \frac{0.07}{2(1+0.34)} \text{ ТПа}$ и $K = \frac{0.07}{3(1-2 \cdot 0.34)} \text{ ТПа}$.

Соответствующие значения скоростей продольного и поперечного звука составляют $c_p = \sqrt{(K + 4/3\mu)/\rho_s} = 0.63$ и $c_s = \sqrt{\mu/\rho_s} = 0.31 \text{ см/мкс}$.

Задача о распространении волны в плоской пластине рассматривалась в следующей постановке: $x \in [-5; 5]$, $y \in [0; 2.6]$, $u(x, y, t = 0) = 0$, $w(x, y, t = 0) = w_0 e^{-4y - x^2}$, где координаты выражены в сантиметрах, а амплитуда волны $w_0 = 20 \text{ м/с}$ много меньше скорости звука в алюминии. В начальный момент времени вещество предполагалось недеформированным, на границе ставилось условие отсутствия внешних сил.

Для анализа вызванных лазерным воздействием гидродинамических и упруго-волновых процессов важна численная информация об обмене импульсом и энергией между испарённой и неиспарённой частями мишени. Для проверки качества методики в этом отношении проводился анализ динамики интегральных внутренней, кинетической и полной энергии, полученной в расчётах на сетке 1000×260 (шаг 0.01 см). Результаты расчёта явной схемой (0,1) с линейным тензором деформации с шагом по времени 10 нс

