

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(государственный университет)»

На правах рукописи
УДК 519.63

Казаков Александр Олегович

**Численное моделирование волновых процессов в задачах
ультразвукового неразрушающего контроля
сеточно-характеристическим методом**

Специальность 05.13.18 —

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
Васюков Алексей Викторович

Москва — 2019

Оглавление

	Стр.
Введение	5
Глава 1. Математическая модель деформируемого упругого тела под воздействием динамической нагрузки в приближении малых деформаций	12
1.1 Общий вид уравнений	12
1.2 Некоторые частные виды тензоров упругих постоянных	13
1.2.1 Орторомбическая анизотропия	14
1.2.2 Трансверсальная изотропия	15
1.2.3 Изотропный материал	15
1.2.4 Модель акустики	16
1.3 Модели пластичности	17
1.3.1 Критерий текучести Мизеса	17
1.4 Модели вязкости	20
1.5 Композиционные материалы	21
1.6 Некоторые полезные формулы	21
1.6.1 Преобразование тензора упругих постоянных при повороте	22
1.6.2 Соотношения для амплитуды волны при прохождении границы раздела двух сред	22
Глава 2. Численный метод – общие замечания	27
2.1 Эйлеров и Лагранжев подход к описанию сплошной среды	27
2.2 Расщепление по физическим процессам	30
2.3 Движение расчётной сетки в Лагранжевом подходе	31
2.4 Моделирование пластической реологии	33
2.5 Моделирование вязкой реологии	33
Глава 3. Сеточно-характеристический метод	35
3.1 Запись уравнений для применения СХМ	35
3.1.1 Вид системы уравнений для модели линейно-упругого тела	36
3.1.2 Вид системы уравнений для модели акустики	37

	Стр.
3.2 СХМ на неперiodических расчётных сетках	39
3.2.1 Расщепление по направлениям	40
3.2.2 Решение одномерного уравнения	41
3.2.3 Метод на границе области интегрирования	42
3.2.4 Вырождение матриц СЛАУ граничного и контактного корректора	47
3.2.5 Сложные случаи на границе областей интегрирования	53
3.2.6 Некурантовский шаг по времени	54
3.3 Интерполяция в задачах сеточно-характеристического метода	59
3.3.1 Метод интерполяции второго порядка точности на неструктурированной сетке	59
3.3.2 Интерполяция на структурированной расчётной сетке	64
3.3.3 Алгоритм поиска ячейки пересечения характеристики с предыдущим временным слоем	67
Глава 4. Программный комплекс	70
4.1 Монолитная программа, полностью реализованная на компилируемом языке программирования	71
4.2 Набор утилит, комбинируемых между собой с помощью интерпретируемого языка программирования	77
Глава 5. Результаты	81
5.1 Верификация	81
5.1.1 Расчёт слоистой структуры в 1D	81
5.1.2 Ударная волна за счёт подвижности расчётной сетки в 1D	82
5.1.3 Исследование сходимости метода в 1D	83
5.1.4 Моделирование упругопластической реологии в 3D	84
5.2 Моделирование волновых процессов в композиционных материалах	88
5.2.1 Неразрушающий контроль многослойных композитов	88
5.2.2 Некоторые расчёты на неструктурированной расчётной сетке	96
5.2.3 Моделирование реального эксперимента неразрушающего контроля композиционных материалов	99

	Стр.
5.2.4 Получение расчётных А- и В-сканов	105
5.3 Моделирование ультразвукового исследования в биологических тканях	108
Заключение	114
Список литературы	116

Введение

Актуальность темы

Роль композиционных материалов в науке и технике растёт начиная с середины XX века. Их основные преимущества – большая лёгкость и устойчивость к коррозии при сохранении полезных свойств своих некомпозиционных аналогов. К примеру, использование композитов вместо алюминиевых сплавов для обшивки самолёта позволяет значительно снизить его массу, а снижение массы позволяет снижать расход топлива на сотни килограмм в расчёте на лётный день [1].

Вместе с тем, переход к использованию композиционных материалов в авиации и других областях с высокой ответственностью проводится очень осторожно, так как требования к точности сборки и бережности эксплуатации повышаются. Одной из опасностей использования многослойных материалов является возможность потери образцом необходимых прочностных качеств из-за внутреннего повреждения – расслоения, не обнаружимого без использования специальных приборов неразрушающего контроля.

Ввиду того, что авиационные композиты производятся из слоёв материала, обладающего анизотропными свойствами, волновая картина в исследуемых образцах значительно сложнее, чем в однослойных образцах с изотропной реологией, что в свою очередь увеличивает сложность анализа показаний приборов неразрушающего контроля.

Точно так же ультразвуковые исследования в медицине имеют дело с волнами, сложным образом отражёнными от различных поверхностей неоднородной структуры человеческого органа или части тела.

Всё это говорит о важности изучения внутренней волновой картины в исследуемых образцах при проведении ультразвуковых исследований для лучшего понимания результирующих показаний приборов на поверхности. Возникает необходимость в моделировании динамических процессов, происходящих в телах при их неразрушающем контроле. Для моделирования сложной геометрии и неоднородной структуры образцов даже в случае линейной реологии среды необходимо применение компьютерного расчёта.

Специфика задачи состоит в необходимости хорошего разрешения волновых фронтов распространяющихся в материале возмущений для сопоставления

волновой картины с измерениями на поверхности. Сеточно-характеристический метод, в основе которого лежит использование волновых свойств интегрируемых уравнений, как раз обладает таким свойством [2], позволяя достичь высокого пространственного и временного разрешения.

Таким образом, данная работа посвящена применению сеточно-характеристического метода к моделированию волновых процессов при различных типах ультразвуковых исследований.

Целью данной работы является разработка, программная реализация и верификация математической модели и численного метода для расчётов процессов ультразвукового неразрушающего контроля конструкций сложной геометрии и реологии. Для достижения поставленной цели в рамках работы были рассмотрены и решены следующие **задачи**:

1. Разработка математической модели процесса ультразвукового исследования образцов сложной реологии и геометрии (инженерных конструкций из многослойных анизотропных композиционных материалов, биологических тканей головы человека). Модель должна обеспечить воспроизведение эффектов, наблюдаемых в натуральных экспериментах, и позволить проводить прямое численное моделирование ультразвукового исследования в сложных случаях.
2. Разработка численного метода, учитывающего волновую природу уравнений и позволяющего проводить расчёты как на структурированных, так и на неструктурированных сетках для расчётов в областях сложной формы с явным выделением контактных границ между материалами.
3. Создание параллельного программного комплекса, реализующего данный численный метод, с возможностью последующего расширения круга решаемых волновых задач путём добавления других типов уравнений. Добавление новой математической модели должно происходить с минимальным дублированием уже имеющегося кода, но такая гибкость не должна приводить к уменьшению вычислительной эффективности программы.
4. Численное моделирование волновых процессов, происходящих при ультразвуковом исследовании компонент обшивки самолёта из многослойных композиционных материалов. Моделирование процесса неразрушающего контроля вплоть до расчёта показаний датчика, сравнение

численных расчётов с экспериментальными данными, верификация реализованных модели и метода по данным натуральных экспериментов.

5. Численное моделирование медицинского ультразвукового исследования биологических тканей головы человека с явным выделением границ между тканями различных типов. Демонстрация стабильной работы модели и метода на сторонних сетках сложной геометрии, построенных по анатомическим данным конкретного пациента.

Научная новизна:

1. Произведён анализ возможности применения сеточно-характеристического метода на треугольных и тетраэдральных расчётных сетках существенной неперидичности. Выявлены неизвестные ранее причины осцилляций на границах областей интегрирования. Предложены модификации метода для устранения выявленных проблем. Для эффективной реализации метода предложена схема интерполяции второго порядка точности на неперидических треугольных и тетраэдральных сетках, не требующая хранения значений интерполируемой функции в центрах рёбер ячеек.
2. Благодаря использованию техник метапрограммирования (шаблонов C++) созданный параллельный программный комплекс позволяет без потери вычислительной эффективности добавлять новые типы волновых уравнений, только описывая их свойства в коде. Все остальные компоненты, в том числе и численный метод, переиспользуются.
3. Предложенная модель позволила получить соответствие расчётов и натуральных экспериментов по неразрушающему контролю композитных панелей. В ходе данных расчётов продемонстрирована важность прямого учёта распространения волн в материалах прибора, так как переотражение волн внутри кристаллической призмы датчика оказывает существенное влияние на его показания.
4. Расчёты с использованием сетки головы человека с явным выделением контактов между различными биологическими тканями показали применимость модели, метода и программной реализации для задач со сложной геометрией с большим количеством пустот, выпуклостей и изгибов. Автору неизвестно о других успешных расчётах сеточно-характеристическим методом на неперидических сетках с геометрией такой сложности.

Теоретическая и практическая значимость Теоретическая ценность работы состоит в том, что область применения сеточно-характеристического метода была расширена на сетки сложной геометрии. Это стало возможно в результате выполненного анализа работы метода на сетках сложной геометрии, разбора причины осцилляций на границах областей интегрирования, реализации ряда модификаций метода для устранения обнаруженных проблем.

Практическая значимость заключается в том, что результаты численного моделирования ультразвукового неразрушающего контроля образца из многослойного анизотропного композиционного материала могут быть применены для детального анализа волновых процессов, происходящих в исследуемом образце и приборе, что даёт возможность глубже понять вид графиков и А- и В-сканов – результирующих показаний прибора.

Аналогично результаты численного моделирования ультразвукового исследования биологических тканей человека с явным выделением различных видов тканей дают возможность изучения волновых картин внутри обследуемых органов, что позволяет интерпретировать результаты, получаемые на экранах приборов ультразвукового исследования и оценивать возможности данной техники для решения тех или иных задач медицинской диагностики.

Наконец, созданный программный комплекс спроектирован с учётом возможности быстрого добавления новых типов волновых уравнений, что позволит в дальнейшем использовать его для численных расчётов в рамках других физических и математических моделей.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработана математическая модель для расчётов волновых процессов в среде при проведении ультразвукового неразрушающего контроля изотропных и анизотропных материалов, в том числе сложной геометрии, в приближении малых деформаций.
2. Разработан численный метод из семейства сеточно-характеристических. Метод рассчитан на применение как на периодических прямоугольных, так и на непериодических тетраэдральных расчётных сетках, благодаря чему позволяет проводить расчёты в областях сложной формы, вплоть до моделирования распространения волн в частях тела человека с выделением различных тканей. Произведён подробный анализ метода на треугольных и тетраэдральных расчётных сетках с указанием сложностей, связанных с непериодичностью сетки и вызыва-

ющих неустойчивость расчёта. Предложенные в работе модификации метода позволили провести ряд расчётов, до этого неустойчивых.

3. Создан параллельный программный комплекс на C++, реализующий предложенные модель и метод. За счёт использования техники шаблонизации программный комплекс расширяемый без потери производительности, на данный момент реализованы модели изотропного и анизотропного упругого тела и акустики, периодические прямоугольные и непериодические тетраэдральные и треугольные расчётные сетки.
4. Проведены расчёты, моделирующие эксперимент по ультразвуковому неразрушающему контролю композитной панели с учётом её анизотропной реологии и с учётом влияния геометрии прибора на его показания. Результаты моделирования сверены с экспериментальными данными для верификации модели, метода и программной реализации.
5. Проведены расчёты, моделирующие ультразвуковые исследования в биологических тканях головы человека с явным выделением соединительной, костной, мозговой, мышечной ткани и сосудов. На сетках такой неоднородности и непериодичности, исходя из известных автору работ, устойчивый расчёт сеточно-характеристическим методом удался впервые.

Достоверность полученных результатов обеспечивается строгостью используемого математического аппарата, выполнением тестовых расчётов модельных постановок с известным решением, верификацией по данным натурных экспериментов.

Апробация работы. Результаты работы были доложены, обсуждены и получили одобрение специалистов на следующих научных конференциях:

1. XVIII Всероссийская конференция молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям. Иркутск, 21-25 августа 2017 г.
2. 2nd International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond (CSP2017). Moscow, 9-12 October 2017.
3. Quasilinear equations, inverse problems and their applications. Dolgoprudny, 12-15 Sept. 2016.
4. 50 years of the development of grid-characteristic method. MIPT & ICAD RAS, Dolgoprudniy, March 31 - April 3, 2018.

5. XLI Академические чтения по космонавтике. Секция 22 им. академика В.Н. Челомея (Ракетные комплексы и ракетно-космические системы. Проектирование, экспериментальная отработка, лётные испытания, эксплуатация). Реутов, 24-27 января 2017 г.
6. 58-я научная конференция МФТИ. Долгопрудный, 23–28 ноября 2015 г.
7. 59-я научная конференция МФТИ. Долгопрудный, 21–26 ноября 2016 г.

Работа поддержана рядом государственных грантов:

1. Грант РФФИ 16-07-00884 А “Численное исследование поведения композиционных материалов под действием динамической нагрузки”, 2016-2018 гг.
2. Грант РФФИ 17-07-00972 А “Разработка параллельных численных методов для моделирования на суперкомпьютерах воздействия на композитные конструкции высокоскоростных соударений и интенсивных пучков частиц”, 2017-2018 гг.
3. Грант РФФИ 18-29-02127 МК “Разработка методики моделирования процессов, протекающих в теле человека при применении интеллектуальных систем неинвазивной хирургии” 2018-2019 гг.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 7 статьях [3–9], 5 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК [3–7], в том числе 5 – в изданиях, входящих в Scopus [3–7], в том числе 3 – в журналах, индексируемых Web of Science [3; 5; 6].

Личный вклад. Все исследования, изложенные в диссертационной работе, проведены лично соискателем. Заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

Среди публикаций соискателя [3] выполнена и опубликована без соавторов. В [4; 6] соискателю принадлежат предложенный численный метод и программный комплекс для выполнения расчётов. В [5] соискателем разработаны существенные модификации численного метода, которые позволили выполнить расчёты, бывшие ранее неустойчивыми; расчёты с использованием модифицированного метода также выполнены соискателем. В [7] соискателем предложена модель процесса неразрушающего контроля и выполнены расчёты с использованием данной модели. В [8; 9] соискателем также предложена модель и выполнены расчёты на её основе.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 121 страницу, включая 51 рисунок и 3 таблицы. Список литературы содержит 57 наименований.

Глава 1. Математическая модель деформируемого упругого тела под воздействием динамической нагрузки в приближении малых деформаций

1.1 Общий вид уравнений

При построении математической модели, описывающей распространение упругих волн в твёрдом деформируемом теле, будем исходить из малости деформаций. Такой подход оправдан в рамках рассматриваемых в работе задач и позволяет сразу перейти к дифференциальной записи уравнений движения и реологических соотношений. Введём обозначения:

- ρ — плотность среды в данной точке,
- \vec{r} — вектор смещения частиц среды в данной точке,
- \vec{v} — вектор скорости частиц среды в данной точке,
- σ — симметричный тензор напряжений в данной точке,
- ε — симметричный тензор деформаций в данной точке,
- ∇ — оператор градиента,
- \vec{f} — массовые силы, действующие на единицу объёма среды,
- \mathbf{F} — силы, обусловленные вязкостью,
- \mathbf{q} — 4-тензор упругих постоянных.

Тогда в указанном приближении [10; 11]:

$$\begin{aligned} \rho \dot{\vec{v}} &= \nabla \cdot \sigma + \vec{f} && \text{(уравнения движения),} \\ \dot{\sigma} &= \mathbf{q} : \dot{\varepsilon} + \mathbf{F} && \text{(реологические соотношения).} \end{aligned} \quad (1.1)$$

Ввиду малости смещения частиц от положения равновесия тензор деформации выражается через производные от перемещения:

$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla \otimes \vec{r} + (\nabla \otimes \vec{r})^T). \quad (1.2)$$

Подставляя продифференцированное по времени 1.2 в 1.1, получаем:

$$\begin{aligned} \rho \dot{\vec{v}} &= \nabla \cdot \sigma + \vec{f} \\ \dot{\sigma} &= \frac{1}{2} \mathbf{q} : (\nabla \otimes \vec{v} + (\nabla \otimes \vec{v})^T) + \mathbf{F}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Или в индексной записи:

$$\begin{aligned}\rho\dot{v}_i &= \nabla_j \sigma_{ij} + f_i \\ \dot{\sigma}_{ij} &= \frac{1}{2} q_{ijkl} (\nabla_k v_l + \nabla_l v_k) + F_{ij}.\end{aligned}\tag{1.4}$$

В зависимости от реологии среды \mathbf{q} , \mathbf{F} и ρ могут зависеть от её текущего состояния, то есть от \vec{v} и σ , но в большинстве рассматриваемых в данной работе задач они принимаются за константу.

1.2 Некоторые частные виды тензоров упругих постоянных

Хотя вообще говоря число компонент тензора \mathbf{q} равно $3^4 = 9^2 = 81$, на самом деле для любого реального произвольно анизотропного материала тензор упругих постоянных обладает максимум 21 независимым параметром.

Это видно из следующих рассуждений [12]. Во-первых, симметричные тензоры напряжений и деформаций имеют не 9, а 6 независимых величин, поэтому в \mathbf{q} остаётся 36 независимых компонент:

$$\begin{aligned}q_{ijkl} &= q_{jikl}, \\ q_{ijkl} &= q_{ijlk}.\end{aligned}$$

Во-вторых, рассмотрим выражение для потенциала упругой энергии W :

$$\begin{aligned}dW &= \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}, \\ q_{ijkl} &= \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}}, \\ q_{ijkl} &= \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}}.\end{aligned}$$

Из независимости второй производной от порядка дифференцирования следует:

$$q_{ijkl} = q_{klij}.$$

Таким образом, зависимость σ от ε можно записать в более простом виде:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

Матрица c_{ij} симметричная – максимум 21 независимый компонент. При этом стоит сказать, что материалы с таким количеством различных компонент в тензоре упругих постоянных встречаются довольно редко. Рассмотрим некоторые более распространённые частные случаи с меньшим количеством различных компонент в порядке их убывания.

1.2.1 Орторомбическая анизотропия

Любые упругие материалы с количеством независимых компонент в тензоре \mathbf{q} больше двух называются анизотропными. Анизотропия материала с различными свойствами вдоль трёх взаимно перпендикулярных направлений называется орторомбической. Даже при такой довольно общего вида анизотропии число независимых компонент сокращается с двадцати одной до девяти:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

1.2.2 Трансверсальная изотропия

Трансверсальная анизотропия – подвид орторомбической, когда вдоль двух осей свойства совпадают, а отличные свойства только вдоль одной выделенной оси. Это частный случай орторомбической. Число независимых компонент – пять:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

здесь $c_{66} = \frac{c_{11}-c_{12}}{2}$.

1.2.3 Изотропный материал

Случай, когда материал обладает одинаковыми свойствами вдоль любого направления в пространстве, называется изотропией материала. Из общезначимых соображений можно получить [13], что в таком случае число независимых коэффициентов зависимости σ от ε сокращается до двух:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

где $c_{44} = \frac{c_{11}-c_{12}}{2}$, причём $c_{12} = \lambda$ и $c_{44} = \mu$ – параметры Ламе, связанные с более известными модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона ν следующие

ми соотношениями:

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ \mu &= \frac{E}{2(1+\nu)}.\end{aligned}\tag{1.9}$$

Для тензорной зависимости $\boldsymbol{\sigma}$ от $\boldsymbol{\varepsilon}$ получается следующая запись:

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda(\boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{I})\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}.\tag{1.10}$$

Здесь \mathbf{I} – единичный тензор. Уравнение 1.3 для случая изотропного материала упрощается до:

$$\begin{aligned}\rho\dot{\vec{v}} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \vec{f} \\ \dot{\sigma} &= \lambda(\nabla \cdot \vec{v})\mathbf{I} + \mu(\nabla \otimes \vec{v} + (\nabla \otimes \vec{v})^T) + \mathbf{F}.\end{aligned}\tag{1.11}$$

1.2.4 Модель акустики

Следующим шагом к упрощению математической модели является акустическое приближение. Вместо тензора напряжений остаётся только одна скалярная величина – давление. Модуль сдвига, он же один из параметров Ламе μ , считается равным нулю:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I},$$

Такая модель, конечно, не подходит для описания упругих тел, но зато вполне приемлема для моделирования жидкостей и биологических тканей, а также благодаря упрощению уравнений позволяет более удобно отлаживать численные методы. Уравнение 1.11 упрощается до:

$$\begin{aligned}\rho\dot{\vec{v}} &= -\nabla p + \vec{f} \\ \dot{p} &= -K(\nabla \cdot \vec{v}) + F.\end{aligned}\tag{1.12}$$

Из упругих параметров материала остался только один. Здесь λ было заменено на модуль всестороннего сжатия K для более привычной записи уравнений.

1.3 Модели пластичности

Существует большое количество феноменологических моделей пластической реологии сплошной среды [14; 15]. Многие из них основываются на критерии текучести – функции от компонент тензора напряжений $P(\sigma_{ij})$. В таких моделях выделяют два режима: упругий и пластический. Упругий режим реализуется при $P(\sigma_{ij}) < 0$, а пластический – при $P(\sigma_{ij}) = 0$, случай $P(\sigma_{ij}) > 0$ полагается невозможным, то есть в пространстве напряжений компоненты σ_{ij} не могут выйти за пределы поверхности, определяемой критерием P . Поверхность, однако, может не быть замкнутой, так что на рост суммы квадратов всех компонент нет теоретического ограничения.

Кроме того, в некоторых моделях в процессе деформирования поверхность текучести может изменять свою форму и расширяться, как на рис. 1.1. Это называется упрочнением материала. Выделяют два основных вида упрочнения:

- Изотропное – поверхность текучести расширяется симметрично относительно начала координат
- Кинематическое – поверхность текучести смещается без изменения формы

Идеальнопластическим материалом, или материалом без упрочнения, называют среду с не меняющейся при деформациях функцией $P(\sigma_{ij})$. Диаграмма $\varepsilon - \sigma$ для такого материала представлена на рис. 1.2, а. При одноосных деформациях модель с кусочно-линейным упрочнением сводится к ступенчатой зависимости модуля Юнга от напряжения (рис. 1.2, б), а идеальнопластическая модель к зависимости сначала линейной, а после превышения порога плоской – (рис. 1.2, в).

1.3.1 Критерий текучести Мизеса

Для металлов установлено, что пластическая деформация обусловлена взаимным смещением кристаллических плоскостей и не изменяет объёма ма-

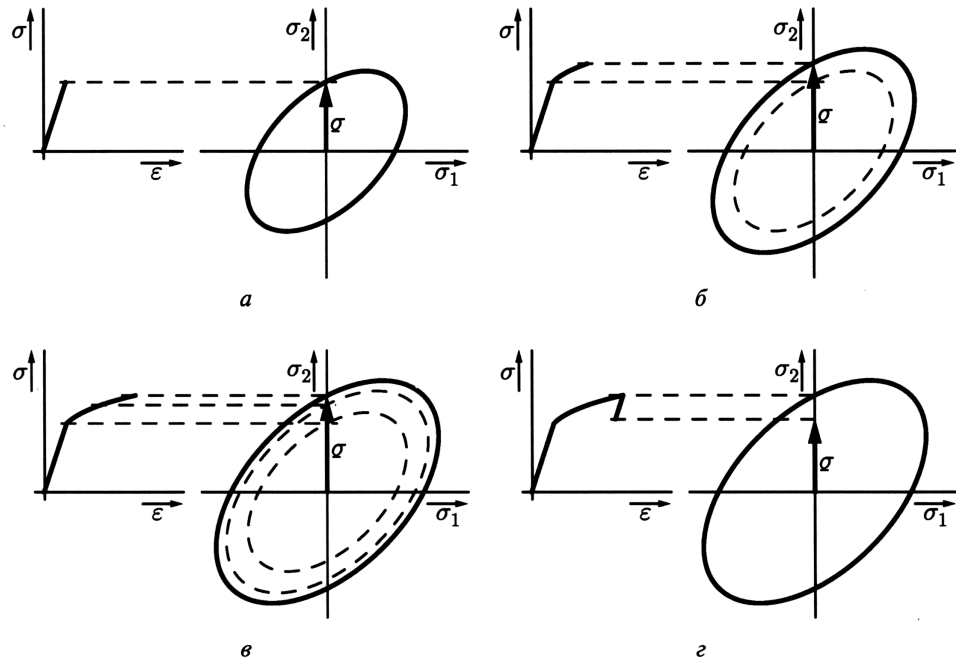


Рисунок 1.1 — Поверхность текучести и диаграмма $\varepsilon - \sigma$ для материала с изотропным упрочнением. а) Упругий участок, $P(\sigma_{ij}) < 0$, б,в) Пластика, поверхность текучести расширяется с увеличением деформации, г) Разгрузка, остаточная деформация, поверхность текучести остаётся расширенной, область упругости увеличилась. Рисунок взят из [14]

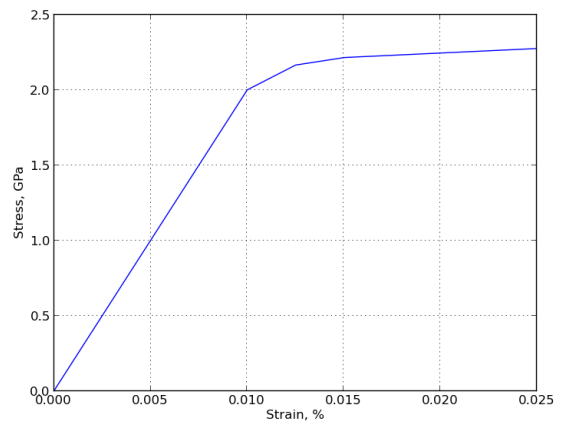
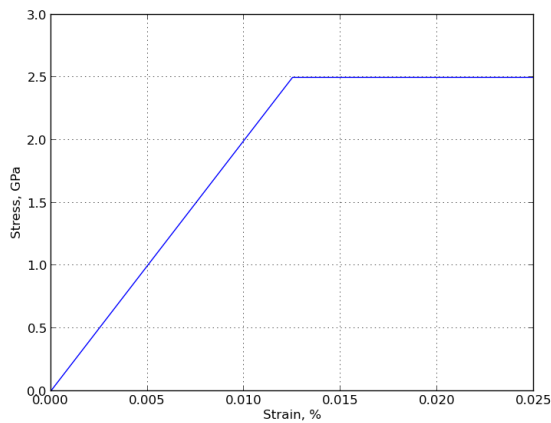


Рисунок 1.2 — Диаграмма $\varepsilon - \sigma$ для материалов а) без упрочнения, б) с кусочно-линейным упрочнением.

териала. Поэтому гидростатическое сжатие

$$\sigma = \frac{\sigma_{ii}}{3}$$

не приводит к пластическим деформациям, и переход к пластике определяется только сдвиговыми напряжениями, то есть девиатором тензора напряжений:

$$s_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma \delta_{ij}.$$

Поэтому одним из широко используемых критериев является получаемая из инвариантов s_{ij} функция

$$P(\sigma_{ij}) = \frac{1}{2} s_{ij} s_{ji} - k_F^2 \quad (1.13)$$

Получаемая поверхность текучести – круговой цилиндр радиуса $k_F \sqrt{2}$ с осью $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$ в пространстве главных напряжений. На рис.1.3 приведён цилиндр и его сечение плоскостью $\sigma_3 = 0$.

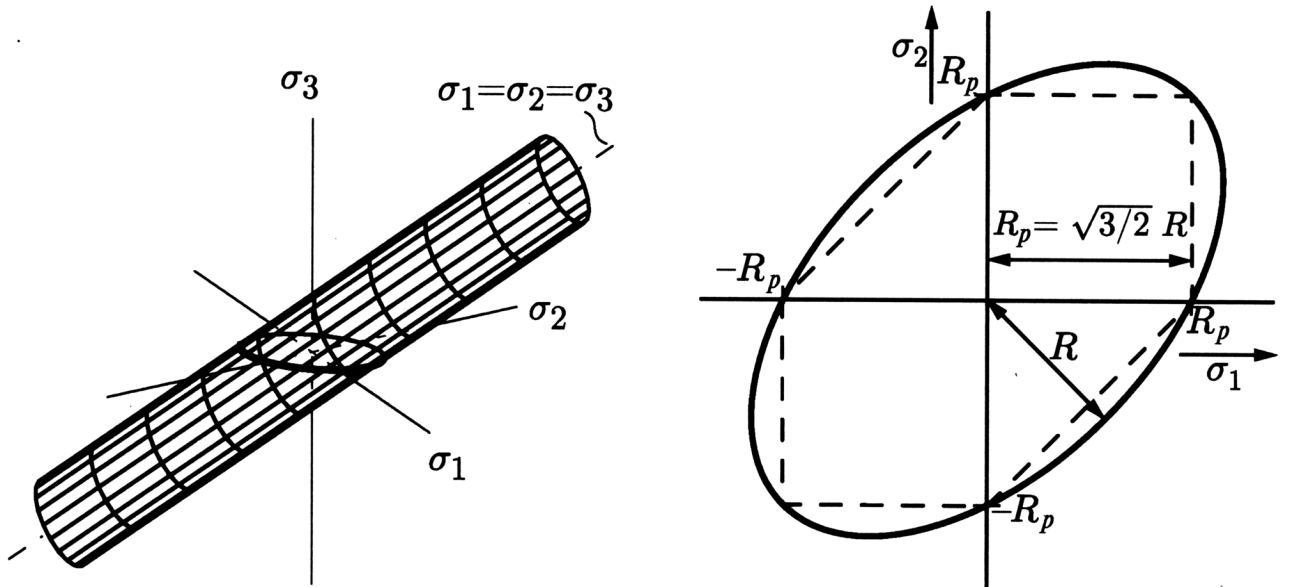


Рисунок 1.3 — Поверхность текучести в критерии Мизеса. Рисунок взят из [14]

Для полимеров же величина предела текучести при сжатии и растяжении часто бывает различна. Поэтому в критерий текучести включаются слагаемые, зависящие от гидростатического давления, и соответствующая поверхность из цилиндрической переходит в параболическую (а) или коническую (б), как показано на рис.1.4.

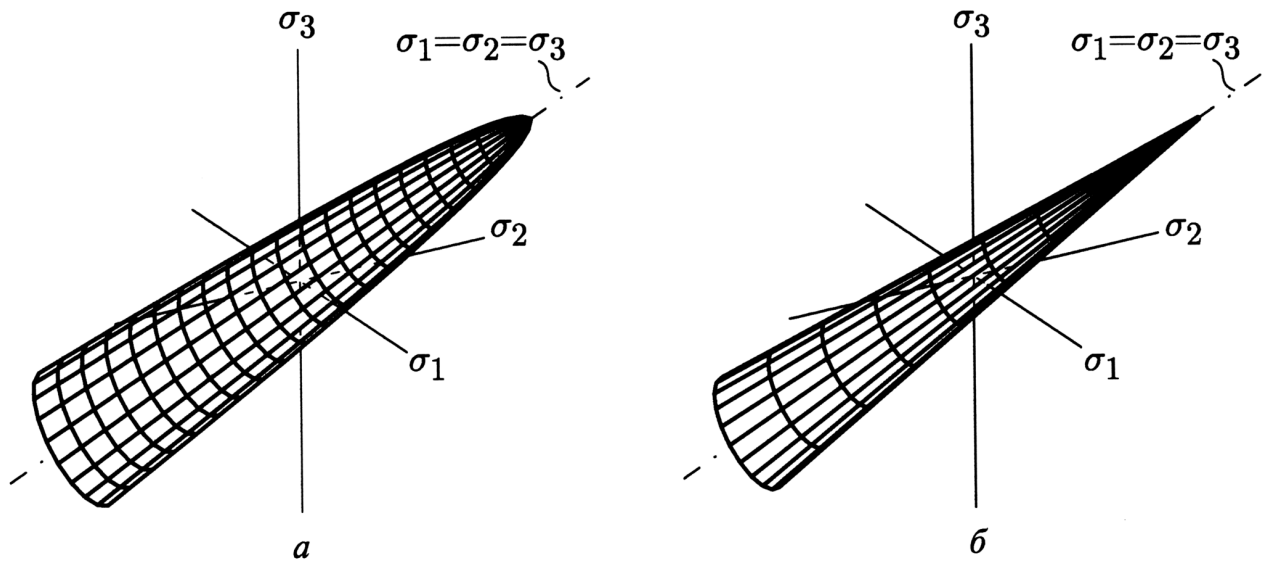


Рисунок 1.4 — Характерные поверхности текучести для пластиков. Рисунок взят из [14]

1.4 Модели вязкости

Первое приближение в моделировании вязких материалов – модели тел Максвелла и Фойхта [13]. Поведение материалов в этих моделях схематически изображено на рисунке 1.4.

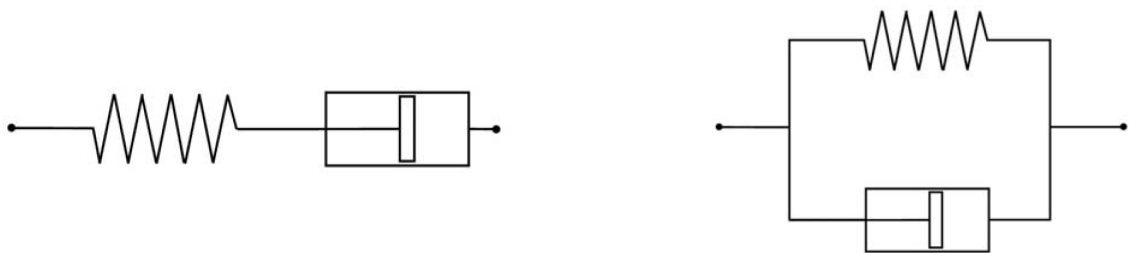


Рисунок 1.5 — Тело Максвелла (слева) и тело Фойхта (справа)

Если тело Фойхта описывает материал с упругим последствием – мгновенной реакцией на возникновение напряжения:

$$\sigma = E\varepsilon + \eta\dot{\varepsilon},$$

то тело Максвелла – материал с мгновенной реакцией:

$$\dot{\sigma} = E\dot{\varepsilon} - \frac{\sigma}{\tau}.$$

В данной работе использовалась модель Максвелла, для уравнений типа 1.3 она заключается в добавлении вязкостных сил \mathbf{F} :

$$\mathbf{F} = -\frac{\sigma}{\tau_0},$$

где τ_0 – время релаксации.

1.5 Композиционные материалы

Композиционные материалы всё активнее используются в различных областях техники. Теория таких материалов уже весьма обширна, хотя и далека от завершения [16].

Одна из областей внедрения композиционных материалов – авиационная промышленность [1]. Волокнистые полимерные композиционные материалы используются для замены традиционных алюминиевых компонентов обшивки самолёта. Материал волокон – углепластик, материал матрицы (вторая фаза композита, склеивающая первую) – эпоксидная смола.

В данной работе моделируется распространение волн в образцах из таких композиционных материалов, но учёта внутренней структуры – волокон и матрицы – не производится, так как вычислительно не осуществимо в макроскопическом масштабе. Учитывается только многослойность композитных панелей и орторомбическая 1.6 анизотропия материала её отдельных слоёв.

1.6 Некоторые полезные формулы

Остановимся на нескольких формулах, используемых в данной работе.

1.6.1 Преобразование тензора упругих постоянных при повороте

Для расчёта анизотропных материалов важно получить формулу преобразования тензора упругих постоянных \mathbf{q} при повороте материала относительно системы координат, чтобы иметь возможность рассчитывать конфигурации с несколькими слоями материала с разными направлениями главных осей.

Пусть $\theta_x, \theta_y, \theta_z$ – углы поворота материала вокруг соответствующих осей. Имеем матрицы поворотов $\mathbf{G}_x, \mathbf{G}_y, \mathbf{G}_z$. Например, \mathbf{G}_x :

$$\mathbf{G}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_x & -\sin \theta_x \\ 0 & \sin \theta_x & \cos \theta_x \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Итоговая матрица преобразования будет их произведением. Если поворот производился сначала вокруг z , потом вокруг y , потом вокруг x , то итоговая матрица будет:

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_x \mathbf{G}_y \mathbf{G}_z,$$

а выражение для тензора упругих постоянных q_{ijkl} при таком повороте определяется правилом преобразования тензоров:

$$q_{mnpq} = \sum_{i,j,k,l=1}^3 G_{mi} G_{nj} G_{pk} G_{ql} q_{ijkl}. \quad (1.15)$$

Отсюда несложно восстановить матрицу упругих коэффициентов 1.5.

1.6.2 Соотношения для амплитуды волны при прохождении границы раздела двух сред

Для верификации численных решений необходимы формулы для коэффициентов отражения и прохождения на контактных границах. Для модели акустики всё необходимое для их вывода есть в [17], приведём здесь в сокращённом виде решение для получения окончательного вида формул и иллюстрации некоторых нюансов.

Введём функцию потенциала φ из условия

$$\vec{v} = \nabla\varphi. \quad (1.16)$$

Тогда из уравнения 1.12 при отсутствии массовых сил и вязкости получим, что

$$p = -\rho\dot{\varphi}, \quad (1.17)$$

а само уравнение запишется в классическом виде:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} = c^2\Delta\varphi, \quad (1.18)$$

где $c = \sqrt{K/\rho}$ – скорость звука.

Таким образом, решение уравнения описывается одной переменной φ вместо четырёх. Рассмотрим задачу прохождения плоской волны под углом через контакт двух плоских поверхностей, рисунок 1.6.2.

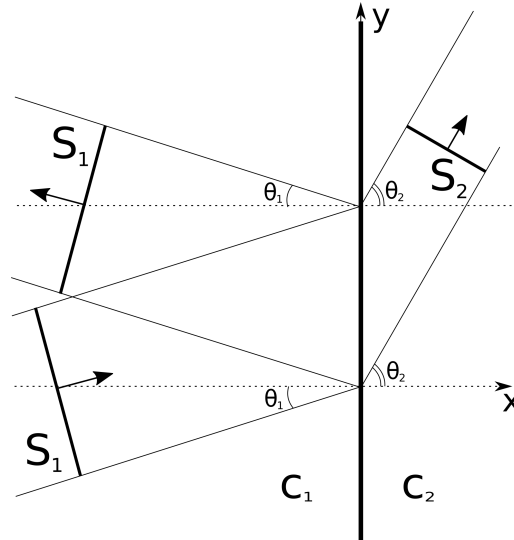


Рисунок 1.6 — К прохождению плоской волны через плоскую границу раздела

Выражение для потенциала плоской монохроматической волны в комплексном выражении:

$$\varphi = A \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)), \quad (1.19)$$

где \vec{k} – волновой вектор, $|\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$, запишем для трёх волн: падающей φ_1 , отражённой φ_1' и прошедшей φ_2 , задав систему координат, как показано на рисунке:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= A_1 \exp\left(i\omega\left(\frac{x}{c_1}\cos\theta_1 + \frac{y}{c_1}\sin\theta_1 - t\right)\right), \\ \varphi_1' &= A_1' \exp\left(i\omega\left(-\frac{x}{c_1}\cos\theta_1 + \frac{y}{c_1}\sin\theta_1 - t\right)\right), \\ \varphi_2 &= A_2 \exp\left(i\omega\left(\frac{x}{c_2}\cos\theta_2 + \frac{y}{c_2}\sin\theta_2 - t\right)\right). \end{aligned}$$

Из неизменности компоненты волнового вектора вдоль границы раздела сред k_y следует закон Снелиуса:

$$\frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = \frac{c_1}{c_2},$$

следствием которого в том числе является наличие угла полного внутреннего отражения: если $c_1 < c_2$, то при критическом угле $\theta_1 = \arcsin(\frac{c_1}{c_2})$ угол прохождения θ_2 составит $\frac{\pi}{2}$. А это означает, что площадь S_2 ширины пучка, прошедшего во вторую среду, станет равной нулю, то есть во вторую среду ничего не проходит (если рассуждать не в приближениях пучков, а в терминах бесконечных плоских волн, то S_2 надо просто заменить на S_2/S_1).

Применим при $x = 0$ граничные условия – равенство давлений p и нормальных компонент скорости v_x . С учётом выражений 1.16 и 1.17 после подстановки выражений для потенциалов и дифференцирования получим:

$$\begin{aligned} -\rho_1(\dot{\varphi}_1 + \dot{\varphi}'_1) &= -\rho_2\dot{\varphi}_2, \\ \varphi_1 \frac{\cos\theta_1}{c_1} - \varphi'_1 \frac{\cos\theta_1}{c_1} &= \varphi_2 \frac{\cos\theta_2}{c_2}. \end{aligned}$$

Упрощаем и подставляем выражения для потенциалов:

$$\begin{aligned} (A_1 - A'_1) \frac{\cos\theta_1}{c_1} &= A_2 \frac{\cos\theta_2}{c_2}, \\ \rho_1(A_1 + A'_1) &= \rho_2 A_2. \end{aligned}$$

После решения системы имеем:

$$\begin{aligned} \frac{A'_1}{A_1} &= \frac{\rho_2 c_2 \cos\theta_1 - \rho_1 c_1 \cos\theta_2}{\rho_2 c_2 \cos\theta_1 + \rho_1 c_1 \cos\theta_2}, \\ \frac{A_2}{A_1} &= \frac{2\rho_1 c_2 \cos\theta_1}{\rho_2 c_2 \cos\theta_1 + \rho_1 c_1 \cos\theta_2}. \end{aligned} \tag{1.20}$$

Для плоской волны выражения 1.16 и 1.17 дают:

$$\begin{aligned} p &= \rho i \varphi \omega, \\ \vec{v} &= \frac{1}{c} i \varphi \omega \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}. \end{aligned}$$

Отсюда соотношения для амплитуд давления и скорости в рассматриваемых трёх волнах:

$$\begin{aligned}\frac{p_1'}{p_1} &= \frac{A_1'}{A_1}, \\ \frac{v_1'}{v_1} &= \frac{A_1'}{A_1}, \\ \frac{p_2}{p_1} &= \frac{\rho_2 A_2}{\rho_1 A_1}, \\ \frac{v_2}{v_1} &= \frac{c_1 A_2}{c_2 A_1}.\end{aligned}\tag{1.21}$$

Проверим выполнение закона сохранения энергии. В плоской волне 1.19 плотность потока энергии q определяется выражением [17]:

$$q = c\rho v^2 = \omega^2 \frac{\rho}{c} A^2.\tag{1.22}$$

Отсюда отношения для плотностей потока энергии:

$$\begin{aligned}R &= \frac{q_1'}{q_1} = \left(\frac{A_1'}{A_1}\right)^2, \\ T &= \frac{q_2}{q_1} = \frac{\rho_2 c_1}{\rho_1 c_2} \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^2.\end{aligned}\tag{1.23}$$

Для записи закона сохранения энергии нужно умножить плотность потока на площадь:

$$1 \cdot S_1 = R \cdot S_1 + T \cdot S_2.\tag{1.24}$$

С учётом $\frac{S_1}{S_2} = \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2}$, подставляя все значения, получаем тождество. Учёт площади в этом выражении легко упустить по невнимательности, а он очень важен для некоторых полуаналитических методов типа метода распространения лучей.

Для модели упругости уже в простейшем случае изотропного материала те же вычисления намного более громоздки, хотя по сути аналогичны модели акустики. Больше количество переменных и наличие поперечных волн добавляет разнообразия в набор возможных конфигураций отражения. Основную идею вывода коэффициентов для этого случая можно найти в [18], а в окончательные формулы – в [19]. Здесь же приведём для справки только соотношения

для нормального падения продольной волны на границу раздела:

$$\frac{\sigma_r}{\sigma_i} = \frac{Z - Z_0}{Z + Z_0}, \quad (1.25)$$

$$\frac{v_r}{v_i} = \frac{Z_0 - Z}{Z + Z_0}, \quad (1.26)$$

$$\frac{\sigma_t}{\sigma_i} = \frac{2Z}{Z + Z_0}, \quad (1.27)$$

$$\frac{v_t}{v_i} = \frac{2Z_0}{Z + Z_0}, \quad (1.28)$$

где $Z = \sqrt{E\rho}$ – акустический импеданс среды, индексом i отмечены начальные амплитуды волны в среде с Z_0 , индексом t – амплитуды волн, прошедших в среду с импедансом Z , индексом r – амплитуды отражённых волн.

Глава 2. Численный метод – общие замечания

Детали основного численного метода данной работы – сеточно-характеристического – будут изложены в следующей главе, здесь же остановимся на некоторых общих замечаниях.

2.1 Эйлеров и Лагранжев подход к описанию сплошной среды

Для наглядности рассмотрим одномерную задачу (вдоль оси x) линейной упругости.

Запишем для частицы среды массой dm и объёмом Sdx второй закон Ньютона:

$$dm \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_{particle} = - (\sigma(x) - \sigma(x + dx)) S = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)_t S dx. \quad (2.1)$$

Выражение $\left(\frac{\partial}{\partial a} \right)_b$ означает дифференцирование по a при постоянном b . Здесь существенно, что $\left(\frac{\partial}{\partial t} \right)_{particle}$ означает дифференцирование по времени в фиксированной частице вещества, но не (!) в фиксированной координате пространства. Получаем:

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)_{particle} = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)_t. \quad (2.2)$$

Теперь введя ε – относительное изменение длины:

$$\varepsilon = \frac{\Delta_x(x + dx) - \Delta_x(x)}{dx} = \left(\frac{\partial \Delta_x}{\partial x} \right), \quad (2.3)$$

где Δ_x – малое отклонение частицы вещества от положения равновесия, запишем закон Гука:

$$\sigma = E \left(\frac{\partial \Delta_x}{\partial x} \right). \quad (2.4)$$

Производя дифференцирование по времени опять же в фиксированной частице вещества, получаем:

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} \right)_{particle} = E \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)_t. \quad (2.5)$$

В полученной системе из двух уравнений сплошной среды

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{particle} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x}\right)_t, \quad (2.6)$$

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial t}\right)_{particle} = E \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_t \quad (2.7)$$

производная при постоянстве частицы $\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{particle}$ в различных системах координат будет записываться по-разному. Есть два основных подхода – так называемые Эйлеров и Лагранжев [10].

Эйлеров подход – когда система координат (обозначим её x) выбирается жёстко связанной с неподвижным пространством. Тогда дифференцирование при фиксированной частице *particle* записывается следующим образом:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{particle} = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_x + \left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)_{particle} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_t = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_x + v_{particle} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)_t, \quad (2.8)$$

а уравнения принимают вид (здесь уже в привычном понимании частная производная по x берётся при постоянном t , а по t – при постоянном x):

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + v \frac{\partial \sigma}{\partial x} = E \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (2.10)$$

Очевидный недостаток такого подхода – нелинейность полученных уравнений. Члены $v \frac{\partial}{\partial x}$ ещё называются конвективными, так как по сути обусловлены переносом вещества. Вместе с тем интерпретация результатов здесь наиболее прямолинейна, так как все величины указаны в неподвижной системе отсчёта.

Лагранжев подход, напротив, описывает движение в системе координат движущейся среды – система координат (обозначим её ξ) жёстко связана с самой средой ("вморожена" в неё в начальный момент времени, то есть фиксация ξ есть не что иное, как фиксация частицы). Уравнения принимают вид:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = E \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (2.12)$$

Отметим, что в правой части стоит именно производная по пространственной переменной x , а не по ξ .

Преимущество Лагранжева подхода – линейность полученных уравнений (это утверждение относится, естественно, только к данной конкретной физической модели) – благодаря выбору системы отсчёта конвективные члены отсутствуют. Вместе с тем при интерпретации результатов следует учитывать, что все величины определены относительно движущейся среды. В численных методах это выражается в необходимости движения расчётной сетки.

Помимо названных основных двух подходов в численных методах существуют и различные их комбинации, однако здесь останавливаться на них не будем.

Решение данной системы уравнений в случае Лагранжевого описания может быть получено аналитически переходом к инвариантам Римана и представляет собой сумму двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях с одинаковой постоянной скоростью $c = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$:

$$\begin{cases} w_1(x,t) = w_1(x - ct, 0) \\ w_2(x,t) = w_2(x + ct, 0), \end{cases} \quad (2.13)$$

В Эйлеровом описании аналитическое решение в общем случае не записывается. В каждый отдельный момент времени в каждой отдельной точке пространства это две волны со скоростями $v(x,t) \pm c$. Из-за зависимости скоростей волн от скоростей частиц среды скорости этих "волн" непрерывно меняются от точки к точке. Подробная теория этого вопроса изложена в [20]. Однако в случае равенства одного из инвариантов Римана нулю в начальный момент времени получаем классическое одномерное квазилинейное уравнение. Его решение формально можно записать в виде

$$w(x,t) = w(x - (c + v)t, 0), \quad (2.14)$$

где w – не равный нулю инвариант. Так как здесь v выражается через w , данное решение нельзя непосредственно вычислить. Однако на малом промежутке времени его можно сколь угодно точно приблизить, к примеру, итерационным методом, что даёт возможность использовать его для сравнения и оценки порядка точности некоторых численных методов.

Такое отличие в решениях в Эйлеровом и Лагранжевом подходах, конечно, объясняется использованием различных систем координат, при переходе к одной системе они эквивалентны. А важным частным случаем является ситуация, когда скорость движения вещества пренебрежимо мала по сравнению со

скоростью звука. В этом случае мы можем, с одной стороны, вычеркнуть конвективные члены в (2.9) и (2.14), а с другой стороны, пренебречь движением вещества (расчётной сетки) и отождествить его с неподвижным пространством в (2.11) и (2.13). В обоих случаях получаем одно и то же. Именно в таких предположениях записана система (1.3).

В данной работе отдано предпочтение Лагранжеву подходу, так как он более естественен для моделирования твёрдых тел, в то время как Эйлеров больше подходит для расчётов в механике газа и жидкости. Кроме того, согласно замечанию выше, в случае малости скорости вещества по сравнению со скоростью звука движение расчётной сетки вообще не производится. Это вполне согласуется с условиями задач неразрушающего контроля, в которых основное внимание уделяется именно волновой картине в деформируемом твёрдом теле, а не пренебрежимо малому движению вещества в пространстве.

2.2 Расщепление по физическим процессам

В задачах, исследуемых в данной работе, имеют место следующие явления:

- распространение упругих волн в твёрдых телах
- движение частиц вещества этих тел вследствие распространения в них возмущений
- пластическое течение материала этих тел в случае превышения некоторого порога по напряжениям
- затухание упругих возмущений вследствие вязкости

Если первое явление, будучи основной темой данной работы, учитывается во всех рассматриваемых в ней задачах, то остальные, в зависимости от постановки, могут быть выброшены из рассмотрения как несущественные.

Возникает, однако, вопрос, как моделировать более одного физического явления одновременно. Совмещение их всех в одну систему уравнений, во-первых, приведёт к неоправданному её усложнению, а во-вторых, усложнит исследование каждого явления по отдельности.

Ответом [15] является так называемое расщепление по физическим процессам. Каждый временной шаг численного метода разделяется на отдельные

ступени, отвечающие за своё явление. К примеру, сначала рассчитывается распространение упругих волн, затем вычисляется вязкостное затухание, а затем узлы расчётной сетки сдвигаются согласно полученной в них скорости.

Расчёт распространения упругих волн рассмотрен в отдельной главе 3. В оставшихся параграфах данной главы разберём остальные три явления.

2.3 Движение расчётной сетки в Лагранжевом подходе

При реализации движения расчётной сетки в Лагранжевом подходе к моделированию сплошной среды возникает две основные проблемы:

- Вырождение (а иногда и самопересечение) ячеек сетки вследствие движения узлов
- Уменьшение порядка точности численного метода при движении сетки

Первый вопрос решается перестроением расчётной сетки при уменьшении минимального размера ячейки ниже определённого порога. Некоторые подходы для треугольных и тетраэдральных сеток могут быть найдены в [21] и [22]. Они основаны на том, что сетка всё время поддерживается в состоянии корректной триангуляции Делоне, математическим следствием чего является отсутствие вырожденных ячеек.

В данной работе, однако, вопрос перестроения сетки подробно не изучался. В случае достаточно малых скоростей вещества и шага по времени, как правило, не происходит вырождения ячеек.

Подробнее остановимся на второй проблеме – сохранении порядка точности расчёта при движении узлов сетки. Само по себе движение сетки несложно реализовать с первым или большим порядком точности. Для первого порядка точности достаточно в конце каждого шага по времени (или в начале, что то же самое, если учесть, что за данным шагом идёт следующий) перемещать узлы сетки на расстояние $x_{n+1} - x_n = v_{n+1}\tau$ или $v_n\tau$. Для второго порядка точности необходимо хранить значение скорости на предыдущем слое по времени, что позволит определить ускорение и учесть его при перемещении узла: $x_{n+1} - x_n = v_{n+1}\tau + \frac{\tau^2}{2}a_{n+1}$.

Однако учёта ускорения не будет достаточно для достижения всем методом в целом второго порядка точности. Чтобы понять проблему, стоит

взглянуть на процесс переноса узлов расчётной сетки как на одну из ступеней расщепления по физическим процессам. Случай обычного "расщепления" показан на рисунке 2.1, а.

Для того, чтобы расчёт целиком проходил со вторым порядком точности по времени, необходимо осуществить более симметричное расщепление, чем вышеописанное. Его схема показана на рисунке 2.1, б. На очередном шаге сначала за половинное время $\tau/2$ со вторым порядком точности перемещаются расчётные узлы. Для этого приходится рассчитать скорости в узлах в момент $t_n + \tau/2$. После этого производится расчёт скоростей и напряжений на новом слое t_{n+1} . При этом для аппроксимации берутся значения скоростей и напряжений в t_n , а координаты узлов – только что пересчитанные. После этого окончательно сдвигается сетка.