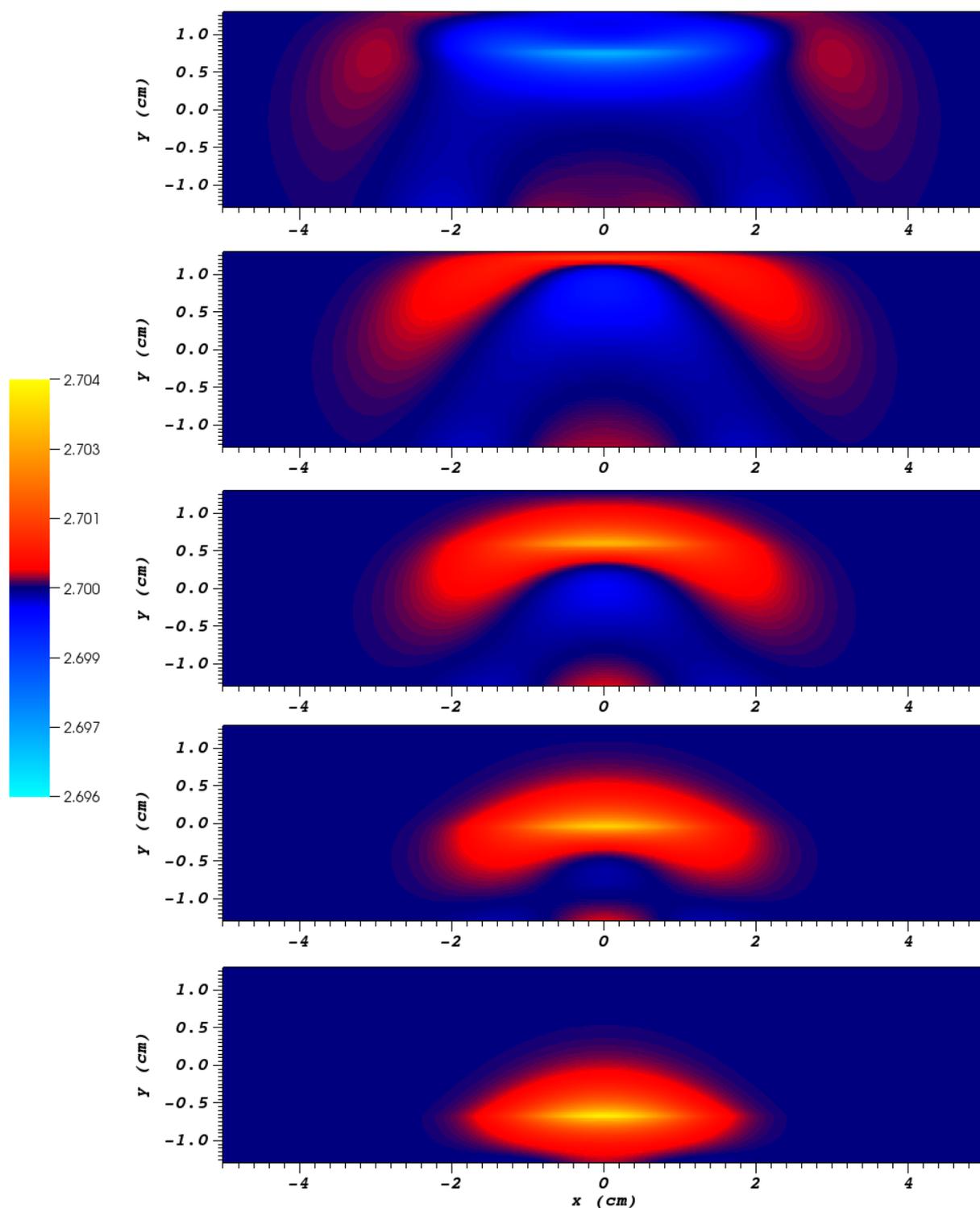


Рис. 3. Снизу вверх: распределение плотности на моменты 1, 2, 3, 4 и 5 мкс.

представлены на рис. 2 и 3. Пики кинетической энергии (красная кривая на рис. 2) в моменты 4.1 и 8.3 мкс связаны с отражением продольной звуковой волны от стенок пластины (см. рис. 3).

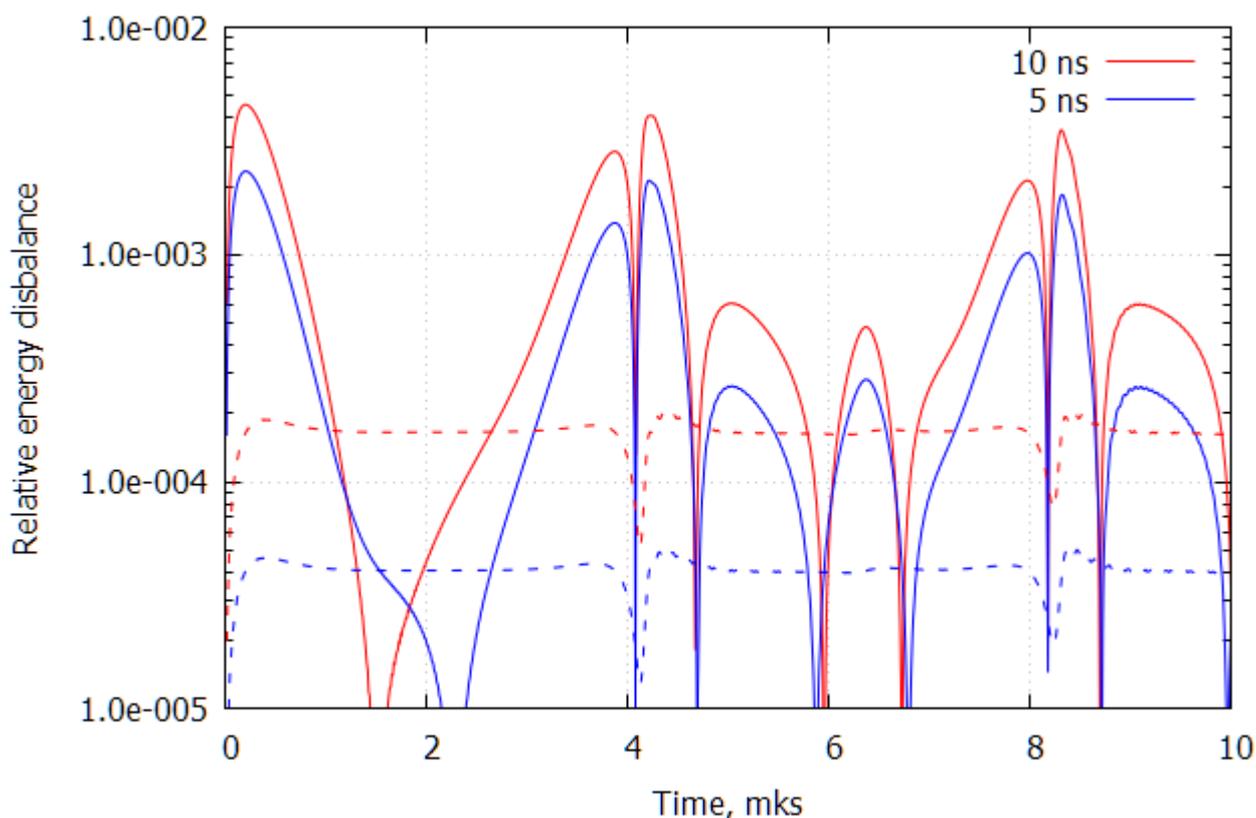


Рис. 4. Динамика относительного дисбаланса полной энергии $\left| \left(\hat{E}_{int} + \hat{E}_{kin} \right) / E_0 - 1 \right|$ (сплошные линии) и $\left| \left(\hat{E}_{int} + E_{kin}^{(0.5)} \right) / E_0 - 1 \right|$ (пунктир) в расчётах схемой (0,1) на сетке 1000×260 с шагом 10 нс (красный) и 5 нс (синий).

Размах осцилляций полной энергии в расчёте по явной схеме составляет $\sim 1\%$ её начального значения и не имеет тенденции к нарастанию. Он не зависит от шага пространственной сетки и прямо пропорционален шагу по времени Δt . Если в качестве полной энергии для данной явной схемы рассматривать комбинацию $\hat{E}_{int} + E_{kin}^{(0.5)}$, то размах осцилляций составляет $\sim 0.03\%$ и с дроблением шага по времени уменьшается как Δt^2 (рис. 4).

Ограничение Куранта на шаг по времени в рассматриваемом расчёте составляет 16 нс. Использование простых итераций для численного решения уравнений (4) усиливает это ограничение примерно в 2 раза. Численный эксперимент эту оценку подтверждает: ограничение шага для схем (1,1) и (1,1)* составляет 7 нс, для схемы (0.5,0.5) — 11 нс, для схемы (0.5,0.5)* — 13 нс, для схемы (0,1) — 14 нс и для схемы (0,1)* — 15 нс. Превышение шага для неявных схем приводит к расходимости (или недостаточно быстрой сходимости) итераций, для явных — к экспоненциальному нарастанию энергии со временем. Интересно отметить, что схемы с выделением диагональной компоненты тензора деформации допускают несколько больший временной шаг.