Описанный метод вычислительно сложнее, однако только он даёт действительно второй порядок точности, что было проверено экспериментально исследованием сходимости при измельчении сетки, а также заметно визуально по размытию волновых фронтов при расчётах на подвижной сетке, графики представлены в секции результатов 5.1.3. Математического обоснования этого факта получено не было, однако интуитивно понятно, что он связан с большим пересечением двух ступеней расчёта, когда для вычисления одной ступени берутся значения с полушага другой. Причём если смотреть не на один шаг по времени, а на их последовательность, то видно, что это делается симметрично для обеих ступеней.

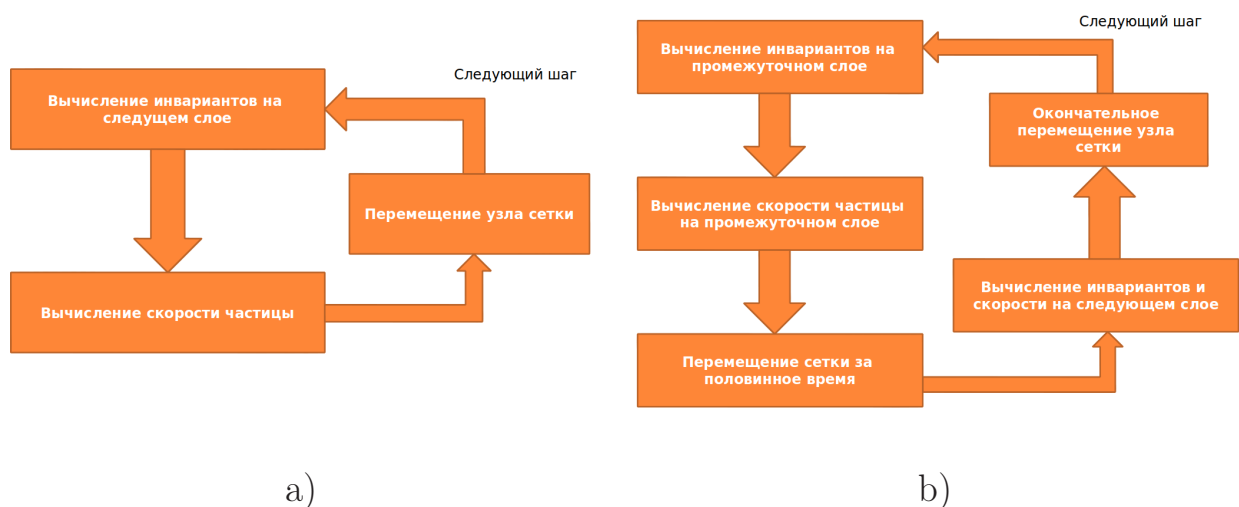


Рисунок 2.1 — Две схемы расщепления на процессы распространения упругих волн и переноса частиц вещества а) первого, б) второго порядка точности.

2.4 Моделирование пластической реологии

Пластическое течение материала моделируется введением пластического корректора как отдельной ступени на каждом шагу по времени. Простейшая версия такого корректора – правило Уилкинса [23], реализующее модель идеально-пластического течения без упрочнения. Оно заключается в следующем.

Рассчитанные на предыдущей ступени данного шага по времени компоненты тензора напряжений проверяются на выход за поверхность текучести, то есть на переход материала из упругого в пластический режим. В случае выхода за поверхность текучести $f(\sigma_{ij}) \geq 0$ (см. 1.13) компоненты тензора напряжений возвращаются на неё путём умножения на нормировочный коэффициент:

$$s_{ij}^{n+1} = s_{ij}^e \frac{k_F}{J_2^e} \quad (2.15)$$

$$J_2 = \sqrt{\frac{1}{2} s_{ij} s_{ij}}, \quad (2.16)$$

благодаря чему обеспечивается выполнение критерия Мизеса.

Отметим одну деталь реализации такого корректора. Помимо упомянутого расщепления по физическим процессам, ниже будет показано \exists , что при расчёте ступени, отвечающей за распространение упругих волн, производится ещё и так называемое расщепление по пространственным направлениям. Число ступеней в нём равно размерности пространства. Как показали численные эксперименты, лучший результат даёт применение пластического корректора после каждой ступени упругого расчёта, чем единичное применение после всех ступеней.

2.5 Моделирование вязкой реологии

Вязкость материала моделируется в рамках простейшей максвелловской модели 1.4.

После расщепления по физическим процессам 2.2 в уравнении 1.3 на долю ступени расчёта, связанной с вязкостью, остаётся только обыкновенное диффе-

ренциальное уравнение:

$$\dot{v}_i = 0 \quad (2.17)$$

$$\dot{\sigma}_{ij} = F_{ij} = -\frac{\sigma_{ij}}{\tau_0}, \quad (2.18)$$

которое к тому же может быть аналитически проинтегрировано. Поэтому ступень шага по времени, связанная с вязкостью, в данной модели сводится просто к домножению компонент тензора напряжений на множитель затухания:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij} \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_0}\right), \quad (2.19)$$

где τ – шаг по времени, τ_0 – постоянная релаксации материала.

Такая коррекция проводится после ступени упругого расчёта один раз за шаг по времени.

Глава 3. Сеточно-характеристический метод

В данной главе речь пойдёт об основном численном методе данной работы – сеточно-характеристическом (СХМ), причём рассматривается только линейная волновая часть более общей задачи, поставленной в предыдущей главе. Движение расчётной сетки, учёт вязкости и пластичности в реологии материалов, а также сам по себе вопрос расщепления исходной задачи на названные ступени уже были рассмотрены выше.

В наиболее общей постановке и с иллюстрацией множества приложений СХМ изложен его создателями в [2]. К волновым уравнениям механики упругого тела СХМ впервые применён в [24]. На периодических гексагональных сетках СХМ применяется с большим успехом: получены высокие порядки аппроксимации, благодаря явности метода он эффективно распараллеливается, что позволяет проводить расчёты высокого разрешения, а использование иерархических сеток позволяет моделировать неоднородности масштаба много меньшего, чем масштаб исходной задачи [25–27]. Однако данный подход рассчитан на применение в областях относительно простой формы.

Для расчётов в областях произвольной формы применяются непериодические треугольные в 2D и тетраэдральные в 3D сетки. Основная идея реализации метода на треугольных сетках предложена ещё в [2], но впервые реализована с рассмотрением всех нюансов, по-видимому, в [28]. С тех пор проведено много успешных расчётов СХМ на тетраэдральных сетках [29; 30], однако к обоснованию и устойчивости метода остаётся ещё много вопросов, которым и будет в основном посвящена данная глава.

3.1 Запись уравнений для применения СХМ

Обсудим общий вид системы уравнений, к которому она должна быть приведена для применения к её численному решению СХМ.

В произвольной D -мерной области ($D = 2, 3$) решается система уравнений в частных производных гиперболического типа:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \sum_{i=1}^D \mathbf{A}_i \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_i} = 0. \quad (3.1)$$

Здесь $\{x_1, \dots, x_D\}$ – декартова система координат с ортонормированным базисом, $\vec{u} = \vec{u}(t, x_1, \dots, x_D)$ – вектор неизвестных размерности N , матрицы \mathbf{A}_i считаются постоянными по времени и пространству. Кроме того, ставятся начальные условия – значения \vec{u} во всей области интегрирования в нулевой момент времени и граничные условия – некоторое количество скалярных условий на \vec{u} на границе области интегрирования в любой момент времени.

Конкретный вид матриц и физический смысл уравнений можно даже не уточнять. Единственное условие – матрицы должны быть диагонализуемы с полным набором собственных векторов, и для каждого ненулевого собственного значения должно быть равное по модулю с противоположным знаком. Эти требования означают, фактически, то, что система уравнений описывает некий волновой процесс. Количество независимых скалярных граничных условий на \vec{u} равно количеству положительных (отрицательных) собственных значений матрицы \mathbf{A}_i , которое в дальнейшем обозначим за M .

Ниже для иллюстрации будут использоваться модели изотропного линейно-упругого тела и акустики, описанные в главе 1.

3.1.1 Вид системы уравнений для модели линейно-упругого тела

Уравнения распространения волн для модели линейно-упругого тела в общем виде (1.3) для применения сеточно-характеристического метода должны быть, во-первых, переписаны в виде (3.1), а во-вторых, как будет показано ниже, должно быть получено спектральное разложение полученных в (3.1) матриц в виде (3.9).

Для случая изотропного материала (1.11) это было сделано в [28]. Отметим, что там они выписаны в том числе для случая, когда направления, вдоль которых действуют матрицы \mathbf{A}_i , не совпадают с системой координат, по кото-

рой раскладываются вектор скорости и тензор напряжения, что существенно для излагаемого ниже метода.

Для произвольного анизотропного материала (1.3) выписать в явном виде спектральное разложение матриц \mathbf{A}_i удаётся только в вырожденных случаях совпадения, во-первых, главных осей материала с осями системы координат, по которой раскладываются вектор скорости и тензор напряжения, во-вторых, совпадения с этой же системой координат направления действия самих матриц. В иных случаях работают или полуаналитические методы, или численное разложение, более подробно об этом в [31].

Ввиду громоздкости получаемых формул переписывать их здесь не будем, а укажем лишь состав переменных. В качестве вектора решения \vec{u} используются значения компонент скорости \vec{v} и тензора напряжений σ . В трёхмерном пространстве это составляет $N = 9$ независимых переменных:

$$\vec{u} = (v_x, v_y, v_z, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zz})^T. \quad (3.2)$$

Число положительных (отрицательных) собственных значений матрицы \mathbf{A}_i в этом случае составляет $M = 3$, что соответствует одной продольной волне сжатия-разрежения (р-волна) и двум взаимно перпендикулярным поперечным волнам сдвига (s-волны).

В двумерном приближении число независимых переменных сокращается до $N = 5$:

$$\vec{u} = (v_x, v_y, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{yy})^T, \quad (3.3)$$

а $M = 2$ – одна р-волна и одна s-волна.

В одномерном приближении $N = 1$:

$$\vec{u} = (v_x, \sigma_{xx})^T, \quad (3.4)$$

а $M = 1$ – одна р-волна.

3.1.2 Вид системы уравнений для модели акустики

Спектральное разложение для уравнений акустики 1.2.4 также было представлено в [28] для произвольного направления действия матриц. Приведём его

здесь, так как оно намного компактней разложения для модели упругости и при этом очень наглядно иллюстрирует идею.

В виде (3.1) уравнение (1.12) запишется, если ввести вектор решения \vec{u} размерности $N = D + 1$ в виде:

$$\vec{u} = (\vec{v}^T, p)^T. \quad (3.5)$$

В явном виде выписывать матрицы \mathbf{A}_i нет смысла, достаточно записать их действие на вектор решения \vec{u} :

$$\mathbf{A}_i \vec{u} = \begin{pmatrix} (p/\rho) \cdot \vec{l}_i \\ K \cdot (\vec{l}_i \cdot \vec{v}) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

где \vec{l}_i – единичный вектор вдоль направления действия этой матрицы. К примеру, для матрицы \mathbf{A}_1 , действующей вдоль оси x , он равен $\vec{l}_1 = (1 \ 0 \ 0)^T$ в 3D.

Для получения спектрального разложения запишем уравнение на собственные значения $\mathbf{A} \vec{u} = c \vec{u}$:

$$\begin{aligned} (p/\rho) \cdot \vec{l} &= c \vec{v}, \\ K \cdot (\vec{l} \cdot \vec{v}) &= c p. \end{aligned}$$

После упрощения получим следующие возможные собственные значения:

$$\begin{aligned} c &= \pm \sqrt{\frac{K}{\rho}}, \\ c &= 0, \end{aligned}$$

причём количество нулевых собственных значений равно $D - 1$.

Собственные вектора с точностью до множителя для собственного значения $c = \pm \sqrt{\frac{K}{\rho}}$:

$$(\vec{l}^T, \pm c \rho)^T,$$

а для собственного значения $c = 0$:

$$(\vec{l}^T, 0)^T,$$

где \vec{l} – единичный вектор, перпендикулярный \vec{l} .

Матрица \mathbf{U}^{-1} составляется из собственных векторов, расположенных в столбцах. Для получения \mathbf{U} не обязательно обращать предыдущую, достаточно

решить уравнение на собственные строки $\mathbf{A}^T \vec{u} = c\vec{u}$, не забыв затем отнормировать их для выполнения $\mathbf{U}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{I}$.

Итоговый вид спектрального разложения (3.9) для матрицы вдоль направления \vec{l} для модели акустики в 3D:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{l} & \vec{l} & \vec{l}' & \vec{l}'' \\ c\rho & -c\rho & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{l}^T & \frac{1}{c\rho} \\ \vec{l}'^T & -\frac{1}{c\rho} \\ 2\vec{l}''^T & 0 \\ 2\vec{l}''^T & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Здесь вектора \vec{l} , \vec{l}' , \vec{l}'' образуют ортонормированный базис.

Физический смысл собственных векторов матрицы \mathbf{A} (они же столбцы матрицы \mathbf{U}^{-1}) – значение вектора решения \vec{u} , соответствующее волне, распространяющейся со скоростью, равной его собственному значению. То есть для модели акустики имеем только один тип волн – продольные, в которых направление вектора скорости коллинеарно направлению распространения волны, $M = 1$.

3.2 СХМ на неперидических расчётных сетках

Перейдём непосредственно к описанию метода. Все рассуждения будут вестись в свете применения СХМ к расчёту на неперидических расчётных сетках. Таким образом, они могут быть применены и к перидическим сеткам, но в случае последних метод можно сильно упростить благодаря структурированности геометрии.

Схематично двумерная область интегрирования, покрытая неперидической треугольной сеткой, изображена на рисунке 3.2. Построение треугольных и тетраэдральных сеток в данной работе осуществлялось с использованием сторонних библиотек CGAL [32] и Ani3D [33].

Значения интегрируемой функции в СХМ хранятся в узлах, а не в ячейках расчётной сетки.

Подразумевается, что внутри каждой области интегрирования матрицы \mathbf{A}_i , которые определяются реологией среды, постоянны. Для моделирования

неоднородностей явно выделяются дополнительные области интегрирования, между которыми рассчитывается контакт – взаимозависимые граничные условия для каждой из контактирующих областей.

3.2.1 Расщепление по направлениям

Поскольку классический СХМ, как будет показано в дальнейшем, рассматривает зависимость только от одной пространственной переменной, для численного решения многомерной системы уравнений (3.1) необходимо перейти к решению квазиодномерных систем уравнений вдоль различных направлений в пространстве – так называемое расщепление по направлениям [24]:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \mathbf{A}_i \frac{\partial \vec{u}}{\partial \xi_i} = 0, \quad i = 1 \dots D. \quad (3.8)$$

Здесь под $\{\xi_i\}$ подразумевается произвольный ортонормированный базис, не обязательно совпадающий с $\{x_i\}$ (вид матриц \mathbf{A}_i , конечно, меняется при смене базиса).

В данной работе используется предложенная в [28] экономичная по памяти и вычислительным ресурсам схема расщепления, обладающая при этом близким ко второму порядку точности по времени.

Полный шаг по времени τ решения многомерного уравнения (3.1) состоит из D последовательных ступеней. Каждая последовательная i -я ступень заключается в выполнении численного шага по времени для i -го уравнения (3.8) на то же время τ . В качестве значений старого временного слоя для i -й ступени берётся результат выполнения $(i - 1)$ -й, а результат выполнения последней D -й ступени является решением многомерного уравнения на новом временном слое. Более подробный анализ и исследование порядка точности этой схемы можно найти в указанной работе.

3.2.2 Решение одномерного уравнения

Перейдём к решению одномерного уравнения – ступени расчёта из (3.8). По условию матрицы \mathbf{A}_i диагонализуемы с полным набором собственных векторов:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}. \quad (3.9)$$

Здесь \mathbf{U}^{-1} – матрица собственных векторов, $\mathbf{\Lambda}$ – диагональная матрица собственных значений, \mathbf{U} – матрица собственных строк. Умножив (3.8) слева на \mathbf{U} , внося постоянную матрицу \mathbf{U} под знак дифференциала и обозначая $\vec{r} = \mathbf{U}\vec{u}$ – инварианты Римана, получаем:

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} = 0. \quad (3.10)$$

В новых переменных система распалась на независимые уравнения переноса. Их численное решение заключается в интерполяции значения функции на предыдущем временном слое в точке, где характеристика из узла на новом временном слое пересекает предыдущий. После переноса инвариантов с предыдущего временного слоя на новый производится обратная замена переменных $\vec{u} = \mathbf{U}^{-1}\vec{r}$.

Для полностью одномерного случая сказанное проиллюстрировано на рисунке 3.1.

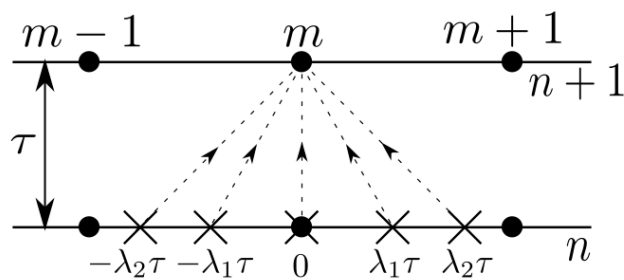


Рисунок 3.1 — Основная идея сеточно-характеристического метода

Для многомерной (для наглядности $D = 2$) неструктурированной расчётной сетки идея расщепления по направлениям и переноса значений инвариантов Римана из точек пересечения их характеристик со старым временным слоем проиллюстрирована на рисунке 3.2.

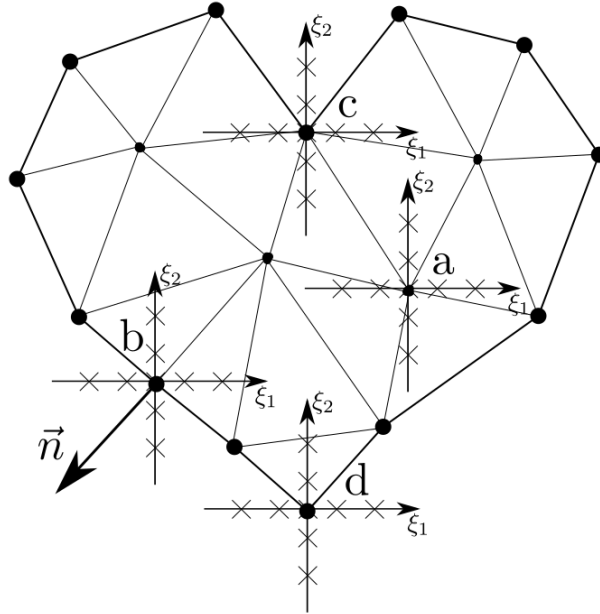


Рисунок 3.2 — Иллюстрация сеточно-характеристического метода на треугольной расчётной сетке

3.2.3 Метод на границе области интегрирования

Описанный выше алгоритм пригоден для внутренних узлов, когда все выходящие из узла на новом временном слое характеристики пересекают предыдущий временной слой внутри области интегрирования, что соответствует случаю а) на рисунке 3.2.

Для граничных и контактных узлов возможна ситуация, когда часть выпущенных из узла характеристик являются внешними, то есть пересекают предыдущий временной слой вне области интегрирования – случаи b), c) и d) на рисунке 3.2. В таких случаях применяется модификация алгоритма, называемая коррекцией внешними волнами.

Поскольку часть характеристик выпадает за пределы области интегрирования и значения соответствующих им инвариантов Римана не могут быть интерполированы и перенесены с предыдущего временного слоя, происходит, фактически, потеря информации. Однако в большинстве случаев эта информация может и должна быть восполнена из заданных граничных и контактных условий.

Рассмотрим сначала случай b), когда число внешних характеристик равно числу независимых скалярных граничных условий M .

Граница области интегрирования

Общая форма записи граничного условия Произвольное линейное граничное условие для произвольной модели в общем виде записывается:

$$\mathbf{V} \cdot \vec{u} = \vec{b}. \quad (3.11)$$

Здесь \mathbf{V} – матрица размерности $M \times N$, \vec{b} – вектор размерности M , определяющие собой конкретный вид граничного условия.

Рассмотрим для примера условие фиксированного напряжения \vec{f} , приложенного к полупространству с внешней нормалью \vec{n} в модели упругого тела:

$$\sigma \cdot \vec{n} = \vec{f}. \quad (3.12)$$

Примем для упрощения формул, что значение \vec{f} указано в глобальном базисе, тогда (3.12) в форме (3.11) для трёхмерного случая запишется в виде:

$$\vec{b} = \vec{f}, \quad (3.13)$$

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n_x & 0 & n_y & n_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n_x & 0 & n_y & n_z \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Другой пример – условие фиксированной нормальной скорости v_n в модели акустики:

$$\vec{b} = (v_n), \quad (3.15)$$

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \vec{n}^T, & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Алгоритм расчёта граничных узлов На первом этапе делается расчёт граничных узлов по алгоритму для внутренних, при этом все инварианты Римана, соответствующие внешним характеристикам, приравниваются к нулю. Получается \vec{u}^{inner} . Затем выполняется граничная коррекция – добавление к результату такой линейной комбинации внешних волн, которая обеспечит выполнение граничного условия (3.11):

$$\mathbf{V} \cdot (\vec{u}^{inner} + \Omega \cdot \vec{\alpha}) = \vec{b}. \quad (3.17)$$

Здесь $\mathbf{\Omega}$ – матрица размерности $N \times M$, в столбцах которой стоят собственные векторы матрицы \mathbf{A} , соответствующие внешним характеристикам. По физическому смыслу эти столбцы можно назвать внешними волнами, то есть фиктивными волнами, как бы пришедшими извне области интегрирования. Вектор $\vec{\alpha}$ размерности M – это вектор коэффициентов линейной комбинации, которые нужно определить.

К примеру, если направление расчёта вдоль оси x , то для трёхмерной модели упругого тела (см. 3.1.1) матрица $\mathbf{\Omega}$ – это три однонаправленных волны вдоль оси x :

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ \frac{\lambda+2\mu}{c_p} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mu}{c_s} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mu}{c_s} \\ \frac{\lambda}{c_p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda}{c_p} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Здесь первый столбец – р-волна, далее – две s-волны, λ, μ – параметры Ламе, $c_p = \sqrt{\frac{\lambda+2\mu}{\rho}}$, $c_s = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ – скорости продольной и поперечной волн.

Другой пример: как было показано в 3.1.2, для модели акустики матрица $\mathbf{\Omega}$ состоит всего из одного столбца – продольной волны вдоль направления расчёта. Если ввести обозначения \vec{l} – единичный вектор вдоль направления расчёта, c – скорость продольной волны, ρ – плотность, то она запишется:

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \vec{l} \\ c\rho \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Для определения $\vec{\alpha}$ необходимо решить СЛАУ с матрицей $\mathbf{B}\mathbf{\Omega}$ размерностью $M \times M$:

$$\mathbf{B}\mathbf{\Omega} \cdot \vec{\alpha} = \vec{b} - \mathbf{B} \cdot \vec{u}^{inner}. \quad (3.20)$$

После определения коэффициентов линейной комбинации производится собственно коррекция, обеспечивающая выполнение граничных условий:

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^{inner} + \mathbf{\Omega} \cdot \vec{\alpha} \quad (3.21)$$

Стоит отметить, что предложенный метод не закладывается на топологию ячейки сетки, то есть может быть применён, к примеру, и к октаэдральным расчётным сеткам.

Контакт двух областей интегрирования

Общая форма записи контактного условия Запись произвольного линейного контактного условия для произвольных моделей:

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A &= \mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B, \\ \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A &= \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B.\end{aligned}\tag{3.22}$$

Здесь обозначения те же, что и в (3.11).

Для примера рассмотрим контактное условие полного сцепления двух упругих тел. Оно означает в точке контакта равенство скоростей:

$$\vec{v}_A = \vec{v}_B\tag{3.23}$$

и равенство сил, действующих на контактную поверхность:

$$\sigma_A \cdot \vec{n} = \sigma_B \cdot \vec{n},\tag{3.24}$$

где \vec{n} – нормаль к поверхности контакта. Все формулы записываются в глобальном базисе. Это означает, что в качестве \mathbf{B}_{2A} и \mathbf{B}_{2B} нужно взять матрицы для граничного условия фиксированного напряжения в глобальном базисе (3.14), а в качестве \mathbf{B}_{1A} и \mathbf{B}_{1B} – матрицы для граничного условия фиксированной скорости в глобальном базисе, которые здесь для краткости приводить не будем.

Другой пример – скольжение двух тел в модели акустики – означает равенство компонент скорости вдоль направления контакта:

$$\vec{v}_A \cdot \vec{n} = \vec{v}_B \cdot \vec{n}\tag{3.25}$$

и равенство давлений:

$$p_A = p_B.\tag{3.26}$$

Здесь также в качестве матриц \mathbf{B} из (3.22) используются матрицы для линейных граничных условий, в том числе (3.16).

Алгоритм расчёта контактных узлов При контакте двух областей интегрирования характеристика из узла одной области может попадать в другую область. Тогда она также считается внешней для своей области. Все действия аналогичны расчёту граничных узлов. Сначала делается расчёт контактных узлов в обоих телах по алгоритму для внутренних. Получается \vec{u}_A^{inner} и \vec{u}_B^{inner} . Затем выполняется контактная коррекция – добавление в обоих узлах такой линейной комбинации внешних волн, которая обеспечит выполнение контактного условия (3.22).

Распишем сообразно сказанному условие (3.22):

$$\mathbf{B}_{1A} \cdot (\vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A) = \mathbf{B}_{1B} \cdot (\vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B), \quad (3.27)$$

$$\mathbf{B}_{2A} \cdot (\vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A) = \mathbf{B}_{2B} \cdot (\vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B). \quad (3.28)$$

Раскроем скобки:

$$(\mathbf{B}_{1A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \vec{\alpha}_A = \mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B^{inner} - \mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A^{inner} + (\mathbf{B}_{1B}\mathbf{\Omega}_B) \cdot \vec{\alpha}_B \quad (3.29)$$

Сделаем переобозначения:

$$\mathbf{R} = (\mathbf{B}_{1A}\mathbf{\Omega}_A)^{-1}, \quad (3.30)$$

$$\vec{p} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B^{inner} - \mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A^{inner}), \quad (3.31)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{B}_{1B}\mathbf{\Omega}_B). \quad (3.32)$$

Тогда:

$$\vec{\alpha}_A = \vec{p} + \mathbf{Q} \cdot \vec{\alpha}_B. \quad (3.33)$$

Подставим в (3.28):

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A^{inner} + (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \vec{p} + (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \mathbf{Q} \cdot \vec{\alpha}_B = \\ = \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B^{inner} + (\mathbf{B}_{2B}\mathbf{\Omega}_B) \cdot \vec{\alpha}_B. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Получим СЛАУ на $\vec{\alpha}_B$:

$$\begin{aligned} \left[(\mathbf{B}_{2B}\mathbf{\Omega}_B) - (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \mathbf{Q} \right] \cdot \vec{\alpha}_B = \\ = (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \vec{p} + \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A^{inner} - \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B^{inner}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Решив систему на $\vec{\alpha}_B$, находим $\vec{\alpha}_A$ из (3.33).