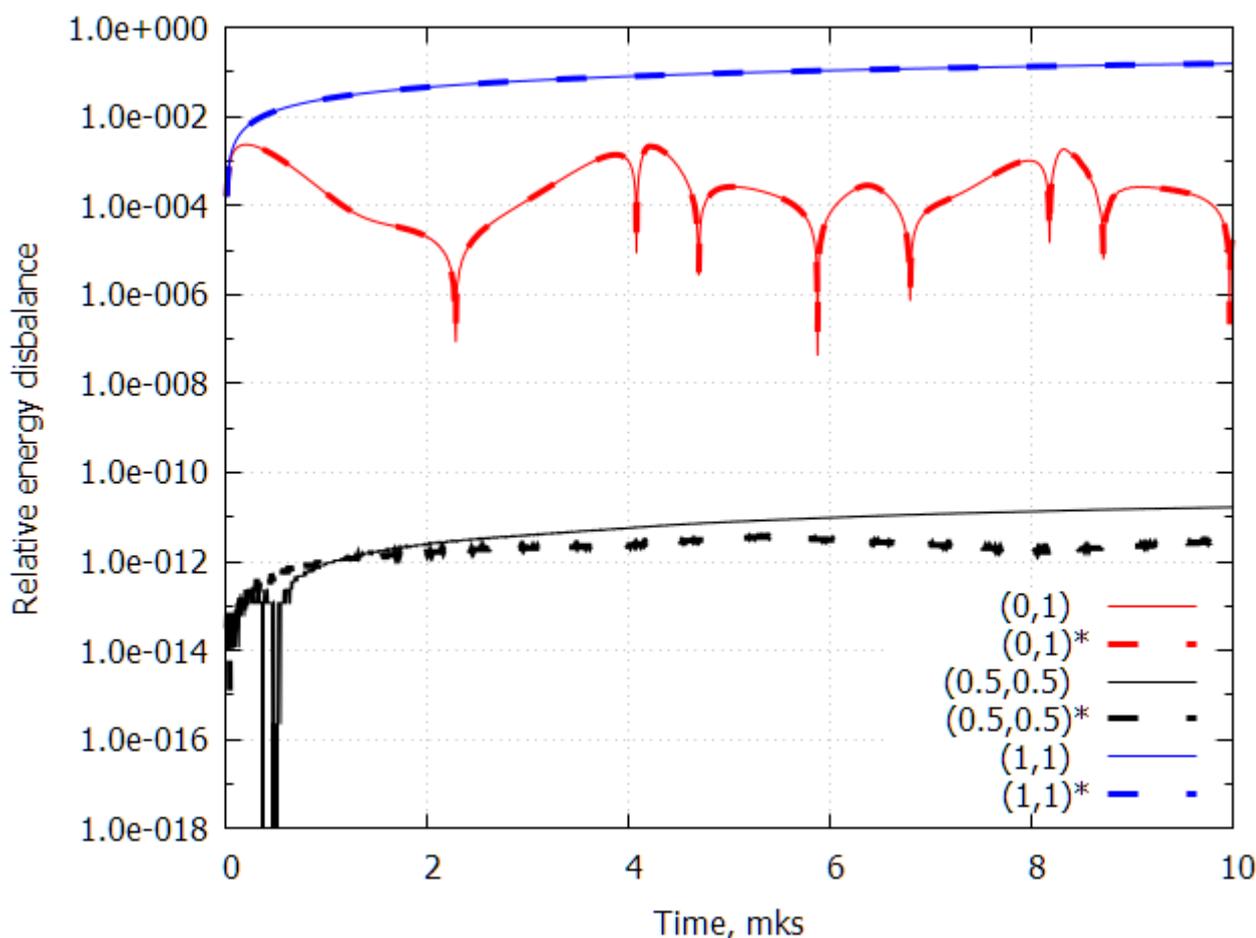


Рис. 5. Динамика относительного дисбаланса полной энергии $\left| \frac{(\hat{E}_{int} + \hat{E}_{kin})}{E_0} - 1 \right|$ в расчётах различными конечно-разностными схемами.

Ввиду этих ограничений, для сравнения различных схем расчёты проводились с шагом по времени 5 нс. На рис. 5 представлен модуль относительного отклонения полной энергии от её начального значения E_0 . Как видно из графика, неявные схемы (1,1) и (1,1)* обладают значительной численной вязкостью: полная энергия монотонно убывает со временем, за 10 мкс расчёта (2000 шагов) уменьшаясь на 15%. Дисбаланс в схемах (0.5,0.5) и (0.5,0.5)* обусловлен только ограниченной точностью численного решения разностных уравнений (4). Выделение диагональной компоненты на результаты не влияет, как и ожидалось ввиду малости деформации.

Из сравнения результатов расчётов можно сделать вывод, что явная схема (0,1) является оптимальной по соотношению скорости и качества расчёта. Использование неявной схемы (0.5,0.5) обеспечивает полную консервативность, но существенно замедляет расчёт (в расчёте с шагом 10 нс для достижения относительной погрешности 10^{-10} требуется до 20 простых итераций на шаге). Использование Ньютоновских итераций [7] для решения системы уравнений (4)