После чего производится собственно коррекция, обеспечивающая выполнение контактных условий:

$$\vec{u}_A^{n+1} = \vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A, \quad (3.36)$$

$$\vec{u}_B^{n+1} = \vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B \quad (3.37)$$

3.2.4 Вырождение матриц СЛАУ граничного и контактного корректора

Описание проблемы

Итак, расчёт граничных узлов по алгоритму 3.2.3 требует решения СЛАУ 3.20, расчёт контактных узлов по алгоритму 3.2.3 требует решения СЛАУ 3.35 и обращения матрицы 3.30. Размерность матриц во все трёх случаях равна $M \times M$, то есть относительно небольшая: для уравнений упругости в D -мерном пространстве размерность $D \times D$, что даёт возможность использовать правило Крамера и другие аналитические формулы, для уравнений акустики размерность 1×1 .

Однако это не снимает вопрос о возможности вырождения этих матриц. Для иллюстрации рассмотрим расчёт граничного узла в трёхмерной модели упругого тела при условии фиксированного напряжения на границе. Все матрицы, необходимые для расчёта по формуле 3.20, уже выписаны: матрица \mathbf{B} в 3.14 и матрица $\mathbf{\Omega}$ в 3.18. Остаётся их перемножить:

$$\mathbf{B}\mathbf{\Omega} = \frac{1}{c_1 c_2} \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu)n_x c_2 & \mu n_y c_1 & \mu n_z c_1 \\ \lambda n_y c_2 & \mu n_x c_1 & 0 \\ \lambda n_z c_2 & 0 & \mu n_x c_1 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

и взять определитель:

$$\det(\mathbf{B}\mathbf{\Omega}) = \frac{\mu^2}{c_1 c_2^2} \cdot n_x \cdot (2(\lambda + \mu)n_x^2 - \lambda). \quad (3.39)$$

Введя обозначение ν – коэффициент Пуассона, из условия $\det(\mathbf{B}\mathbf{\Omega}) = 0$ получаем:

$$\begin{cases} n_x = 0 \\ n_x^2 = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} \equiv \nu < \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (3.40)$$

Здесь направление расчёта выбиралось вдоль оси x , в то время как нормаль к границе была произвольной. Очевидно, что для обобщения условия вырождения для произвольного направления расчёта \vec{l} нужно n_x заменить на $(\vec{n} \cdot \vec{l})$.

Аналогично для модели акустики и граничного условия фиксированной нормальной скорости с учётом 3.16 и 3.19 получаем:

$$\det(\mathbf{B}\Omega) = \mathbf{B}\Omega = (\vec{n} \cdot \vec{l}). \quad (3.41)$$

Условия вырождения матриц СЛАУ граничного корректора для обеих моделей и двух типов граничных условий сведены в таблицу:

Модель	Фиксированная сила	Фиксированная скорость
Упругость 3D	$\begin{cases} (\vec{n} \cdot \vec{l}) = 0 \\ (\vec{n} \cdot \vec{l})^2 = \nu \end{cases}$	-
Упругость 2D	$(\vec{n} \cdot \vec{l})^2 = \nu$	-
Акустика	-	$(\vec{n} \cdot \vec{l}) = 0$

Можно сделать следующие выводы. Во-первых, вырождение матриц граничного и контактного корректоров возможно. Во-вторых, оно далеко не всегда связано с перпендикулярностью направления расчёта и нормали, как это могло бы показаться. В-третьих, можно отметить, что вырождение возможно только тогда, когда в запись граничного условия так или иначе входит значение нормали.

График на рисунке 3.3 показывает рассчитанные значения определителя и числа обусловленности в случаях фиксированного напряжения для трёхмерных уравнений упругости и фиксированной нормальной скорости для уравнений акустики.

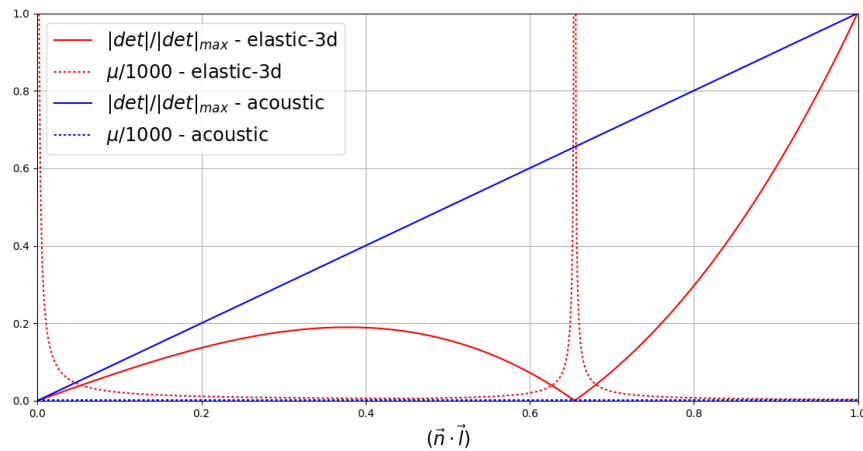


Рисунок 3.3 — К вопросу вырождения матриц граничного корректора

Игнорирование возможности вырождения матриц граничного и контактного корректоров приводит к неустойчивости метода: значения искомой

функции \vec{u} вблизи границы области интегрирования неограниченно возрастают. Для стабилизации необходимы дополнительные усилия.

Контроль определителя и согласованности начальных и граничных условий

Первое очевидное действие – проверка определителя матрицы на близость к нулю. Для двумерной и трёхмерной моделей упругости приближение к нулю определителя сопровождается резким ростом числа обусловленности, и с определённого момента точность решения СЛАУ становится неприемлемой. Для модели акустики, где размерность “матрицы” 1×1 , понятие числа обусловленности теряет смысл, но, тем не менее, необходимо отсечь возможность деления на ноль.

Итак, при достаточной близости детерминанта к нулю нельзя производить коррекцию по изложенной схеме. Означает ли это, что, если в таких случаях вообще не производить коррекцию, граничные или контактные условия по итогам ступени расчёта не будут выполнены?

Когда в 3.2.4 изучается вырожденность матрицы граничного корректора, фактически ищется ответ на вопрос, насколько линейная комбинация внешних волн может повлиять на выполнение граничного условия. Заметим, что “внешние” волны – это однонаправленные волны вдоль направления расчёта, характеристики которых приходят в расчётный узел извне области интегрирования. В противовес им можно выделить “внутренние” – те, что приходят изнутри области. Также заметим, что при выкладках в 3.2.4 тот факт, что комбинация волн является именно “внешней”, а не “внутренней”, не имеет значения. Отсюда ясно, что обусловленность матрицы граничного корректора показывает не только возможность влияния комбинации внешних волн на выполнение граничного условия, но и вообще возможность любых волн вдоль этого направления изменять граничные условия данного типа.

Другими словами, если вдоль данного направления с помощью внешних волн невозможно повлиять на выполнение или невыполнение граничных условий, то и внутренние волны тоже не могут их нарушить. А значит, если

граничные условия в узле уже были выполнены до внутреннего этапа расчёта, то они останутся выполненными и после него, и граничная коррекция не нужна.

Отсюда очевидна необходимая модификация метода. Перед внутренним этапом расчёта граничного узла значения вектора решения \vec{u} в нём сразу “поправляются” так, чтобы выполнялись граничные условия. Причём если граничные условия зависят от времени, то выставляются значения, соответствующие новому, а не текущему, временному слою. Это обеспечивает условие устойчивости метода на границе: на каждой ступени расчёта граничная коррекция производится лишь в том объёме, в котором внутренний этап этой ступени мог нарушить выполнение граничных условий.

Осталось уточнить слово “поправляются”, специально использованное, чтобы отличить эту процедуру от граничной коррекции. Поскольку число независимых скалярных граничных условий на вектор решения M всегда меньше его размерности N , поменять его значения так, чтобы эти условия удовлетворялись, можно бесконечным числом способов, в том числе той же граничной коррекцией. В данном случае делается следующее. Граничные и контактные условия, как правило, определяют некоторые значения вектора решения \vec{u} в локальном базисе, связанном с граничной или контактной поверхностью. Это может быть, к примеру, нормальная к границе области компонента скорости или вектор напряжения, действующего на граничную поверхность. Поэтому наиболее логичным представляется перевести значения \vec{u} в локальный базис, после чего выставить необходимые значения согласно граничным условиям, а затем перейти обратно в глобальный базис. Из всех прочих эта процедура оказывает минимальное влияние на значения вектора решения \vec{u} .

На рисунке 3.4 проведённые рассуждения иллюстрируются для уравнений акустики и граничного условия фиксированной нормальной скорости v_n . Вдоль оси ξ_i с точностью до множителя могут распространяться только два типа волн: $\{\vec{v}_1, -p_1\}$ – сонаправленная с осью ξ_i и $\{\vec{v}_1, p_1\}$ – против оси ξ_i . Возможность этих волн повлиять на нормальную компоненту скорости тем меньше, чем ближе угол между нормалью и направлением расчёта к $\pi/2$, что и отражает условие 3.41. Поэтому чем меньше $|(\vec{n} \cdot \vec{l})|$, тем большая амплитуда внешней волны требуется для удовлетворения граничного условия $(\vec{v} \cdot \vec{n}) = v_n$. С другой стороны, волна, пришедшая изнутри, влияет на граничное условие не сильнее внешней. Поэтому, если ещё до внутреннего этапа расчёта значение нормальной скорости в узле было выставлено согласно граничным условиям, то и величина

границной коррекции будет адекватна величине изменения граничного условия на внутреннем этапе расчёта.

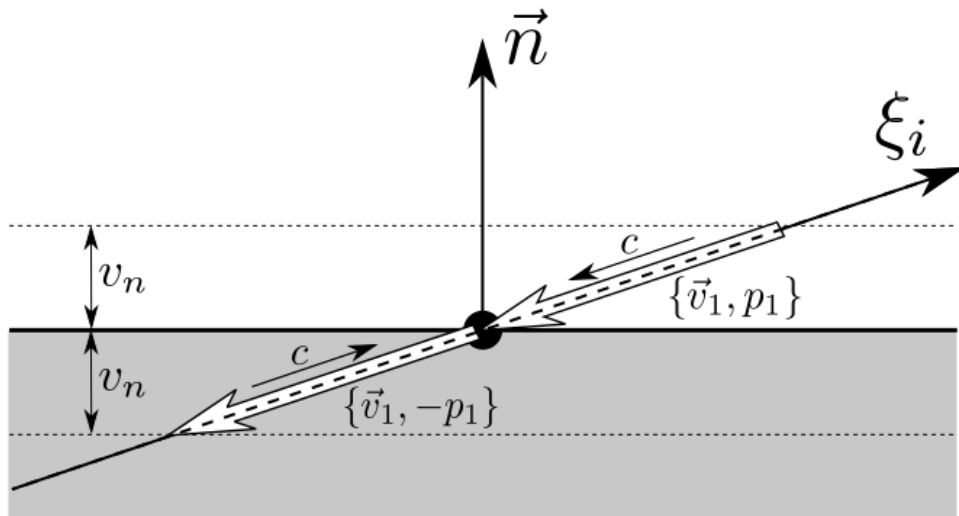


Рисунок 3.4 — К пояснению возможности влияния волн вдоль направления расчёта на выполнение граничных условий

Нежелательные следствия представления значения интегрируемой функции в узлах сетки

Таким образом, возможность вырождения матриц граничного и контактного корректоров требует особого алгоритма и его тонкой настройки на предмет критических значений определителя, хотя и не представляет неразрешимую для метода проблему.

С другой стороны, описанных сложностей вообще можно было бы избежать, если направление, вдоль которого выбираются корректирующие волны, было бы априори сонаправленно с граничной нормалью, так как тогда в таблице в 3.2.4 $(\vec{n} \cdot \vec{l}) = 1$. Это невозможно в СХМ, но реализуется в численных методах, в которых значения интегрируемой функции представляются в ячейках, а не в узлах сетки, и коррекция ведётся по направлению нормали через грани ячеек, таких как методы конечных объёмов или разрывный метод Галёркина.

Заметим также, что выбор граничной нормали в узле сетки сам по себе не однозначен, а в некоторых случаях вообще может терять смысл (см. рису-

нок 3.5). Приведённый пример не надуманный и часто встречается, к примеру, в расчётных сетках, демонстрируемых в разделе результатов, что требует довольно сложных алгоритмов переразметки триангуляции для исключения таких случаев.

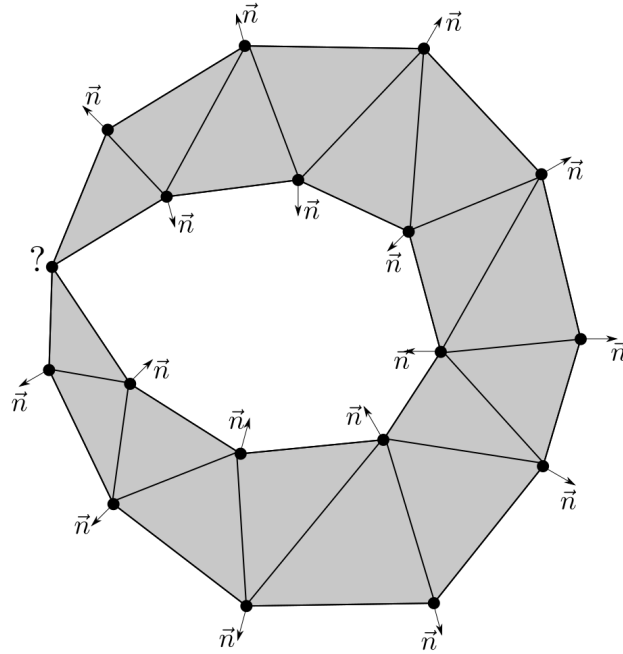


Рисунок 3.5 — Понятие граничной нормали в узле не имеет смысла

Можно отметить и другие преимущества представления значений функции в ячейках, а не в узлах.

Во-первых, отношение числа вершин к числу ячеек в типичных расчётных сетках порядка 1:6 в 3D и порядка 1:2 в 2D, поэтому для одного и того же пространственного разрешения при использовании методов на ячейках можно строить меньшие триангуляции.

Во-вторых, в большинстве случаев изначальная разметка триангуляции по материалам делается по ячейкам, а не по узлам. В связи с этим представление значений интегрируемой функции также в ячейках делает обоснованным так называемый сквозной расчёт областей с различными реологиями, в то время как для обоснованного учёта неоднородностей при хранении значений в узлах требуется выделение контакта областей в явном виде.

3.2.5 Сложные случаи на границе областей интегрирования

В случае b) на рисунке 3.2 количество внешних характеристик для граничного узла равняется количеству независимых скалярных граничных условий. Это означает, с одной стороны, что вся потерянная в результате выпада характеристик из области интегрирования информация компенсируется за счёт граничных условий, а с другой, что имеется достаточное количество внешних волн для выполнения граничной коррекции. При ступени расчёта вдоль направления ξ_1 варианты c) и d) существенно отличаются от b) тем, что в c) отсутствуют внешние волны, с помощью которых была бы возможна граничная коррекция, а в d), напротив, число внешних волн превышает число граничных условий, что приводит к неизбежной потере информации. В этих случаях имеет смысл говорить не о “внешних” и “внутренних” волнах, а о “правых” и “левых”, в зависимости от того, с какой стороны волны приходят в узел вдоль направления расчёта.

Численные эксперименты показали, что для обоих вариантов c) и d) устойчивой является следующая модификация метода. Сначала по общему для всех узлов алгоритму “подправляются” под граничные условия значения вектора решения и делается внутренний этап расчёта. Затем рассчитываются два варианта граничной коррекции: с помощью “правых” и с помощью “левых” групп волн. После чего берётся их полусумма.

Можно было бы возразить, что в варианте c) нет выпавших вне области характеристик, поэтому коррекцию вообще проводить не нужно. Однако граничное условие на внутреннем этапе расчёта могло быть нарушено, а следовательно, коррекция необходима, иначе не будут согласованы граничные и начальные условия на следующей ступени расчёта.

Аналогичные сложности и способы их преодоления существуют и при расчёте контактов двух областей.

Отметим, что предложенные решения являются на самом деле довольно искусственными, и не решают упомянутой проблемы потери информации. На практике это оборачивается тем, что на существенно неструктурированных расчётных сетках в местах, где реализуются описанные сложности, возникают нефизичные возмущения, не убывающие по времени. И это, в отличие от пробле-

мы вырождения матриц корректоров, является принципиальным ограничением метода, связанным в первую очередь с расщеплением по направлениям.

Единственным известным автору средством сглаживания этого эффекта является использование нового базиса $\{\xi_i\}$ на каждом шагу по времени, благодаря чему в проблемных местах сетки возмущения всё же не накапливаются от шага к шагу и не нарастают экспоненциально.

Отдельную проблему представляют случаи контакта в одном узле трёх и более областей интегрирования. Поскольку ограничения на число контактирующих в одном узле тел нет, прямой учёт контакта всех областей потребовал бы чересчур тяжёлого алгоритма. В качестве компромисса между сложностью и обоснованностью подхода можно предложить расчёт многоконтактного узла просто как граничного для каждой контактирующей области.

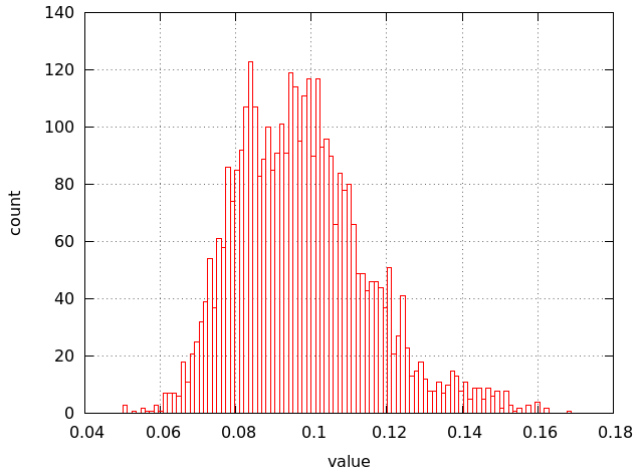
Отметим, что для численных методов, использующих представление значений функции в ячейках, максимальное число областей, контактирующих по одной грани ячейки, равно двум.

3.2.6 Некурантовский шаг по времени

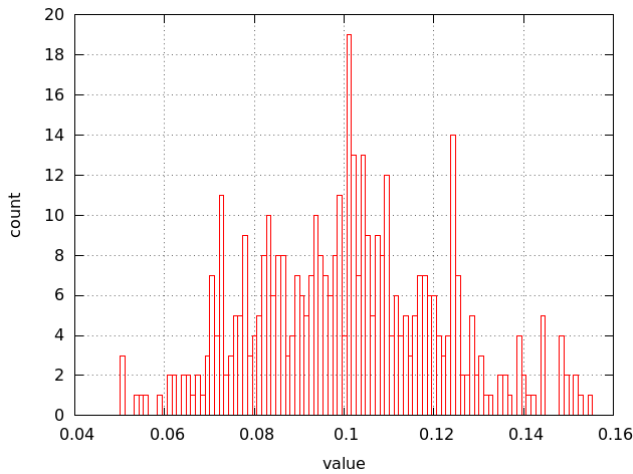
Необходимость расчёта с шагом больше курантовского в 3D

На графиках на рисунке 3.6 представлены распределения значений высот треугольников в двумерных и тетраэдров в трёхмерных типичных неструктурированных сетках. Можно видеть принципиальное различие, заключающееся в том, что для треугольной сетки минимальная высота составляет примерно половину средней высоты, в то время как для тетраэдральной сетки различие минимальной и средних высот составляет несколько порядков, причём такие ячейки представляют собой не единичные выбросы, а вполне систематическое явление.

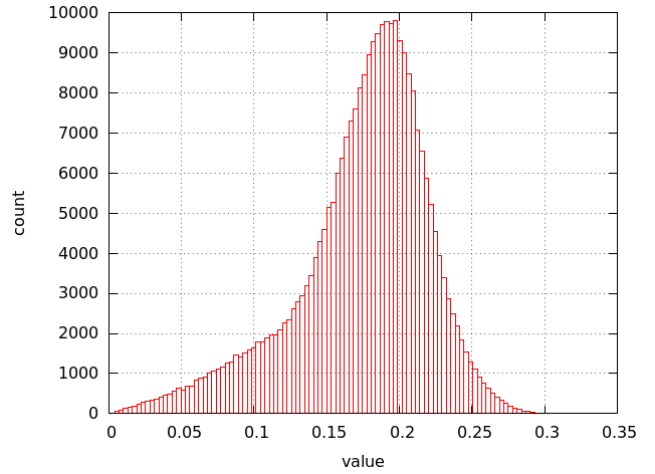
Также видно, что паттерн гистограммы не меняется, если брать в расчёт только граничные ячейки, то есть данное явление имеет место как в объёме, так и на границе расчётной сетки.



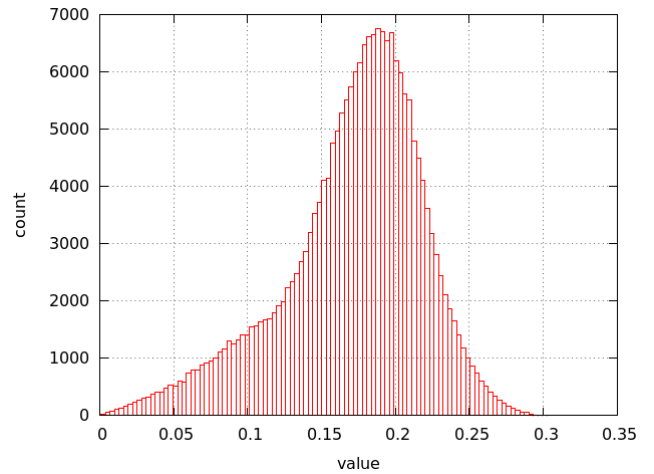
2D все ячейки



2D только граничные ячейки



3D все ячейки



3D только граничные ячейки

Рисунок 3.6 — Гистограммы значений высот ячеек типичных неперiodических треугольных и тетраэдральных расчётных сеток

Причина этого эффекта автору до конца не ясна. Возможно, дело в том, что большинство сеточных генераторов оптимизированы для создания расчётных сеток для использования в методе конечных элементов. Для последнего важно так называемое “aspect ratio” – отношение максимальной длины ребра ячейки к её минимальной высоте, показывающее близость по форме к правильной фигуре – чем меньше “aspect ratio”, тем ближе тетраэдр к правильному, и тем меньше ошибка интерполяции и лучше обусловленность в методе конечных элементов [34].

Поэтому все усилия по созданию алгоритмов генерации сеток направлены на оптимизацию “aspect ratio”. Для СХМ, однако, важна другая величина.

По аналогии с численными методами на регулярных расчётных сетках для неструктурированных сеток также можно ввести понятие условия Куранта

на шаг по времени:

$$\frac{c_{max}\tau}{h_{min}} < 1. \quad (3.42)$$

Здесь под h_{min} понимается минимальная высота ячейки. Отметим, что все предыдущие рассуждения велись в предположении, что это условие выполнено. Отсюда следует, что для СХМ мерой качества сетки является соотношение между минимальной и средней высотой тетраэдра по сетке.

На рисунке 3.2.6 показана корреляция между этими двумя мерами качества для типичной трёхмерной расчётной сетки. Как можно видеть, качество сетки для метода конечных элементов не означает её качественности для СХМ – ячейки с минимальными высотами обладают неплохим “aspect ratio”.

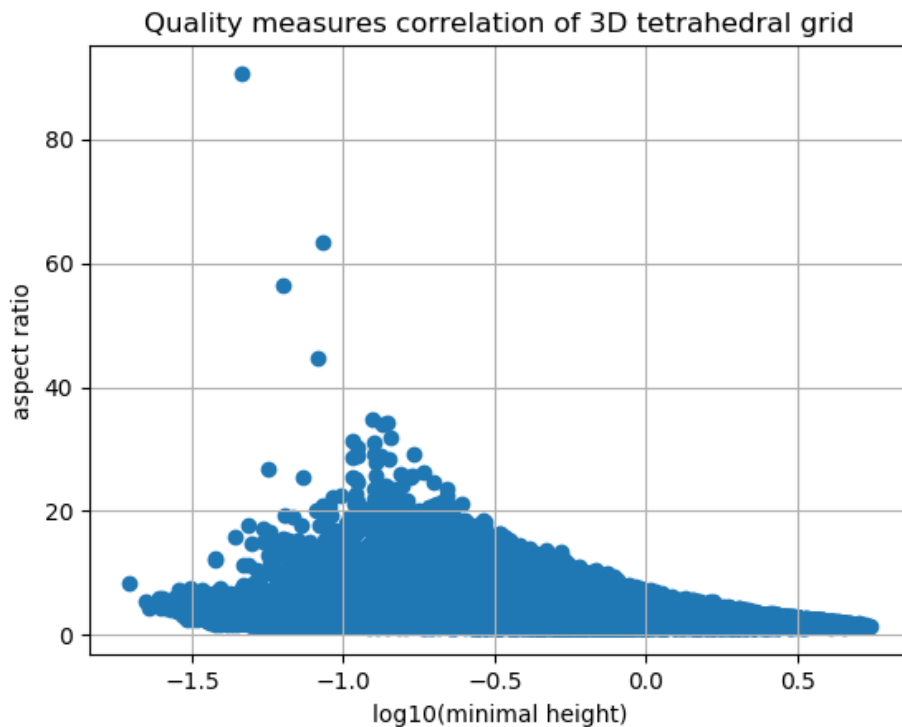


Рисунок 3.7 — Взаимосвязь между двумя показателями качества сетки

Поэтому из рисунка 3.6 очевидно, что для трёхмерных неструктурированных сеток условие Куранта в виде (3.42) невыполнимо из-за большого количества маленьких ячеек при использовании классических сеточных генераторов.

Можно предложить следующие пути решения этой проблемы:

- Переход к неявному методу, не требующему выполнения условия Куранта

- Применение для построения расчётных сеток специальных алгоритмов генерации, которые обеспечат приемлемую минимальную высоту ячейки
- Применение так называемых иерархических шагов по времени, когда в местах малой высоты ячеек используется дробный до нужной малости шаг по времени
- Расчёт с шагом, определяемым 3.42, где в качестве h_{min} берётся не минимальная, а средняя или иная приемлемая высота ячейки

Первые три подхода автором подробно не исследовались, вместе с тем очевидно, что на пути их реализации будут существенные трудности. В данной работе применяется четвёртый подход, в котором величина шага по времени регулируется объективной средней мелкостью расчётной сетки. Интерполяция значения функции на предыдущем временном слое производится при этом, естественно, по той ячейке, в которую попала характеристика, а не по ближайшей к рассчитываемому узлу, поэтому правило Куранта – интерполяция по области зависимости решения – не нарушается, а численные эксперименты доказывают устойчивость такого метода.

Возникающие в связи с этим сложности

Однако при всей простоте у выбранного подхода существует очевидная проблема. Расстояние между узлом и точкой, в которой производится интерполяция, превосходит минимальную высоту ячейки. Поэтому внешние характеристики могут появляться не только у граничных узлов, но и у внутренних (вариант а) на рисунке 3.8).

Модификация метода для внутренних узлов на такой случай была предложена ещё в [2]. Она заключается в том, что инвариант Римана для характеристики, пересекающей границу области интегрирования, интерполируется не на предыдущем временном слое, а в пространстве-времени между двумя слоями с использованием значений в ближайших к точке пересечения граничных узлах на текущем и на новом временных слоях. Граничные узлы при таком подходе, естественно, должны быть рассчитаны до внутренних.

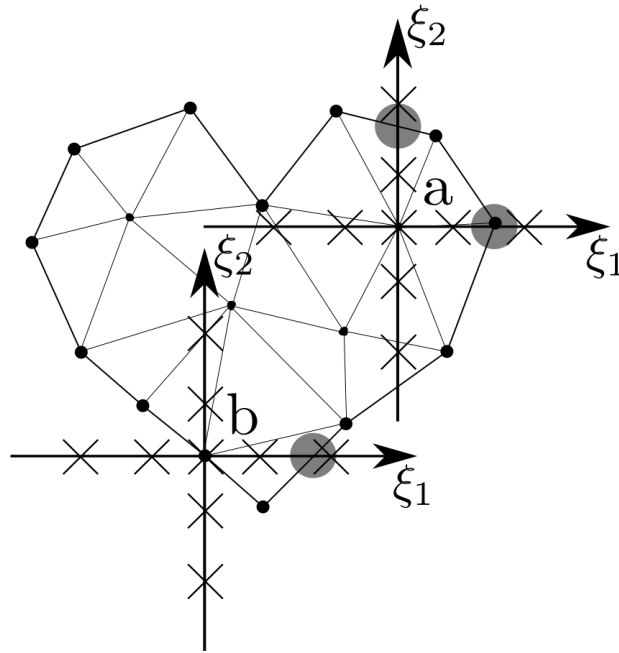


Рисунок 3.8 — Выпадения внутренних характеристик из области интегрирования отмечены серым

У граничных же узлов в достаточно выпуклых углах области интегрирования характеристики, проходя сначала через внутренность области, могут пересекать затем её границу и оказываться внешними. Поэтому у граничного узла может быть, фактически, произвольный набор внешних характеристик (вариант b) на рисунке 3.8). Так же, как и в случаях, описанных в разделе 3.2.5, это приводит к потере информации и нефизичным возмущениям. Применить интерполяцию в пространстве-времени в данном случае нельзя, поскольку нет гарантии, что граничные узлы, по которым должна проводиться интерполяция, уже посчитаны на следующем временном слое.

Можно предложить альтернативный метод: рассчитать значение функции в точке пересечения характеристики с границей как во вспомогательном узле, расположенном между временными слоями, и посчитать затем нужное значение инварианта Римана, который переносится из этой точки в расчётный узел. Возможно, придётся применить эту процедуру рекурсивно, пока все внутренние характеристики из вспомогательных узлов не попадут внутрь области интегрирования.

3.3 Интерполяция в задачах сеточно-характеристического метода

Из описания метода выше следует, что для его реализации необходимо производить интерполяцию значений функции в пространстве между узлами сетки. Причём порядок точности интерполяции будет определять порядок точности метода по пространству.

Как правило, интерполяция проводится в два этапа: сначала полиномом некоторой степени приближается значение функции в искомой точке, затем полученное значение корректируется для устранения нефизичных осцилляций, возникающих в схемах порядка выше первого. Корректировка сводится к применению ограничителя – “лимитера” на полученное значение. Наиболее простой и распространённый вариант – так называемый "minmax" лимитер, который контролирует минимальное и максимальное значения результата интерполяции исходя из значений функции в соседних точках. Другой пример – когда при возникновении осцилляций в данной точке порядок интерполяции понижается до первого. Это так называемые гибридные схемы.

В данной работе используется "minmax" лимитер, так как с ним волновые фронты меньше подвержены сглаживанию, что является важным в задачах моделирования неразрушающего контроля.

3.3.1 Метод интерполяции второго порядка точности на неструктурированной сетке

Для восстановления значения функции в точке пересечения характеристики с предыдущим временным слоем в СХМ используется интерполяция, порядок которой определяет порядок метода по пространству. Большинство известных автору работ по СХМ используют метод интерполяции порядка выше первого, предложенный в [35]. Он заключается во введении на рёбрах треугольника (тетраэдра) дополнительных расчётных узлов, с помощью которых повышается порядок аппроксимации. К достоинствам этого метода следует в первую очередь отнести теоретическую возможность реализации интерполяции произвольного порядка. К недостаткам – усложнение топологии сетки. В дан-

ной работе предлагается альтернативный подход, позволяющий осуществлять интерполяцию второго (но не выше) порядка без введения вспомогательных узлов на рёбрах ячеек.

Интерполяция с точки зрения барицентрических координат

Введём барицентрические координаты $\lambda_i(\vec{x})$ точки \vec{x} в треугольнике с вершинами $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$ из условия:

$$\vec{x} = \lambda_1(\vec{x})\vec{p}_1 + \lambda_2(\vec{x})\vec{p}_2 + \lambda_3(\vec{x})\vec{p}_3, \quad (3.43)$$

$$\lambda_1(\vec{x}) + \lambda_2(\vec{x}) + \lambda_3(\vec{x}) = 1. \quad (3.44)$$

Строгое определение и доказанные свойства барицентрических координат можно найти в [36]. Физический смысл λ таков: если расположить в точках $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ массы $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$ соответственно, то центр масс такой системы будет в точке \vec{q} .

Ещё более полезен их геометрический смысл, показанный на рис. 3.9. К примеру, условие попадания точки внутрь треугольника – положительность всех её барицентрических координат, условие нахождения точки во внутренности угла $\angle abc$ будет $\lambda_1 < 1, \lambda_0 > 0, \lambda_2 > 0$. Эти свойства ещё более полезны в трёхмерном пространстве, когда изобразить задачу на листе бумаги становится сложнее.

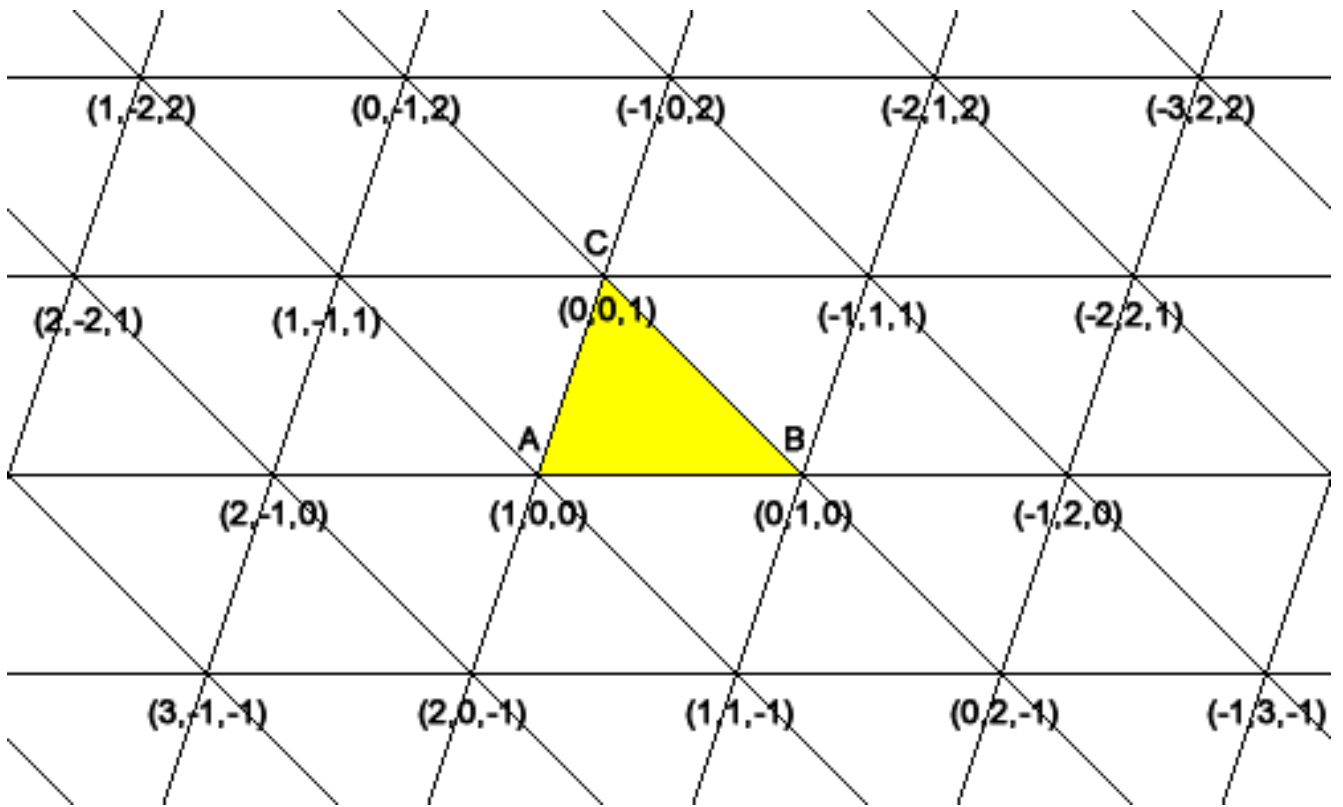


Рисунок 3.9 — Геометрический смысл барицентрических координат
(<https://de.wikipedia.org/wiki/Datei:BaryzKoord2.png>)

Пусть известны значения функции $f(\vec{x})$ в вершинах треугольника $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$ и необходимо интерполировать её значение в некоторой точке \vec{q} внутри треугольника. Составим следующий интерполяционный многочлен:

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x}) f(\vec{p}_i). \quad (3.45)$$

Такой многочлен в точности воспроизводит линейную функцию: пусть

$$z(\vec{x}) = a + \vec{b} \cdot \vec{x}, \quad (3.46)$$

тогда

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x})(a + \vec{b} \cdot \vec{p}_i) = a \sum_i \lambda_i(x) + \vec{b} \cdot \sum_i \lambda_i(x) \vec{p}_i = a + \vec{b} \cdot \vec{x} = z(\vec{x}). \quad (3.47)$$

Это позволяет, вычисляя барицентрические координаты точки \vec{q} , производить интерполяцию первого порядка.

Если в вершинах треугольника \vec{p}_i известны ещё и значения градиента функции $\nabla f(\vec{x}) = \vec{g}(\vec{x})$, составим многочлен, в точности воспроизводящий

квадратичную функцию, что позволит производить интерполяцию со вторым порядком точности:

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(f(\vec{p}_i) + \frac{1}{2} \vec{g}(\vec{p}_i) \cdot (\vec{x} - \vec{p}_i) \right). \quad (3.48)$$

Доказательство:

$$z(\vec{x}) = \vec{x}^T \mathbf{A} \vec{x} + \vec{b} \cdot \vec{x} + c, \quad (3.49)$$

$$g(\vec{x}) = \nabla z(\vec{x}) = 2\mathbf{A} \vec{x} + \vec{b}, \quad (3.50)$$

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(\vec{p}_i^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \vec{b} \cdot \vec{p}_i + c + \frac{1}{2} (2\mathbf{A} \vec{p}_i + \vec{b}) \cdot (\vec{x} - \vec{p}_i) \right) = \quad (3.51)$$

$$\sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(\vec{p}_i^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \vec{b} \cdot \vec{p}_i + c + \vec{x}^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{x} - \vec{p}_i^T \mathbf{A} \vec{p}_i - \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{p}_i \right) = \quad (3.52)$$

$$\sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(\vec{x}^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{p}_i + c + \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{x} \right) = \quad (3.53)$$

$$\vec{x}^T \mathbf{A} \vec{x} + \vec{b} \cdot \vec{x} + c = z(\vec{x}). \quad (3.54)$$

В предпоследнем переходе в цепочке равенств использовано свойство аффинной инвариантности барицентрических координат: $\sum_i \lambda_i(\vec{x}) \mathbf{A} \vec{p}_i = \mathbf{A} \vec{x}$. Идея построения квадратичного многочлена взята из [37]. Приведённые рассуждения обобщаются на трёхмерный случай чисто формально.

Численное дифференцирование на неструктурированной сетке

Поскольку значение градиента $\vec{g}(\vec{x}) = \nabla f(\vec{x})$ в узлах сетки чаще всего, в том числе и в случае СХМ, неизвестно, предлагается найти его численно. Реализованный в данной работе метод численного дифференцирования был, по-видимому, впервые предложен в [38]. Иллюстрация на рисунке 3.10. Вычисляется градиент функции в узле, обозначенном *, для этого используются значения функции в самом узле $f(\vec{x}^*) = f^*$ и в его пронумерованных по порядку узлах-соседях $f(\vec{x}_i) = f_i$. Запишем из определения градиента функции:

$$f_i - f^* = \vec{g}(\vec{x}^*) \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}^*) + O(\|\vec{x}_i - \vec{x}^*\|^2) \quad (3.55)$$

Записывая это уравнение для всех узлов-соседей, получаем переобусловленную

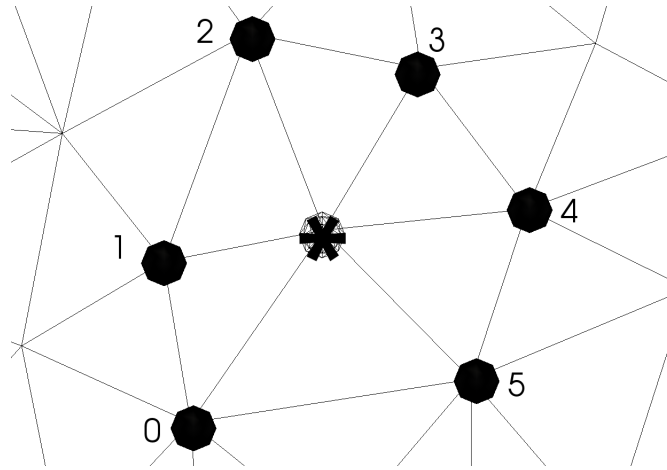


Рисунок 3.10 — К пояснению метода численного дифференцирования

СЛАУ на значения градиента:

$$\mathbf{A}\vec{g} = \vec{b}, \quad (3.56)$$

$$\mathbf{A}_{ij} = (\vec{x}_i - \vec{x}^*)_j, \quad (3.57)$$

$$b_i = f_i - f^*. \quad (3.58)$$

СЛАУ решается методом наименьших квадратов с весами, обратными расстояниям от рассчитываемого узла до соответствующего соседа:

$$\left(\mathbf{A}^T \mathbf{W} \mathbf{A}\right) \vec{g} = \left(\mathbf{A}^T \mathbf{W}\right) \vec{b}, \quad (3.59)$$

$$\mathbf{W}_{ij} = \|\vec{x}_i - \vec{x}^*\|^{-1}, \quad i = j, \quad (3.60)$$

$$\mathbf{W}_{ij} = 0, \quad i \neq j. \quad (3.61)$$

Минимальное число узлов-соседей для треугольной сетки равно двум, а для тетраэдральной – трём, так что система уравнений не может быть вырождена. Средние же количества узлов-соседей – шесть для двумерного и пятнадцать для трёхмерного случаев (рис. 3.11).

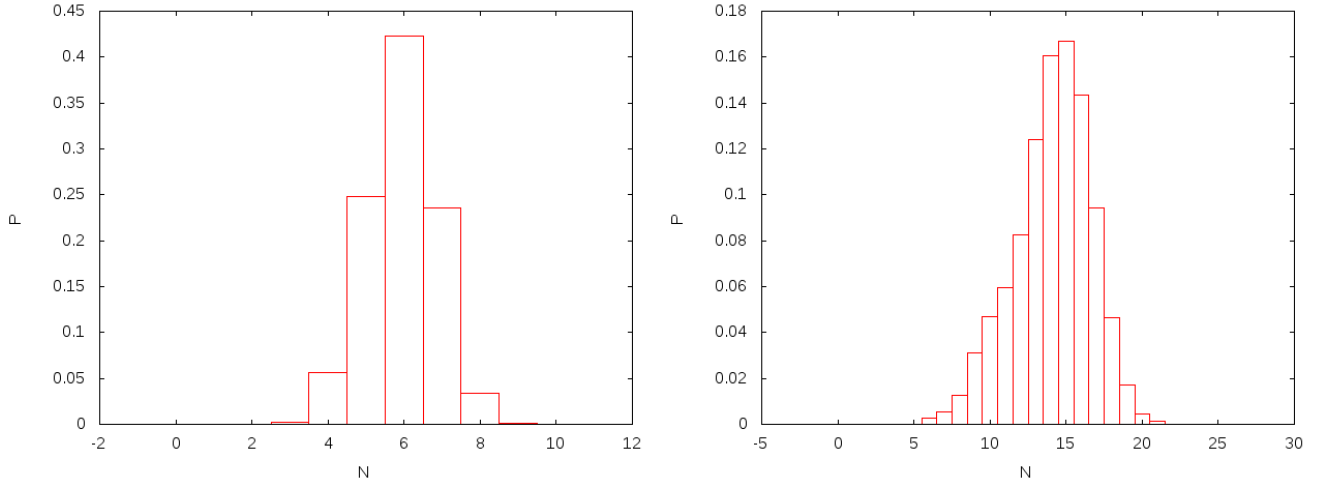


Рисунок 3.11 — Гистограммы числа соседних вершин в двумерном и трёхмерном случаях

3.3.2 Интерполяция на структурированной расчётной сетке

В случае структурированной сетки и расщепления по направлениям независимо от размерности решаемой задачи интерполяция производится не в пространстве, а на прямой, вдоль которой выполняется ступень расчёта. Это значительно упрощает задачу. Существует множество способов интерполяции функции по исходным данным, распределённым на прямой.

В данной работе было решено воспользоваться интерполяционными полиномами в форме Ньютона [39]. Пусть известны значения функции $f(t)$ в точках t_i . Определим конечные разности порядка k для i -й точки как

$$f(t_i, t_{i+1}, \dots, t_{i+k}) = \frac{f(t_{i+1}, \dots, t_{i+k}) - f(t_i, \dots, t_{i+k-1})}{t_{i+k} - t_i}, \quad (3.62)$$

$$f(t_i, t_{i+1}) = \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i}. \quad (3.63)$$

Тогда аппроксимационный полином степени n

$$N_n(t) = f(t_1) + f(t_1, t_2)(t - t_1) + \dots + f(t_1, \dots, t_{n+1})(t - t_1) \dots (t - t_n). \quad (3.64)$$

Пусть точки с известными значениями функции расположены на одинаковых расстояниях Δt друг от друга, а точка поиска — на расстоянии $q\Delta t$ от

первой из них. Пусть известные значения записаны в массив данных (нумерация с нуля). Тогда после некоторых упрощений формул (3.62) и (3.64) получим компактный алгоритм нахождения значения в точке поиска с порядком точности n (значения в массиве в ходе работы алгоритма будут перезаписаны!):

```

result = f[0];
for (int i = 1; i <= n; i++) {
    for (int j = 0; j < n - i + 1; j++) {
        f[j] = (f[j + 1] - f[j]) * ((q - i + 1) / i);
5    }
    result += f[0];
}

```

Теоретически, получен алгоритм интерполяции произвольного порядка на структурированной сетке. На практике, конечно, необходимо специально исследовать устойчивость такого рода схем. Как было показано в [40], интуитивное правило Куранта (метод устойчив, если значение интерполируется в области зависимости решения) не всегда применимо в этом случае. Например, интерполяции третьего порядка с шаблоном, изображённым на рис. 3.12, устойчива при числе Куранта от 1 до 2. Из правила Куранта следовала бы устойчивость при числе Куранта от 0 до 3.

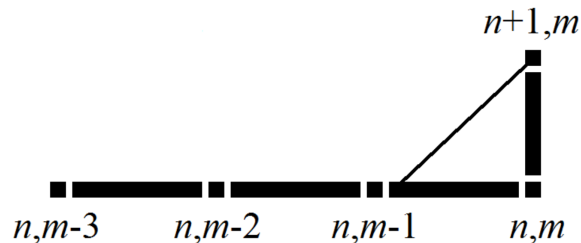


Рисунок 3.12 — Четырёхточечный шаблон для расчёта третьего порядка аппроксимации [40]

Схема расчёт граничных узлов на структурированной расчётной сетке через введение фиктивных узлов

Отметим, что для структурированных расчётных сеток можно предложить куда более простую схему расчёта граничных узлов, чем изложенная

выше для неструктурированных. Для регулярных сеток можно использовать метод фиктивных внешних узлов. Его основная идея – введение вдоль границ тела вспомогательных расчётных узлов, значения в которых выставляются так, чтобы при сквозном счёте границы автоматически выполнялись поставленные граничные условия.

Допустим, вдоль границы, перпендикулярной оси x , поставлено условие фиксированной внешней силы

$$\sigma_{xx} = S_{xx}, \sigma_{xy} = S_{xy}, \sigma_{xz} = S_{xz}. \quad (3.65)$$

Пусть вдоль рассматриваемой оси граничный узел имеет индекс 0, тогда внутренние узлы имеют положительные индексы, а фиктивные узлы – отрицательные. Перед очередной ступенью расчёта вдоль данной оси выставим во вспомогательных узлах следующие значения:

$$\sigma_{xx(-i)} = -\sigma_{xx(i)} + 2S_{xx}, \quad (3.66)$$

$$\sigma_{xy(-i)} = -\sigma_{xy(i)} + 2S_{xy}, \quad (3.67)$$

$$\sigma_{xz(-i)} = -\sigma_{xz(i)} + 2S_{xz}, \quad (3.68)$$

$$v_{x(-i)} = v_{x(i)}, \quad (3.69)$$

$$v_{y(-i)} = v_{y(i)}. \quad (3.70)$$

$$v_{z(-i)} = v_{z(i)}. \quad (3.71)$$

Значения для σ_{yy} , σ_{yz} , σ_{zz} ставить не требуется, так как они не участвуют в данной ступени расчёта. Далее будем считать граничные узлы таким же образом, как и внутренние. Полученное решение будет удовлетворять поставленным граничным условиям с первым порядком точности.

Это можно объяснить из следующих соображений. Если провести прямую, соответствующую линейной интерполяции для компонент тензора напряжения, через (i) -й и $(-i)$ -й узлы, то её значение в нулевом узле совпадёт граничным условием. Аналогично для компонент скорости, которые не должны меняться в граничных узлах при условии фиксированной поверхностной силы.

Вводя достаточное количество фиктивных узлов, добиваемся того, что все характеристики попадают внутрь расчётной области.

Метод фиктивных узлов удобен ещё тем, что он отлично согласуется с реализацией параллельных расчётов с отдельной памятью – через эти узлы

принимается информация от соседних процессов, необходимая для продолжения расчётов.

Однако, как показывают эксперименты, иногда (в зависимости от постановки) при использовании метода фиктивных узлов с увеличением порядка аппроксимации схемы можно столкнуться с неустойчивостью на границе. Это связано, по-видимому, с тем, что при выставлении значений во вспомогательных узлах фактически производится экстраполяция значений вне области зависимости решения – а это прямое нарушение условия Куранта.

3.3.3 Алгоритм поиска ячейки пересечения характеристики с предыдущим временным слоем

Для того, чтобы произвести интерполяцию функции в точке на неструктурированной сетке, необходимо найти треугольник (тетраэдр), который содержит эту точку. Это одна из фундаментальных задач вычислительной геометрии, к её решению существует множество подходов: от построения специальных структур быстрого поиска до различных вариантов блужданий по триангуляции от ячейки к ячейке [41].

Поиск в kD -деревьях занимает логарифмическое время. Оценки для методов блуждания в триангуляции по умолчанию, конечно же, хуже, но при дополнительном условии хорошего выбора стартовой ячейки улучшаются до константных. Поскольку в СХМ известна не только точка для поиска, но и расчётный узел, из которого выходит характеристика, указать стартовую ячейку не представляет труда. А так как для численных методов выполняется в том или ином виде условие Куранта, число шагов, которое необходимо пройти до искомой ячейки, порядка единицы.

Из всех методов поиска блужданием по триангуляции, изложенных и протестированных в [41], для СХМ выбирается не самый оптимальный с точки зрения общих показателей метод поиска вдоль прямой линии, проиллюстрированный на рисунке 3.13. Причина, по которой необходимо перебирать ячейки именно вдоль прямой линии, ясна из варианта под буквой с) – в то время как характеристика пересекает границу области и должна быть рассмотрена как

внешняя, при других алгоритмах блуждания (или поиске через kD -дерево) она может быть ошибочно принята за внутренней.

Алгоритм для двумерного и трёхмерного случаев предложен в [41]. Для краткости приведём лишь поиск в треугольной сетке, иллюстрация – случай а) на рисунке 3.13. Обозначим

$$\textit{orientation}(A, B, C) = \det \begin{vmatrix} B_x - A_x & C_x - A_x \\ B_y - A_y & C_y - A_y \end{vmatrix} \quad (3.72)$$

– ориентированную площадь треугольника A, B, C .