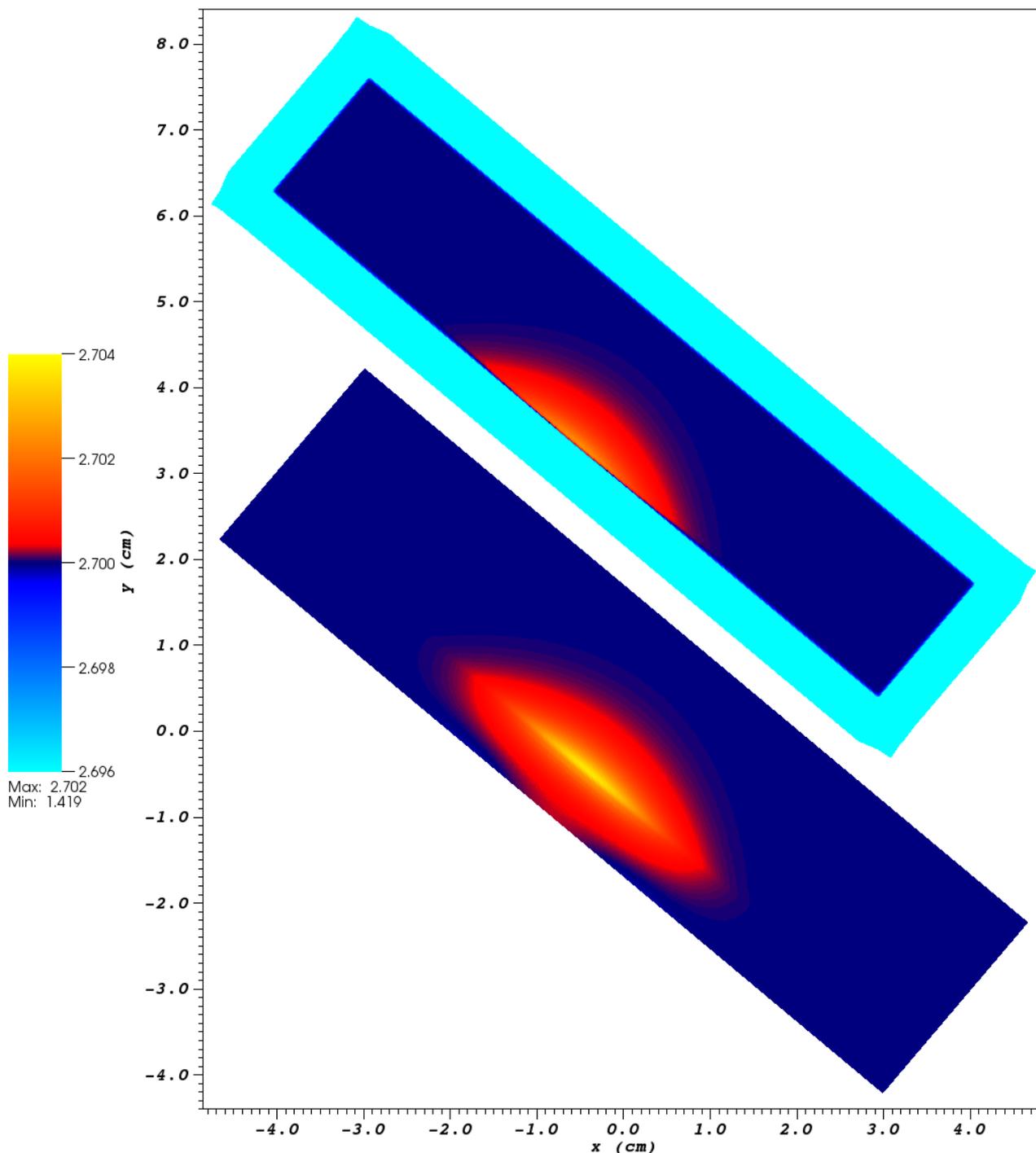


Рис. 6. Расчёты с твердотельным поворотом относительно недеформированной сетки на момент 1 мкс. Линейный (сверху) и квадратичный (снизу) тензор деформации.

позволяет ускорить сходимость, но усложняет алгоритм. При этом заметных различий между расчётами по схемам (0,1) и (0.5,0.5) в распределениях плотности и скорости не наблюдается в течение всего расчёта. Использование полностью неявной схемы (1,1) не рекомендуется ввиду присущей ей высокой схемной вязкости.

На рис. 6 представлены распределения плотности на момент 1 мкс в расчёте с повернутой сеткой. Недеформированная сетка r_s и начальные скорости в этом расчёте задавались аналогично, но перед началом расчёта текущие координаты и скорости подвергались вращению на угол 0.7 радиана:

$$\begin{pmatrix} x & u \\ y & w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(0.7) & \sin(0.7) \\ -\sin(0.7) & \cos(0.7) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_s & 0 \\ y_s & w_0 e^{-4y_s - x_s^2} \end{pmatrix}.$$

Расчёт проводился схемой (0.5,0.5) с линейным и квадратичным тензором деформации. Использование линейного тензора деформации в ситуации, когда поворотом нельзя пренебречь, привело к возникновению нефизических напряжений, и в результате от границы тела со скоростью звука пошла волна разгрузки. Использование квадратичного тензора деформации подобных артефактов не вызвало, и результаты совпали с полученными без поворота с точностью до поворота (ср. с рис. 3).

Отметим, что если вращению на один и тот же угол подвергать как координаты r_s , так и координаты r , даже при использовании линейного тензора деформации нефизических сил и напряжений не возникает — схема инвариантна относительно глобального поворота системы координат. Это позволяет проводить расчёты в ситуации, когда угол поворота r относительно r_s постоянен, вычисляя его на каждом шаге по времени и корректируя сетку. Но, например, в задаче об изгибе тонкой пластины этот угол различный в различных участках пластины — и линейное приближение заведомо неприменимо.

Литература

1. Колдоба В.А., Повещенко Ю.А., Гасилова И.В., Дорофеева Е.Ю. Разностные схемы метода опорных операторов для уравнений теории упругости. // Математическое моделирование, 2012, т. 24, №12, с. 1–12.
2. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. — М.: Наука, 1992.
3. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. — М.: Физматлит, 2000, 400 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. — М.: Наука, 1987.
5. Shoemake, K., Duff, T.: Matrix animation and polar decomposition. In: Proceedings of the Conference on Graphics Interface '92, Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 1992, pages 258–264
6. Головизнин В.М., Самарский А.А., Фаворский А.П. Вариационный подход к построению конечно-разностных математических моделей в гидродинамике. // ДАН СССР, 1977, т. 235, №6, с. 1285–1288.
7. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. — М.: Наука, 1978.