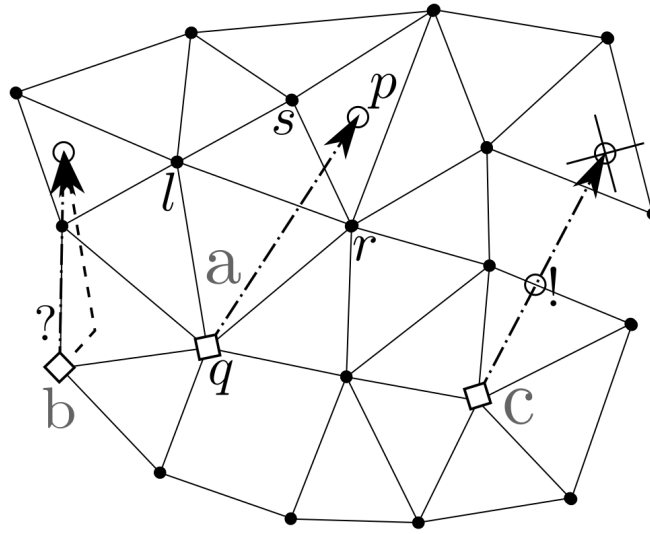


Рисунок 3.13 — К пояснению алгоритма поиска

- Имеем узел q и точку для поиска p
- Рассматриваем все инцидентные q ячейки и выбираем среди них ту, которая содержит внутри себя луч qp . Это делается, например, с помощью анализа барицентрических координат точки p в каждой из этих ячеек
- Обозначим как l вершину найденной ячейки, лежащую слева от qp , r – вершину, лежащую справа от qp , и вершину $s = q$
- Выполнено $\textit{orientation}(s, r, l) > 0$
- Далее до тех пор, пока $\textit{orientation}(p, r, l) < 0$, повторяем:
 - Переходим в ячейку, разделяющую с текущей точки r, l
 - Переносим вершину s в новую ячейку на свободное от r, l место
 - Если $\textit{orientation}(s, q, p) < 0$, $r = s$, иначе $l = s$
- Ячейка, содержащая p , найдена

При всей простоте данный алгоритм неустойчив в случаях, подобных варианту б) на рисунке 3.13, поскольку значение $\textit{orientation}(s, q, p)$ близко к нулю

и выбор следующей ячейки неоднозначен. Это может привести к большому числу “промахов” характеристик в областях правильной формы при расчёте вдоль координатных осей.

Для борьбы с этим явлением предлагается следующая модификация метода. В случае, если поиск вдоль прямой линии из стартового узла в искомую точку не удаётся, делается небольшой отступ из узла внутрь области и производится попытка поиска вдоль новой линии, изображённой пунктиром. Это решает проблему вырожденности $orientation(s, q, p)$. На рисунке для наглядности отступ сделан значительным, на самом же деле он составляет одну тысячную от высоты ближайшей ячейки.

Глава 4. Программный комплекс

Полноценное изучение численных методов и математических моделей невозможно средствами только готовых программных пакетов без самостоятельного программирования. Кроме того, автору неизвестно полноценных промышленных программ, основанных на идее сеточно-характеристического метода. Поэтому в данной главе речь пойдёт об аспектах разработки программных комплексов для ресурсоёмких научных расчётов.

В процессе создания собственных программных решений первый этап – накопление некоторого количества экспериментальных, возможно, плохо структурированных прототипов, которые показывают жизнеспособность реализуемого подхода в целом. Поскольку не всем теоретическим идеям суждено оказаться применимыми на практике, многие проекты на этом этапе и заканчиваются.

Отсюда следует, что забота о качестве кода на этапе прототипирования скорее вредна, чем полезна, так как может стоить зря потраченного времени на продумывание архитектуры и преждевременную оптимизацию, а преждевременное ограничение рамками конкретной архитектуры может мешать дальнейшим экспериментам. Это первая мысль, которую следует помнить, начиная программирование новой неопробованной идеи.

В случае же относительного успеха реализуемого подхода следует уже потратить некоторое количество усилий на структуризацию и улучшение качества имеющегося кода – так называемый рефакторинг. Игнорирование необходимости рефакторинга приводит в конечном счёте к ситуации, когда количество времени, потраченное на поддержку недостаточно качественно реализованной системы, превышает суммарное время на переписывание системы с нуля и поддержку новой системы, причём эта тенденция усиливается с течением времени. Это явление имеет название “технический долг” [42].

В идеале дальнейшее развитие программного комплекса можно представить как цикл сменяющих друг друга периодов расширения функционала и рефакторинга, на первом из которых часто берётся упомянутый выше технический долг, а на втором он по возможности возвращается. Итоговое время жизни системы зависит, в первую очередь, конечно, от успешности лежащей под ней идеи, но во вторую – от поддержки уровня технического долга на приемлемом

уровне, без чего дальнейшая разработка системы становится невозможной, а качество её работы – всё менее стабильным. Это вторая мысль, которая не важна в самом начале, но должна быть принята во внимание с определённого момента.

Стоит отметить, что изложенные общие замечания относятся не только к программированию научно-исследовательского программного обеспечения, но и к промышленному программированию также.

Из второй мысли следует важность анализа возможных архитектур программных комплексов для численных расчётов, поэтому в продолжение главы речь пойдёт о двух наиболее популярных на данный момент архитектурах.

4.1 Монолитная программа, полностью реализованная на компилируемом языке программирования

Численные расчёты и работа с большими массивами данных – ресурсоёмкие задачи, требующие отсутствия лишних расходов при вычислениях и быстрой работы с памятью. Это возможно только при исключении лишних уровней абстракции при вызовах функций и доступе к данным в памяти. А исключение лишних уровней абстракции возможно только при использовании компилируемых языков программирования с возможностью прямого управления выделением и освобождением памяти. На сегодняшний день среди таких языков стандартом де-факто являются С и С++.

С++ является расширением С с добавлением большого числа синтаксических конструкций, делающих разработку более удобной и при правильном использовании практически не ухудшающих производительность по сравнению с С. Это первая причина, по которой в данной работе выбор был сделан в пользу С++. Вторая причина в том, что большое количество библиотек, используемых в научных-исследовательских программных комплексах (например, [32; 43]), реализовано на С++, а не на числом С. Третья причина в том, что программный комплекс, реализованный в данной работе [44], является наследником идей, изначально реализованных на С++ в программном комплексе [45], и был разработан с целью устранить недостатки своего предшественника, сохранив его достижения.

Рассмотрим некоторые возможности C++, значительно упрощающие разработку вычислительных программ за счёт упрощения записи математических выражений в программе и повторного использования исходного кода.

Первая простейшая возможность C++, отличающая его от C – возможность объединять данные с функциями через классы, использовать наследование и переопределять операторы арифметики и доступа к данным. Всё это хотя и может быть с таким же успехом быть сделано с использованием синтаксиса функций и циклов, но значительно улучшает читаемость исходного кода по сравнению с последними. Проиллюстрируем это на примере функции, рассчитывающей направление отражения акустической волны от поверхности для любого числа измерений:

```

template<int M>
Vector<M> reflectionDirection(const Vector<M>& normal, const
    Vector<M>& initialDirection)
{
    return normalize(initialDirection -
5     2 * normal * dotProduct(initialDirection, normal));
}

```

Содержательная часть функции занимает всего одну строку кода. Это становится возможным благодаря определению шаблонного класса `Vector` и соответствующих операторов и функций для него. Подсчитаем, насколько увеличилась бы функция при пренебрежении такими возможностями C++. Нам потребовался бы цикл для каждой из используемых операций, а из здесь как минимум четыре, минимум по три строки на цикл, плюс введение промежуточных переменных. Итого, порядка десяти-двадцати строк кода вместо одной. Если не использовать шаблонизацию по длине вектора, то такая функция дублируется для каждого интересующего нас измерения. Число строк приближается к следующему порядку величины.

Здесь можно было бы возразить, что для возможности такой короткой записи был заранее написан код, реализующий все используемые здесь операции, и циклы просто перешли в другие места в программе. Однако, все используемые здесь функции используются и во многих других местах программы, поэтому количество копирований в коде сокращается пропорционально количеству использований этих операций, а тестируемость и стабильность программы пропорционально растёт. Кроме того, простота записи выражения для направления

отражённой волны в коде в данном случае равна простоте математической записи, что опять же значительно повышает надёжность и поддерживаемость кода.

Ещё одно возражение заключается в том, что лишние вызовы функций могут замедлить работу программы. Это неверно, поскольку компилятор C++ проводит серьёзную оптимизацию при сборке программы, и все лишние вызовы будут исключены из результирующего машинного кода [46].

Изложенный пример, с одной стороны, настолько прост, что может быть непонятным, зачем обсуждать такие очевидные вещи. Но настолько же удивителен тот факт, что подавляющее большинство кода, которое видел автор, следует по большей части именно критикуемой парадигме копирования повторяющейся логики из функции в функцию с пренебрежением полезными возможностями языка и усложнением кода от правки к правке. Поэтому всё же оставим здесь эту заметку.

В качестве второй полезной возможности C++ назовём его стандартную шаблонную библиотеку `stl`, универсальность которой позволяет в большинстве случаев свести решение задачи к комбинированию предопределённых структур данных и алгоритмов. Кроме того, как уже было упомянуто выше, большое количество сторонних библиотек для численного моделирования написано на C++, а вызов тех из них, которые написаны на C, из C++ осуществить проще, чем из C-кода вызывать библиотеки на C++.

Польза от использования шаблонов C++ уже была показана среди прочего в примере выше, однако область применения этой техники значительно шире такого простого случая [47]. Основная цель механизма шаблонов – повторное использование кода для случая, когда типы данных отличаются, а алгоритмы совпадают. Ярким примером такого подхода является стандартная библиотека. Важно понимать, что абстракция, достигаемая с помощью шаблонов, имеет место только в исходном коде, но не в работающей программе, то есть разрешение конкретных типов данных происходит на этапе компиляции, благодаря чему это никак не отражается на производительности работающей программы.

В программном комплексе, реализованном в данной работе, шаблонная техника позволила существенно сократить объём кода при реализации различных структур и алгоритмов с однотипными интерфейсами. При написании программы изначально учитывалась необходимость создать расширяемую по функционалу систему, а именно обеспечить возможность расчёта:

- в одномерном, двумерном и трёхмерном пространстве,

- на различных типах расчётных сеток (прямоугольная, тетраэдральная и другие),
- различными типами численных методов (сеточно-характеристический, конечных разностей и другие),
- с различными типами реологии материалов (изотропная и анизотропная, упругая, упруго-пластическая, вязкоупругая и другие).

Поскольку почти каждая из этих опций может меняться независимо от других, общее количество возможных конфигураций растёт полиномиально, и написание собственного кода для каждой по отдельности неприемлемо. Данная задача, однако, эффективно решается с помощью шаблонизации. Во-первых, все классы расчётных сеток, численных методов и классы материалов, описывающие реологию среды, шаблонизируются по размерности пространства. Во-вторых, классы численных методов шаблонизируются по типам расчётных сеток и материалов, а классы расчётных сеток – по типам материалов, от которых зависит количество переменных и тип уравнений. Кроме того, для класса тетраэдральной (в 2D треугольной) расчётной сетки была сделана шаблонизация по типу используемой триангуляции, что позволяет менять реализацию функционала, связанного с топологией расчётной сетки, с собственной на функционал из библиотеки CGAL. Всё это позволило существенно снизить ненужное дублирование кода при добавлении нового функционала:

```

template<int Dim> class IsotropicMaterial;
template<int Dim> class OrthotropicMaterial;
template<int Dim,
    template<int> class Triangulation> class SimplexGrid;
5 template<int Dim> class CubicGrid;
template<typename Grid, typename Material> class Mesh;
template<typename Mesh,
    typename Material> class GridCharacteristicMethod;
// ...

```

Стоит отметить, что на практике решаемые задачи не настолько идеально декомпозируются по четырём возможным типам конфигурации. К примеру, со временем стало ясно, что реализация сеточно-характеристического метода для непериодических тетраэдральных расчётных сеток кардинально отличается от реализации для структурированных кубических сеток, поэтому не имело смысла унифицировать интерфейсы для работы столь разных алгоритмов. Однако

существует возможность частичной специализации шаблона, которая применяется для обработки как раз таких особых случаев.

Как уже было сказано выше, шаблонная абстракция имеет место только в исходном коде, а не в работающей программе. Это означает, что компилятор при генерации машинного кода точно знает конкретные типы данных. Это, с одной стороны, позволяет компилятору генерировать оптимизированный быстрый машинный код и является наиболее сильной стороной C++, но, с другой стороны, вынуждает явно указывать конкретные типы объектов, что мешает унифицированной работе с ними.

Более подробно. В программе могут одновременно существовать расчётные сетки разных типов, шаблонизированные по разным типам материалов, использоваться подряд несколько разных численных методов, шаблонизированных по разным типам расчётных сеток и математических моделей. Необходимо хранить такие объекты в общих контейнерах и унифицированно вызывать их функции. Для этого для всех возможных типов расчётных сеток создаётся общий абстрактный базовый класс-интерфейс, чтобы хранить все имеющиеся типы сеток в контейнере через указатели на базовый класс. Аналогично для классов численного метода. Всем вычислительным процессом в целом заведует класс-менеджер “Engine”. Иллюстрация на UML-диаграмме 4.1. Инициализация всех объектов производится на старте программы с использованием известного паттерна проектирования “абстрактная фабрика” [48].

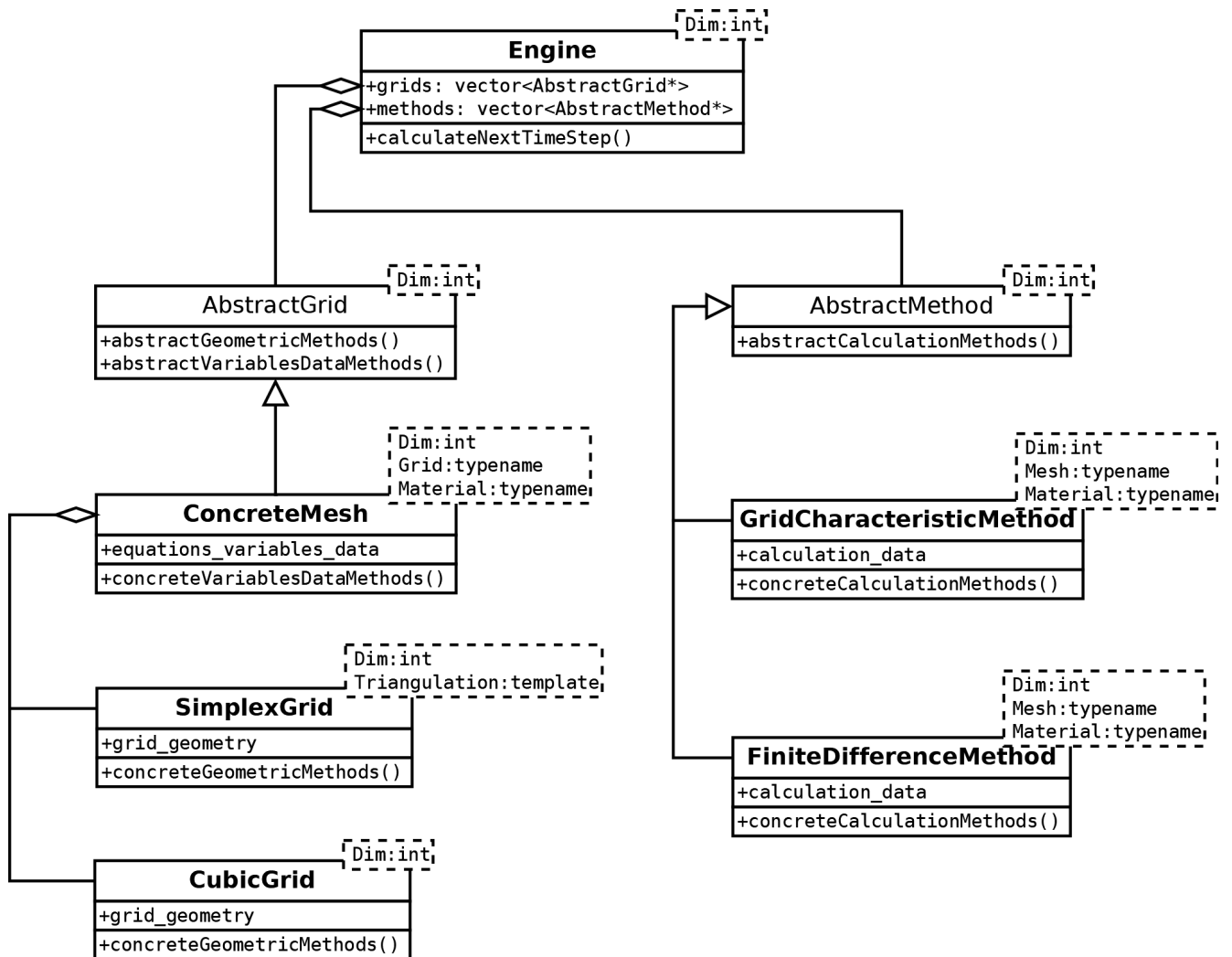


Рисунок 4.1 — Диаграмма классов программного комплекса

Таким образом, использование шаблонизации даёт возможность создать легко расширяемую систему с производительностью, не уступающей программе на чистом C, а использование абстрактных классов для коммуникации объектов – расчётных сеток и численных методов – позволяет одновременно и унифицированно содержать в программе сетки и методы многих типов.

Здесь возникает вопрос, как, имея на более высоком уровне коммуникаций между объектами лишь указатели абстрактного типа, можно перейти к объектам конкретного типа в момент, когда коммуникация произошла (один объект получил ссылку на другой) и необходимо произвести конкретную вычислительную работу. Для этого используется динамическое приведение типа, схематически идея показана в листинге ниже:

```
| template<typename ConcreteMesh>
```

```

class ConcreteMethod : public AbstractMethod
{
public:
5   void calculate(AbstractMesh& abstractMesh) override
    {
        // один раз перед вычислениями привести
        // абстрактный тип к конкретному
        // с использованием динамической информации о типе
10   ConcreteMesh& concreteMesh =
        dynamic_cast<ConcreteMesh&>(abstractMesh);
        // провести основной большой цикл
        // с вычислениями над объектом конкретного типа
        // без использования динамической информации о типе
15   // (т.е. виртуальных функций)
        for (ConcreteNode& node : concreteMesh)
        {
            // ... вычисления
        }
20   }
    // ...
};

```

Вместо того, чтобы использовать медленные вызовы виртуальных функций в течении всего процесса вычислений, целесообразно один раз в начале выполнения большого цикла по всей расчётной сетке привести её к конкретному типу, который уже известен в данной точке выполнения – за то, чтобы метод, шаблонизированный по типу сетки, получал указатель именно на сетку такого типа, отвечает класс-менеджер Engine.

Таким образом, благодаря комбинированному использованию механизма шаблонов и механизма виртуальных функций удаётся создать систему, универсально оперирующую расчётными сетками и методами разных типов, но не теряющую при этом производительности.

4.2 Набор утилит, комбинируемых между собой с помощью интерпретируемого языка программирования

Построение вычислительного комплекса от и до на C++ является наиболее популярным в научном сообществе, занимающемся трёхмерным численным

моделированием, что во многом обусловлено сложившимися в течении десятилетий традициями. Однако на сегодняшний день, по мнению автора, существует более правильный подход к построению вычислительных исследовательских программ, позволяющий добиться намного большей гибкости и свободы в экспериментах.

Изложенная выше архитектура, как и архитектура любого проекта, реализованного на жёстко типизированном компилируемом языке программирования, обладает двумя недостатками по сравнению с архитектурами систем, реализуемых на динамических интерпретируемых языках программирования: большая сложность и длительность разработки и намного (!) большая сложность и длительность перепроектирования. И если первая проблема не столь критическая и окупается большей надёжностью и скоростью работы программы, то вторая проблема намного серьёзнее. Ошибка, допущенная на стадии проектирования, может стоить огромных усилий на переписывание большого количества кода: изменение интерфейса одного из абстрактных классов влечёт за собой череду правок по всем классам-наследникам.

В контексте исследовательских программ такая проблема ощущается особенно остро: практически невозможно изначально предугадать необходимые интерфейсы объектов системы, и в рабочем процессе ради различных экспериментов они должны постоянно меняться, что требует времени. Порой доходит до того, что некоторые подающие надежды идеи не бывают испробованы из-за слишком большого количества правок кода, которое они требуют для проверки.

Также к недостаткам компилируемых языков программирования стоит отнести большую временную длительность цикла программирование-отладка-запуск, обусловленную необходимостью перекомпилировать код после любой правки и сложностью отладки отдельных компонент системы.

Интерпретируемые языки программирования – в данной работе речь пойдёт конкретно об очень популярном на сегодняшний день языке Python – справляются с перечисленными проблемами намного легче. Стадия компиляции отсутствует как таковая, отладка любой части кода возможна непосредственно загрузкой её части в интерпретатор с последующим интерактивным тестированием. Смена интерфейсов происходит более безболезненно благодаря намного более широким возможностям интроспекции – даже класс в Python является объектом.

Всё это, разумеется, даётся ценой значительного снижения производительности по сравнению с компилируемыми языками, и при сохранении того же стиля программирования, который применяется в C++ – обычного использования классов, функций и циклов, время работы программы, производящей много вычислений, становится неприемлемым.

Но дело в том, что программирование вычислительно сложных задач в Python осуществляется совсем другими способами. Вместо разделения данных по объектам классов и их обработки в циклах данные помещаются в специальные массивы – векторы, матрицы и тензоры, реализованные в библиотеке “numpy” [49]. Для этих тензоров уже определены все необходимые математические операции, которые при этом высокопрофессионально реализованы на низкоуровневых компилируемых языках, с применением, возможно, векторизованных процессорных инструкций, многопоточности и других оптимизаций под конкретную платформу. Благодаря этому скорость работы программы, написанной на Python с использованием numpy, может оказаться даже быстрее скорости работы программы, наивно реализованной самостоятельно на чистом C.

В свете упоминания numpy как библиотеки для векторизованных вычислений на CPU, стоит сказать и про ещё более интересную возможность – векторизованные вычисления на GPU, которые делает возможными, например, библиотека “pytorch” [50] (хотя это и не основное её применение). В коде на Python пользователь просто оперирует тензорами данных аналогично numpy, но внутренние вычисления проводятся на видеокарте. При том, что операции с большими массивами данных занимают большую часть времени работы программы, ускорение кода близко к ускорению, получаемому при прямом использовании видеокарты через инструкции CUDA.

Существуют, однако, так называемые плохо векторизуемые задачи – те, решение которых трудно представить в виде операций над матрицами данных. Обычно это задачи с большим количеством логических ветвлений. Для таких случаев можно предложить реализацию плохо векторизуемых подзадач самостоятельно на C/C++ с последующим вызовом скомпилированного в виде динамической (DLL/shared) библиотеки машинного кода из Python. Для этого существуют как встроенные возможности Python – ctypes, так и гораздо более удобные обёртки [51].

Итак, использование Python и современных библиотек векторизованных вычислений и вызовы самостоятельно реализованных на C++ процедур для “узких мест” в программе даёт возможность получать не уступающую в производительности, но намного более удобную в разработке, отладке и экспериментах вычислительную систему. Такой подход можно сегодня чаще встретить в программных комплексах, ориентированных на анализ данных, там сложилась целая экосистема библиотек для этой области. В 3D-моделировании хотя и тоже можно встретить применение этого подхода, например [52], но реже, что объясняется, скорее всего, просто неинформированностью сообщества о некоторых технологиях. Если бы автор данной работы ознакомился с описанными техниками программирования ранее, программный комплекс для данной работы был бы реализован именно по такому принципу.

Глава 5. Результаты

5.1 Верификация

5.1.1 Расчёт слоистой структуры в 1D

В целях верификации используемого в работе сеточно-характеристического метода был произведён расчёт одномерной задачи прохождения упругой волны через многослойную структуру с возрастающей от слоя к слою плотностью вещества. Такая же постановка задачи исследовалась в [53]. На рис. 5.1 показаны графики значения скорости от координаты в последовательные моменты времени.

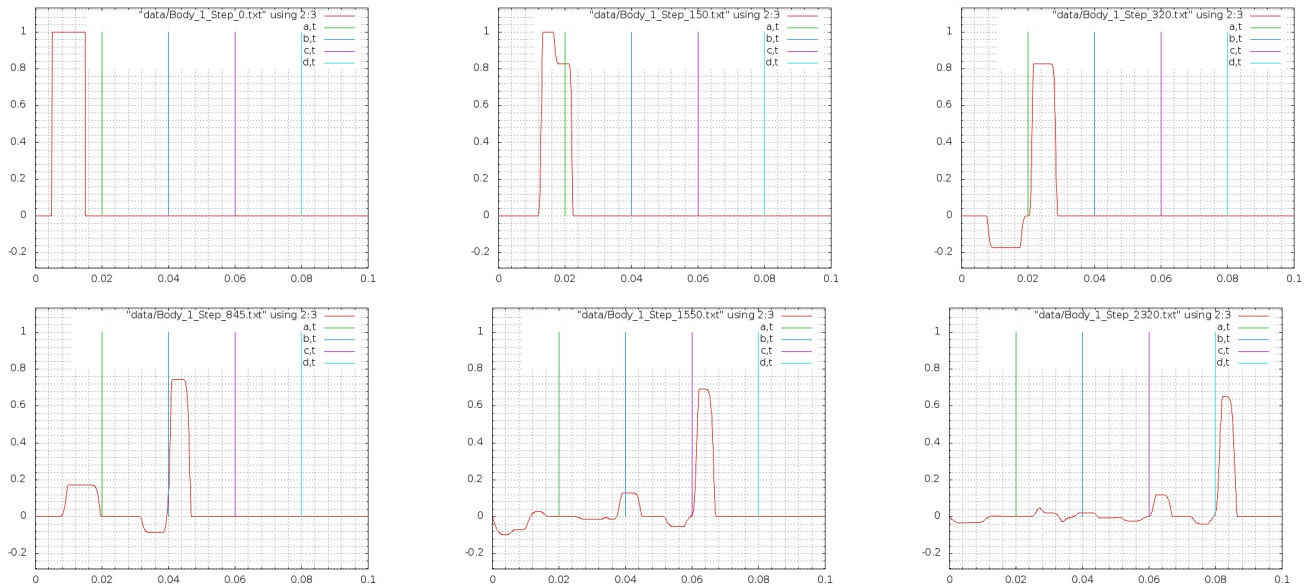


Рисунок 5.1 — Прохождение упругой волны через слоистый материал.

Графики скорости частиц вещества от координаты, последовательные моменты времени. Вертикальными линиями показаны границы между слоями материала

Сравнение амплитуды волны в численных расчётах с аналитическими результатами, изложенными в 1.6.2, показывает их совпадение с относительной точностью 10^{-10} для волны, прошедшей во второй слой и 10^{-3} для волны,

прошедшей в пятый слой. Такие же результаты были получены в [53], что подтверждает корректность метода.

5.1.2 Ударная волна за счёт подвижности расчётной сетки в 1D

Как было отмечено в 2.1, в рассматриваемой одномерной системе уравнений возможно возникновение ударных волн вне зависимости от гладкости начального возмущения, что следовало из нелинейности записи уравнений в Эйлеровом подходе. Представляет интерес для качественного сравнения получить ударную волну при использовании Лагранжева описания. Поскольку уравнения переноса в нём линейны, это может быть достигнуто только из-за подвижности расчётной сетки.

На рис.5.2 показан процесс возникновения ударной волны из гладкого начального возмущения – упругой волны с начальным фронтом в форме распределения Гаусса. Для образования ударной волны достаточно превышения амплитудой начального возмущения некоторой критической величины. При меньшей амплитуде ударная волна не возникнет вследствие затухания. Результат получен в рамках Лагранжева подхода.

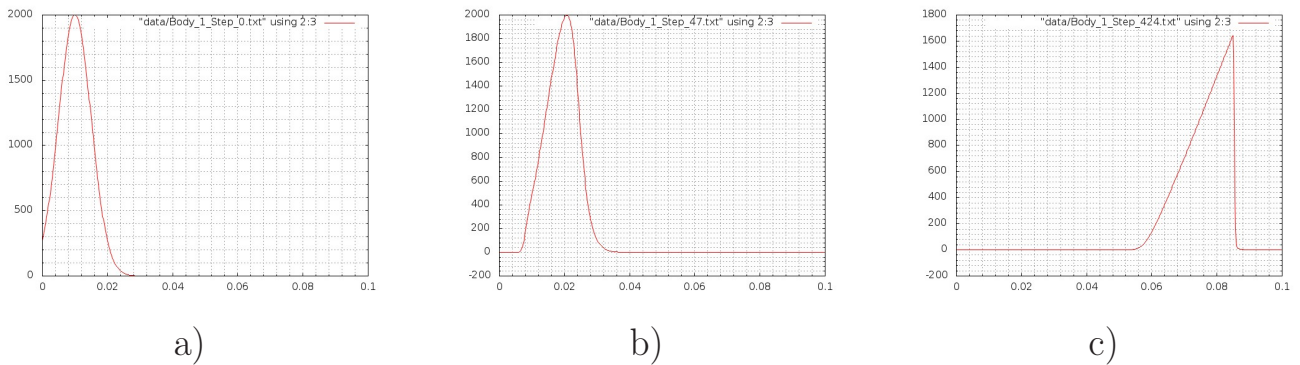


Рисунок 5.2 — Формирование ударной волны при гладком начальном условии

а) начальное возмущение - гауссова кривая, б,с) опрокидывание фронта

5.1.3 Исследование сходимости метода в 1D

Для исследования порядка сходимости численного метода была проведена серия одномерных расчётов с уменьшением шага расчётной сетки в два раза. В главе 2.3 был описан способ достижения второго порядка точности в лагранжевом подходе при движении расчётной сетки за счёт более симметричной схемы расщепления.

На графиках 5.3 представлены сравнение результатов работы метода с использованием обычной и более симметричной схем. На графике сходимости построена зависимость относительной величины логарифма нормы разности численного и аналитического решения $-\log\sqrt{(u - u^*)^2}$ от мелкости сетки – каждый шаг по x – уменьшение шага сетки в два раза. Видно, что истинно второй порядок точности даёт только вторая.

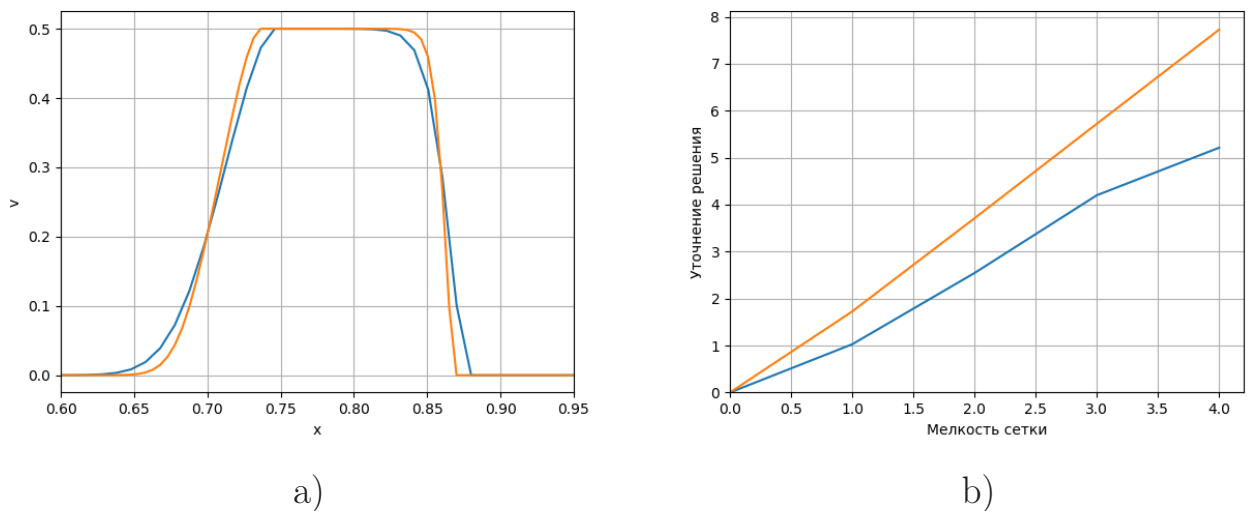


Рисунок 5.3 — Результаты одномерной версии сеточно-характеристического метода в лагранжевом подходе для обычной (синяя линия) и более симметричной (оранжевая линия) схем расщепления. а) волновые фронты, б) графики сходимости

5.1.4 Моделирование упругопластической реологии в 3D

В целях верификации используемого численного метода для трёхмерных расчётов была решена модельная задача о распространении продольной волны в твёрдом теле кубической формы в результате удара по боковой поверхности. Граничные условия везде, кроме места удара, – свободная граница. Удар моделируется граничным условием фиксированного нормального напряжения конечной длительности на одной из поверхностей. Все приводимые в этом параграфе результаты получены на прямоугольных структурированных сетках. Расчёт на тетраэдральной сетке даёт те же результаты, но с меньшим разрешением волновых фронтов.

Так как при использовании модели линейной упругости решение малоинтересно и было уже продемонстрировано во многих источниках [22; 54], проиллюстрируем здесь сразу решение для модели идеальной упругопластичности 1.3, которая при численной реализации является лишь небольшим уточнением линейной модели. Расчёт в рамках линейной модели будет приведён ниже для более интересного сравнения.

В модели идеальной упругопластичности при выполнении критерия Мизеса, что для плоской продольной волны эквивалентно превышению величиной компоненты нормального напряжения вдоль распространения волны некоторого критического значения, определяемого пределом текучести материала, можно наблюдать разделение волны от удара на упругую и пластическую составляющие, рисунок 5.4. (Здесь и далее визуализация трёхмерных и двумерных объектов осуществляется с помощью программы Paraview [55].) Раньше всех волн идёт так называемый упругий предвестник, чья амплитуда равна упомянутому выше критическому значению, а затем пластическая волна и волна упругой разгрузки (волна Рахматулина). Амплитуда волны упругой разгрузки, отсчитанная от амплитуды пластической волны, в два раза превышает амплитуду упругого предвестника, что соответствует аналитическому рассмотрению одномерной волны Рахматулина [23].

Положительные значения, возникшие на рисунке 5.4, с1) в начале координат, объясняются пришедшими отражёнными от боковых поверхностей куба волнами.

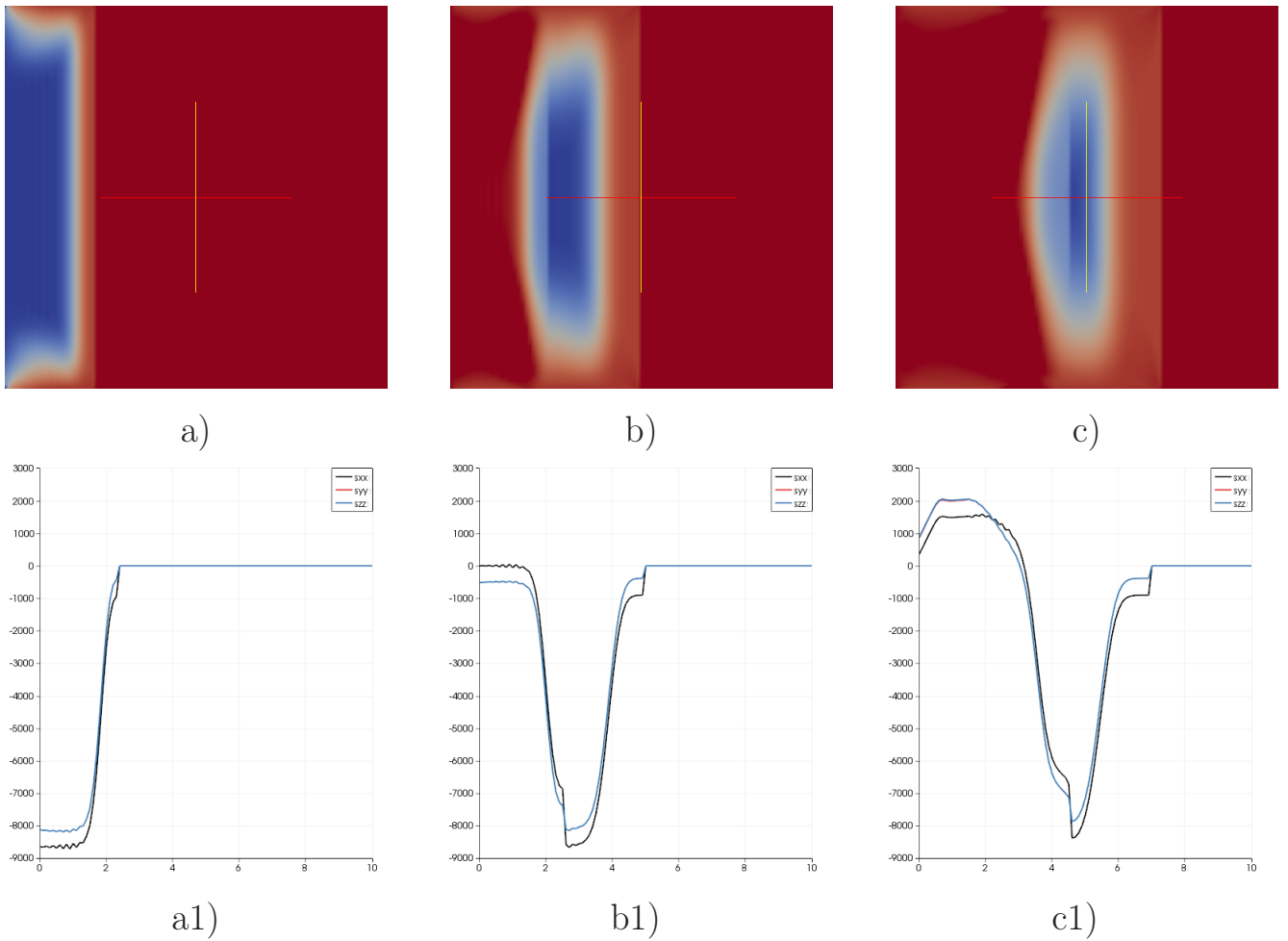


Рисунок 5.4 — Профиль волны от бокового удара по упругопластическому материалу. Компонента тензора напряжений в направлении удара. Расчёт в 3D. a,b,c - последовательные моменты времени на 2D-срезе, a1,b1,c1 – то же на 1D-срезе

Рассмотрим также прохождения продольной волны через контакт двух материалов, проведя сравнение результатов расчётов при использовании модели линейной упругости 1.2.3 и модели идеальной упругопластичности 1.3.

Упругие модули и пределы текучести контактирующих материалов совпадают, а плотность первого материала, из которого запущена волна, в четыре раза меньше плотности второго. Такая разница в плотностях не слишком реалистична, зато позволяет удобно рассчитать коэффициенты прохождения и отражения для амплитуды упругой продольной волны согласно 1.6.2:

$$Z = 2Z_0, \quad (5.1)$$

$$\sigma_r/\sigma_i = 1/3, \quad (5.2)$$

$$\sigma_t/\sigma_i = 4/3. \quad (5.3)$$

Волновая картина в последовательные моменты времени в двумерном срезе представлена на рисунке 5.5. Цветом показана нормальная компонента тензора напряжений вдоль направления распространения волны. Контакт материалов показан жёлтой линией. Контактное условие – полное слипание двух материалов. Граничные условия – свободная граница.

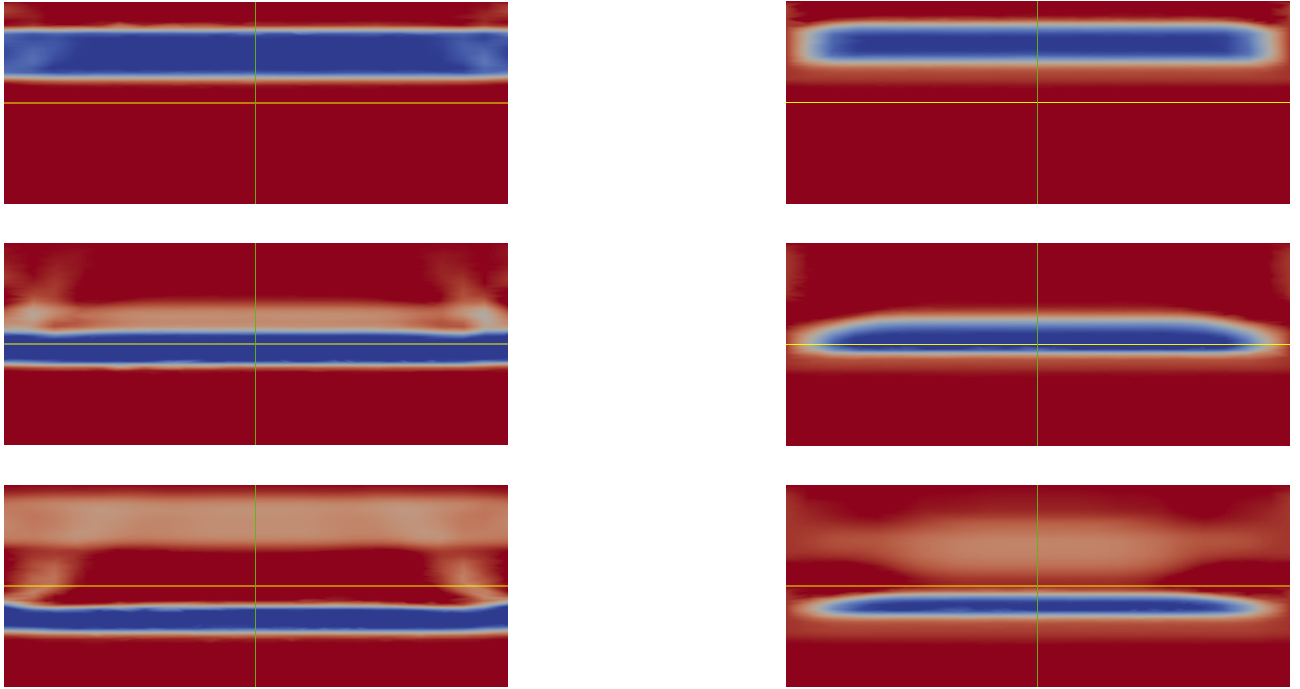
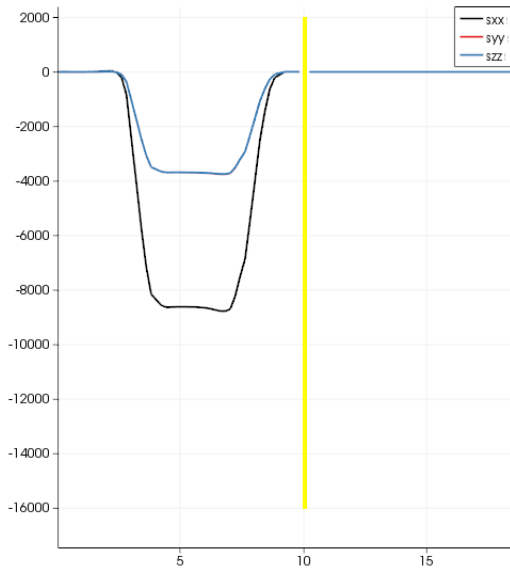


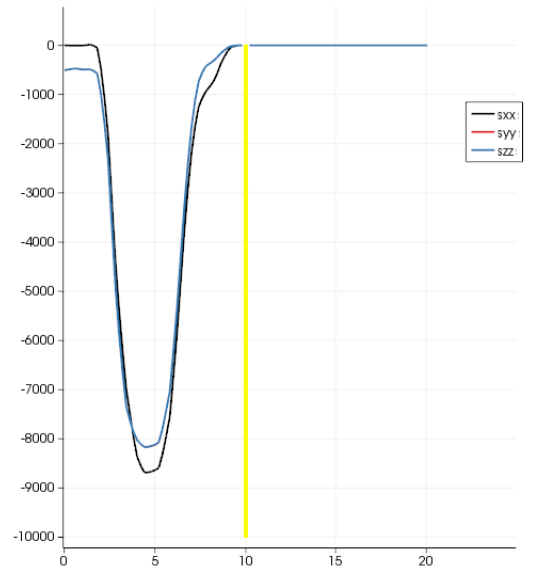
Рисунок 5.5 — Прохождение продольной волны через контакт материалов различной плотности. Линейно-упругая модель (слева) и упругопластическая модель (справа)

На рисунке 5.6 показаны графики компонент тензора напряжений вдоль направления распространения волны (зелёная линия на рисунке 5.5). Жёлтой линией показано место контакта материалов. Во-первых, можно видеть в пределах точности выполнение соотношений 5.1 для модели упругости. Во-вторых, для модели упругопластики видно, что амплитуда волны-упругого предвестника не изменяется при прохождении в более плотный слой в отличие от линейного случая. Это обусловлено тем, что значение предела текучести в обоих материалах одинаково, поэтому амплитуда упругой волны во втором материале не может стать больше чем в первом.

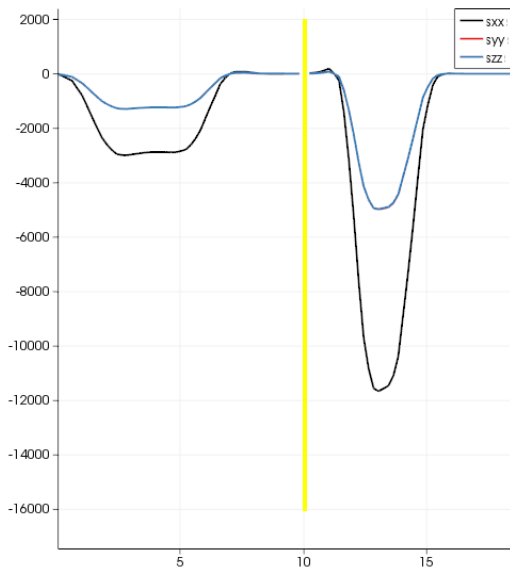
Таким образом, несмотря на простоту используемой модели идеальной упругопластичности, в расчётах удалось получить многие известные физические эффекты.



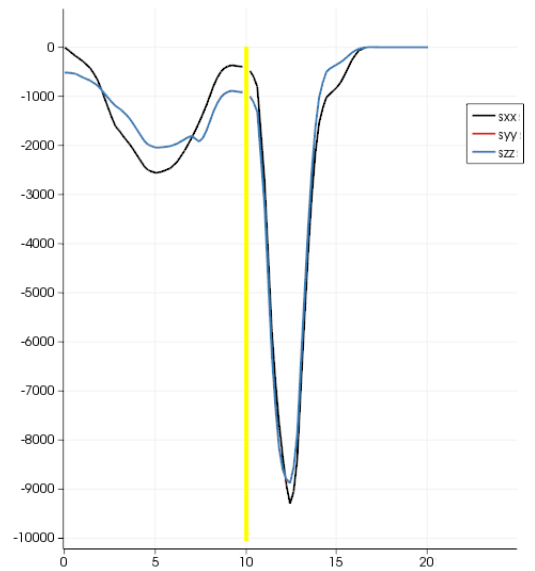
a)



b)



c)



d)

Рисунок 5.6 — График компонент тензора напряжений вдоль направления распространения волны. а) упругость, до контакта, б) упругопластика, до контакта с) упругость, после контакта, d) упругопластика, после контакта

5.2 Моделирование волновых процессов в композиционных материалах

Композиционные материалы всё чаще применяются в различных отраслях промышленности.

В процессе использования композитные конструкции подвергаются высоко- и низкоскоростным ударам. Низкоскоростными называются удары с энергией порядка 200 Дж или менее. При этом, если повреждения от высокоскоростного удара, как правило, видны невооружённым глазом, то повреждения от ударов малой энергии не заметны на поверхности образца, в связи с чем являются в некотором смысле даже более опасным явлением, поскольку снижение остаточной прочности деталей происходит незаметно для невооружённого глаза.

Одно из наиболее частых повреждений, возникающих от низкоскоростных ударов – образование трещины между слоями, из которых склеиваются композитные детали. Такое расслоение возникает вследствие распространения внутри детали механических волн от удара.

Для оперативной диагностики изделий на предмет внутренних повреждений применяются различные техники неразрушающего контроля, в числе которых большую роль играют ультразвуковые исследования. Их принцип действия основан на анализе акустических (упругих) волн, отражённых от внутренних поверхностей контролируемого образца.

Как процесс повреждения материала от удара, так и процесс неразрушающего контроля ввиду близости описывающих их уравнений могут быть численно смоделированы с использованием сеточно-характеристического метода.

5.2.1 Неразрушающий контроль многослойных композитов

Как было обсуждено в 1.5, пластины композиционных материалов могут содержать большое число слоёв, в каждом из которых отлична или реология материала, или параметры, или ориентация главных направлений при ани-

зотропии. В связи с этим представляется интересным изучить возможность моделирования распространения волн в таких пластинах с прямым учётом каждого слоя.

На рис. 5.7 показан срез пластины с одиннадцатью скрещенными анизотропными слоями. Слои уложены вдоль вертикальной оси (плоскости пустоты, перпендикулярные плоскостям материала – просто погрешность отрисовки, связанная с разделением расчётной сетки для параллельности расчёта). Последовательность углов поворота анизотропных слоёв $45^\circ, 0^\circ, -45^\circ, 0^\circ, 0^\circ, 90^\circ, 0^\circ, 0^\circ, -45^\circ, 0^\circ, 45^\circ$. Цветом показано значение давления, так как для него лучше всего видны скачки величины на границах между слоями материала.

Конусом сверху пластины схематически изображён ультразвуковой детектор. Его область взаимодействия с материалом – круг на поверхности. В этом круге задаётся граничное условие фиксированного напряжения конечной длительности, на остальных поверхностях задаётся условие свободной границы. Детектор регистрирует значение всех величин на поверхности внутри круга и усредняет их.

Контакт между слоями материала рассчитывается сквозным счётом, то есть предполагается их полное слипание. Расслоение между слоями материала (на рисунке показано расслоением между вторым и третьим снизу слоями) моделируется как открытая трещина, то есть в месте расслоения для обоих слоёв выставляется условие свободной границы.

Расчёт ведётся сеточно-характеристическим методом на структурированной кубической (точнее, из прямоугольных параллелепипедов) сетке. На один слой материала вдоль вертикальной оси приходится 20 узлов сетки, то есть всего 220 узлов по вертикали, в других направлениях по 300 узлов. Расчёт может проводиться на современном персональном компьютере с восьмью гигабайтами оперативной памяти. При распараллеливании с помощью технологии MPI на восемь процессов время расчёта для прохождения волны туда-обратно составляет порядка пяти часов.

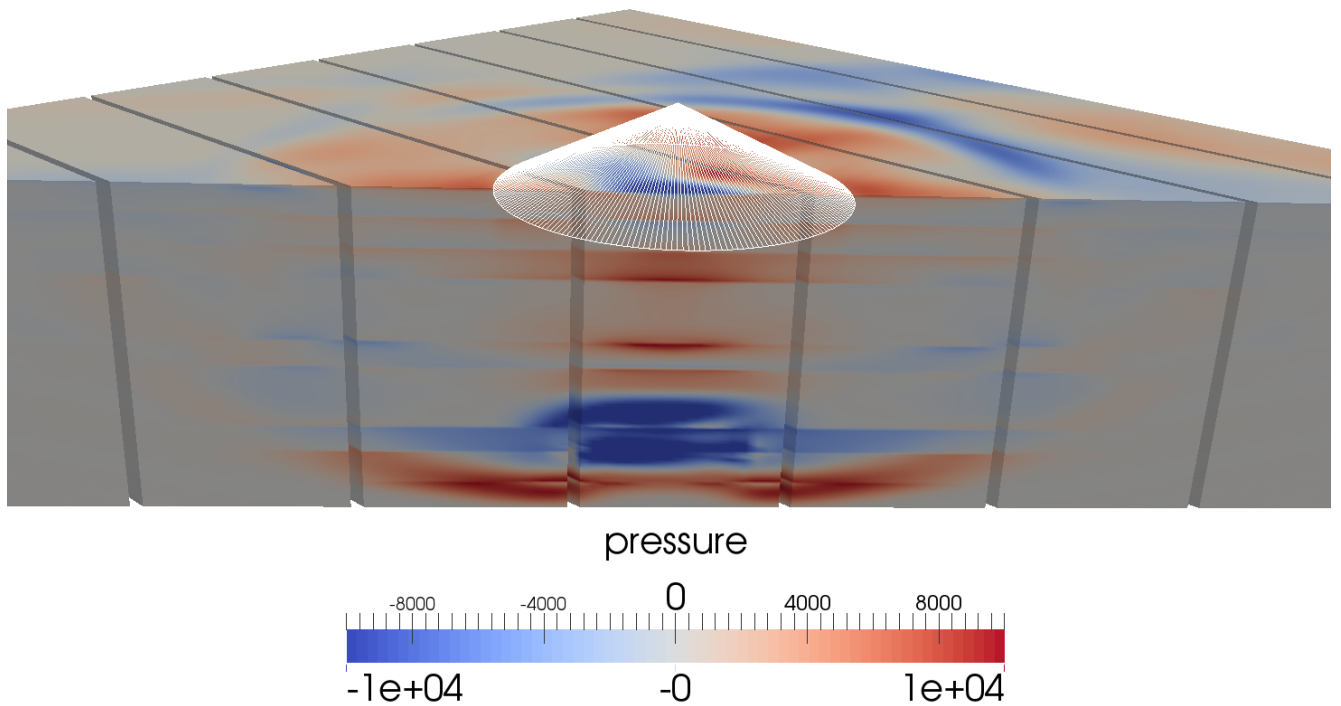


Рисунок 5.7 — Общий вид расчётной постановки неразрушающего контроля многослойного композиционного материала

Представляет интерес сравнить возможности по разрешению дефектов материала при использовании продольных и поперечных волн. На рис. 5.8 показано распространение продольной волны (компонента скорости и нормальная компонента напряжения вдоль направления распространения волны) вдоль вертикальной оси при неразрушающем контроле образца с расслоением между вторым и третьим снизу слоями, а на рис. 5.9 – распространение сдвиговой волны (компонента скорости, перпендикулярная направлению распространения волны и тангенциальная компонента напряжения вдоль направления распространения волны) вдоль вертикальной оси при неразрушающем контроле образца без расслоения.

Несмотря на то, что постановки отличаются наличием расслоения в нижних слоях, очевидно, что наблюдение за продольной волной будет более плодотворно, так как её фронт менее подвержен размытию.

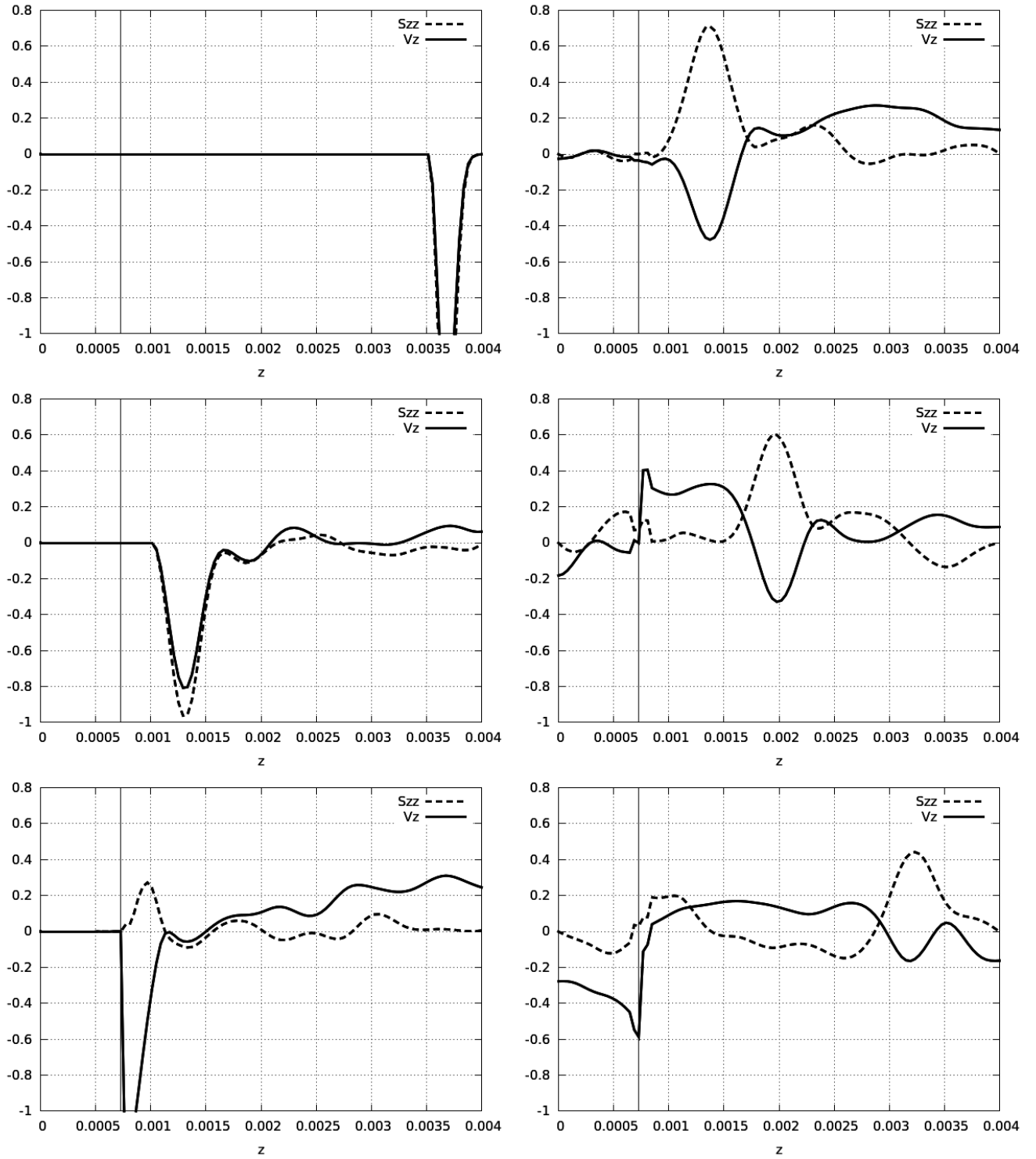


Рисунок 5.8 — Распространение продольной волны вдоль оси z в материале с расслоением. Расслоение показано вертикальной линией. Последовательные моменты времени сверху вниз, слева направо

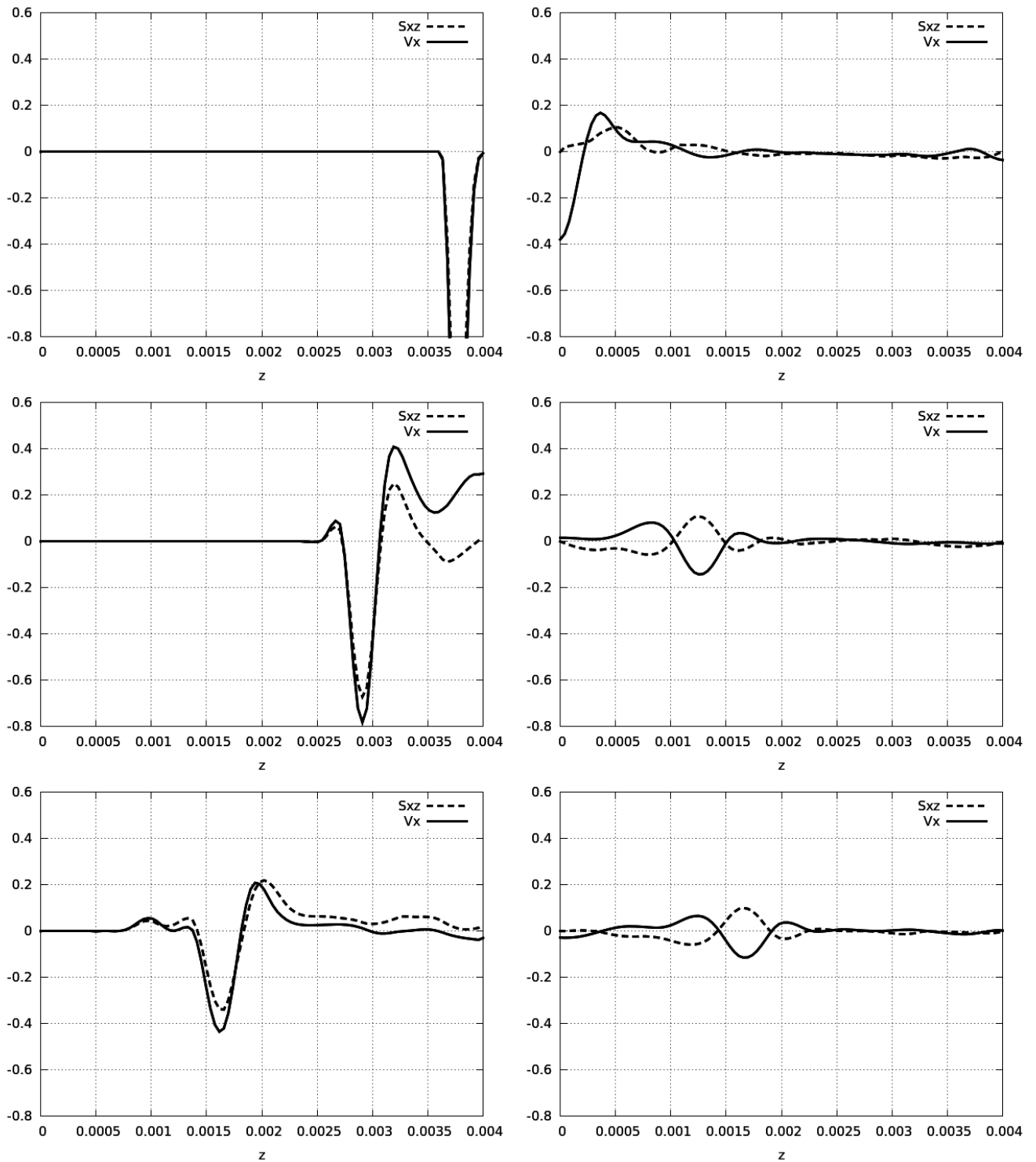


Рисунок 5.9 — Распространение сдвиговой волны вдоль оси z в материале без дефекта. Последовательные моменты времени сверху вниз, слева направо

На рис. 5.11 построены показания детектора (усреднённая по площади детектора вертикальная компонента скорости) во времени на продольных волнах при неразрушающем контроле образца из 11-ти скрещенных анизотропных слоёв для образцов с различной глубиной расслоения. Последний по времени

пик на каждом графике соответствует волне, отражённой от тыльной стороны пластины. Первый по времени пик, при его наличии, соответствует волне, отражённой от свободной границы области расслоения. По расстоянию между пиками можно определить, между какими слоями находится трещина.

Аналогичный расчёт можно провести и для образца с 22-мя слоями. Мелкость сетки в направлении распространения волны в расчёте на один слой материала составляет 10 узлов. На рисунке 5.12 показан двумерный срез (точнее, его левая половина ввиду симметричности) расчётной области. Границы между слоями можно видеть по скачкам значений давления, обусловленным разными скоростями распространения волн в плоскости изображённого среза ввиду их поворота друг относительно друга. Для иллюстрации выбрано значение давления, так как по скачкам именно этой величины лучше всего видно смену слоёв материала.

Из графика показаний детектора во времени 5.10 видно, что и в этом случае можно разрешить отслоение даже самого дальнего тыльного слоя.

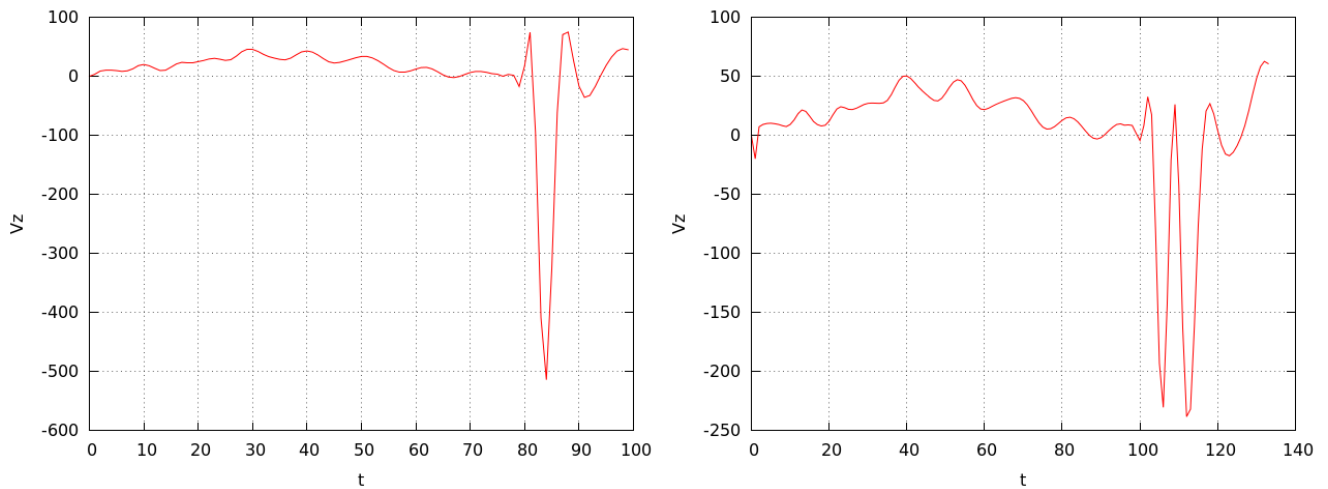


Рисунок 5.10 — Показания детектора во времени для образца с 22-мя слоями. Слева материал без трещины, справа – материал с расслоением между 1-м и 2-м снизу слоями

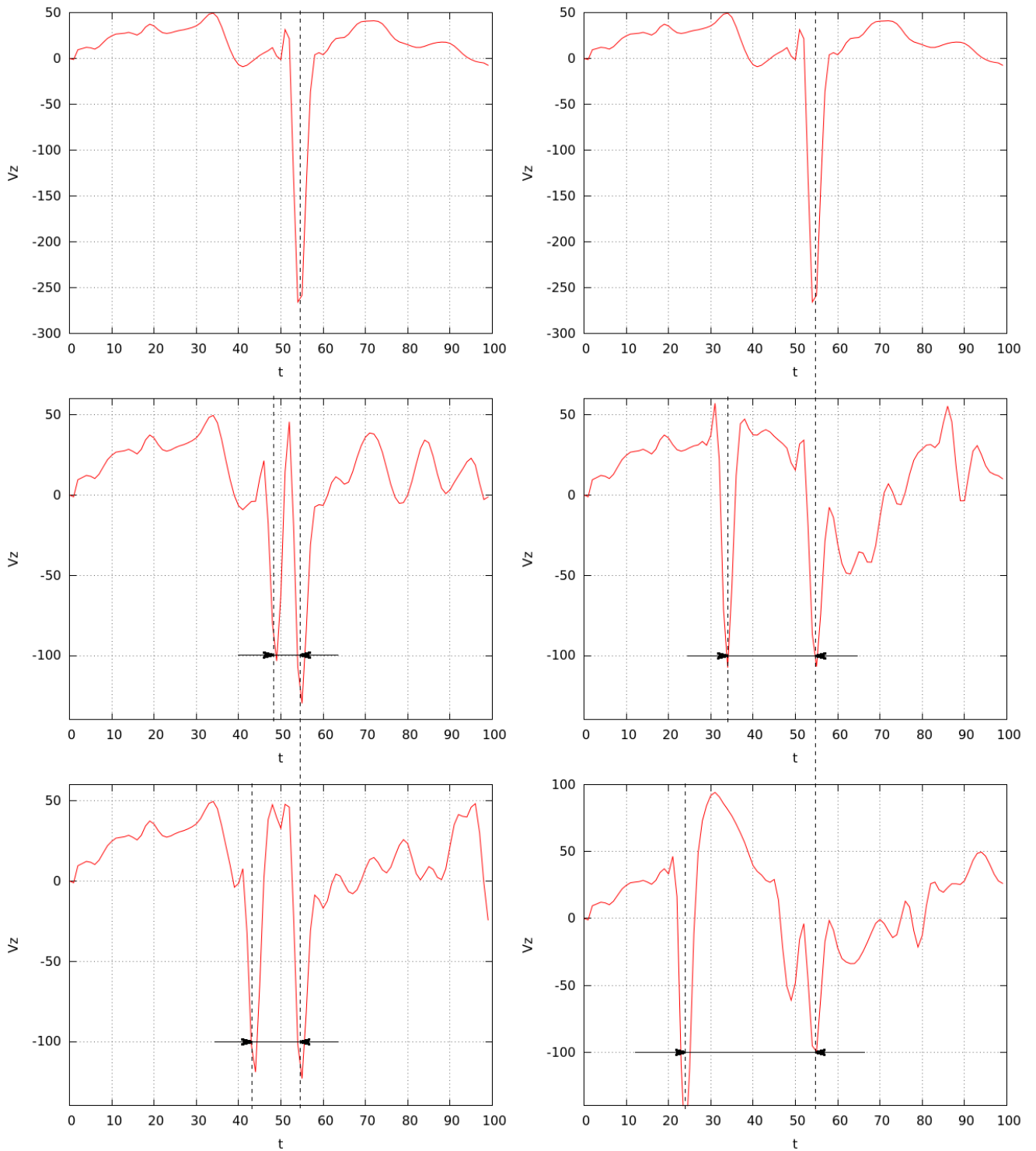


Рисунок 5.11 — Показания детектора во времени для образца с 11-ю слоями. Слева сверху вниз – отклик для материала без расслоения, для материала с расслоением между 1-м и 2-м снизу слоями, для материала с расслоением между 2-м и 3-м снизу слоями. Справа сверху вниз – отклик для материала без расслоения, для материала с расслоением между 4-м и 5-м снизу слоями, для материала с расслоением между 6-м и 7-м снизу слоями

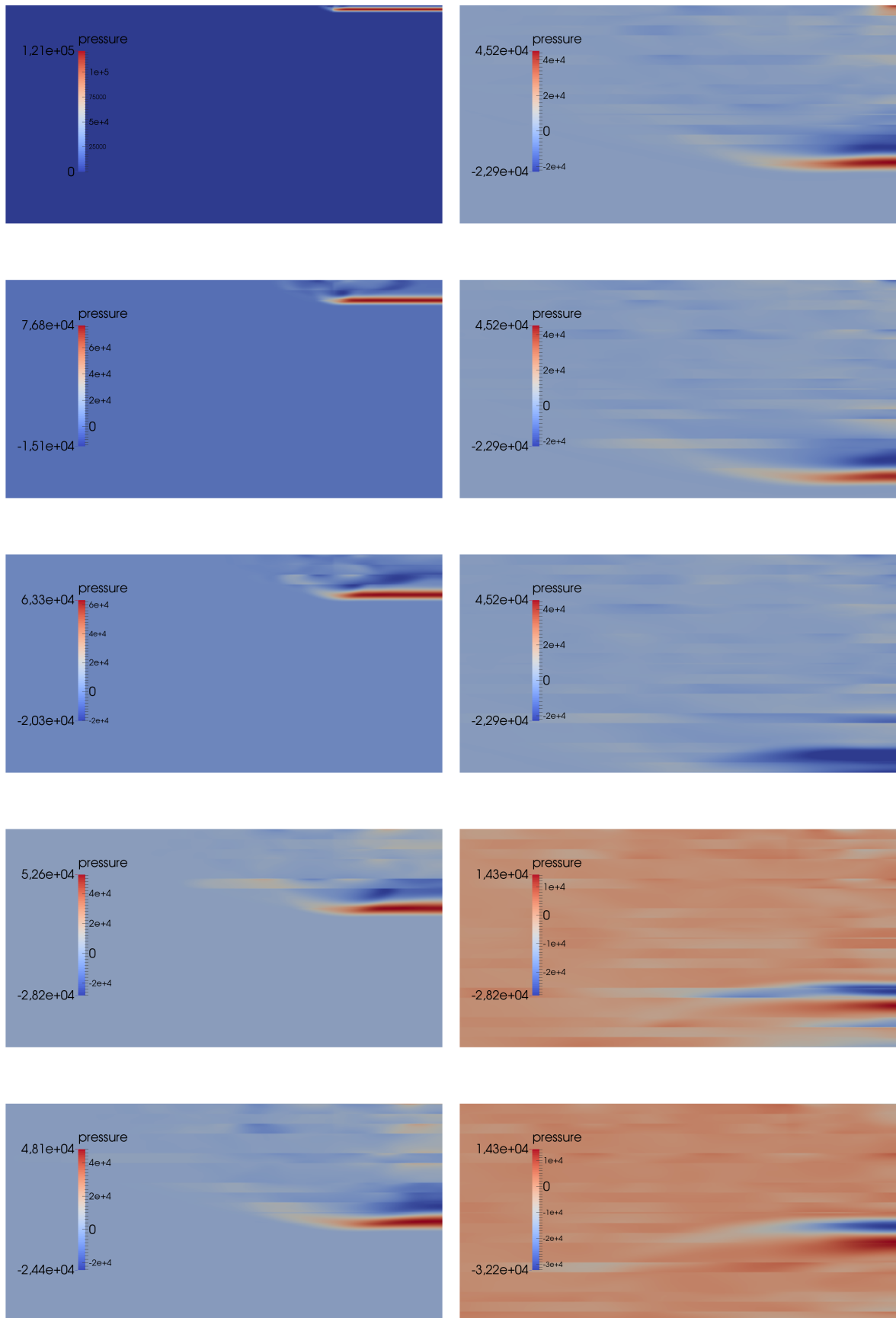


Рисунок 5.12 — Половина поперечного среза образца с 22-мя анизотропными слоями. Последовательные моменты времени сверху вниз, слева направо. Цветом показано значение давления (масштаб величины меняется)

По рисунку 5.13 можно визуальнo проконтролировать сходимость решения для представленных выше постановок при измельчении расчётной сетки, которое вследствие условия Куранта также автоматически означает пропорциональное уменьшение шага по времени.

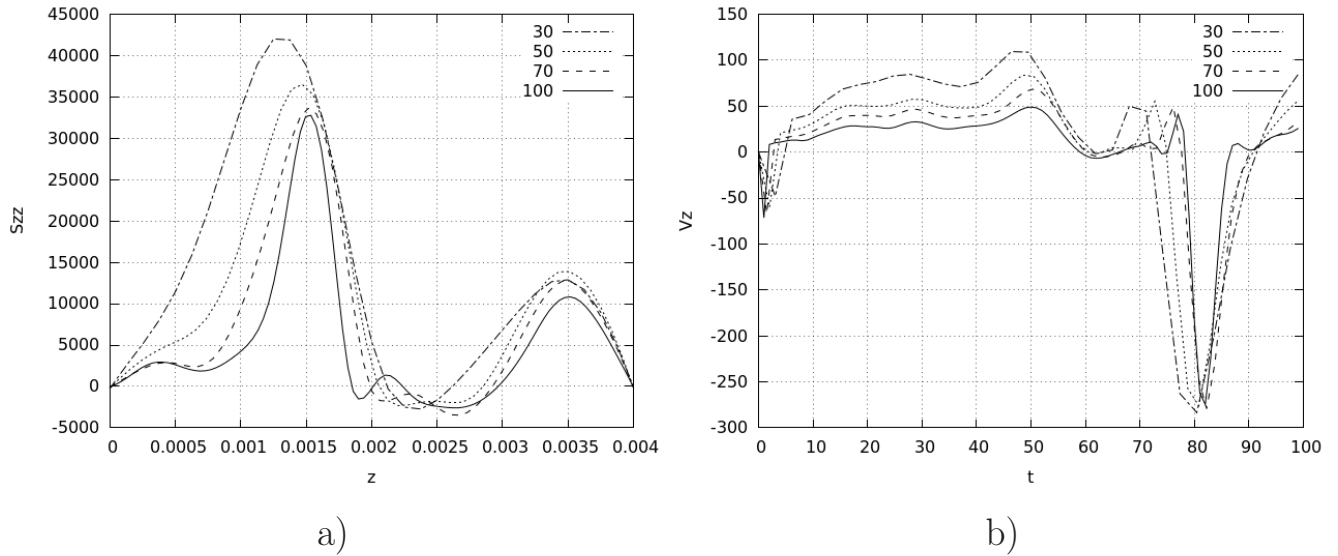


Рисунок 5.13 — Сходимость решения при измельчении сетки. Разными линиями показаны решения для разного количества расчётных узлов вдоль оси z : а) профиль отражённой от тыльной поверхности образца продольной волны, б) показания детектора во времени

5.2.2 Некоторые расчёты на неструктурированной расчётной сетке

В предыдущей главе были продемонстрированы результаты расчётов на структурированной кубической сетке. При всех плюсах такого рода сеток: высокой скорости счёта и хорошем разрешении волновых фронтов, стоит отметить и их ограниченность, связанную с затруднениями при моделировании объектов произвольной формы.

В таких задачах гораздо лучше работают неструктурированные расчётные сетки. Продемонстрируем применение неструктурированной треугольной (рисунок 5.14) и тетраэдральной (рисунок 5.15) сетки для расчёта постановки неразрушающего контроля в пластине, когда внутренний дефект имеет сложную геометрически неправильную форму.

В расчётах используется версия сеточно-характеристического метода для неструктурированных сеток 3. Материал изотропный. Мелкость сетки составляет порядка двухсот узлов на толщину пластины для двумерной постановки и порядка пятидесяти узлов для трёхмерной, мелкость сетки одинаковая по всем направлениям. Дефект моделируется пустой внутренней полостью с условием свободной границы на всех поверхностях.

Метод успешно справляется с отражениями волн от многочисленных границ дефекта. Можно видеть огибание волнами краёв дефекта – дифракцию, а также распространение релеевских волн от начального возмущения по поверхности пластины.

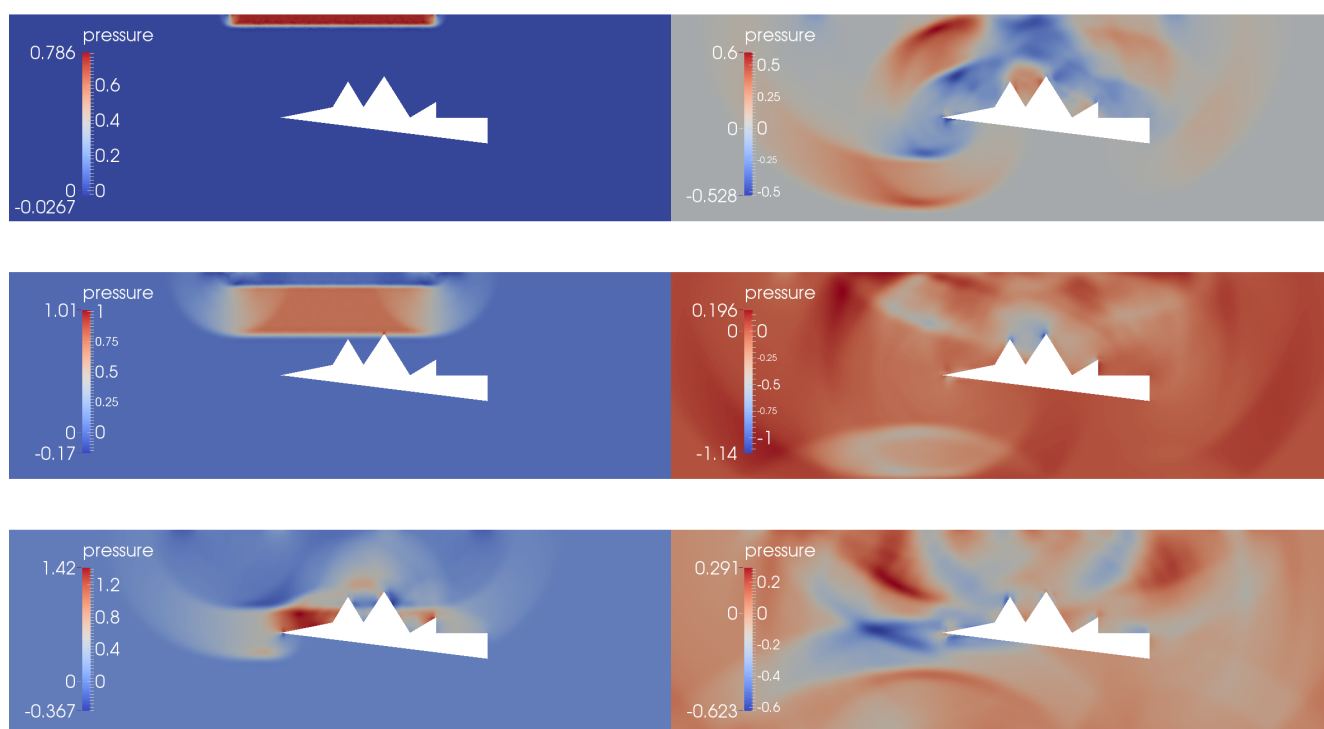


Рисунок 5.14 — Распространение волн в образце с дефектом произвольной формы в 2D. Треугольная сетка. Последовательные моменты времени сверху вниз, слева направо. Цветом показано значение давление (масштаб величины меняется)

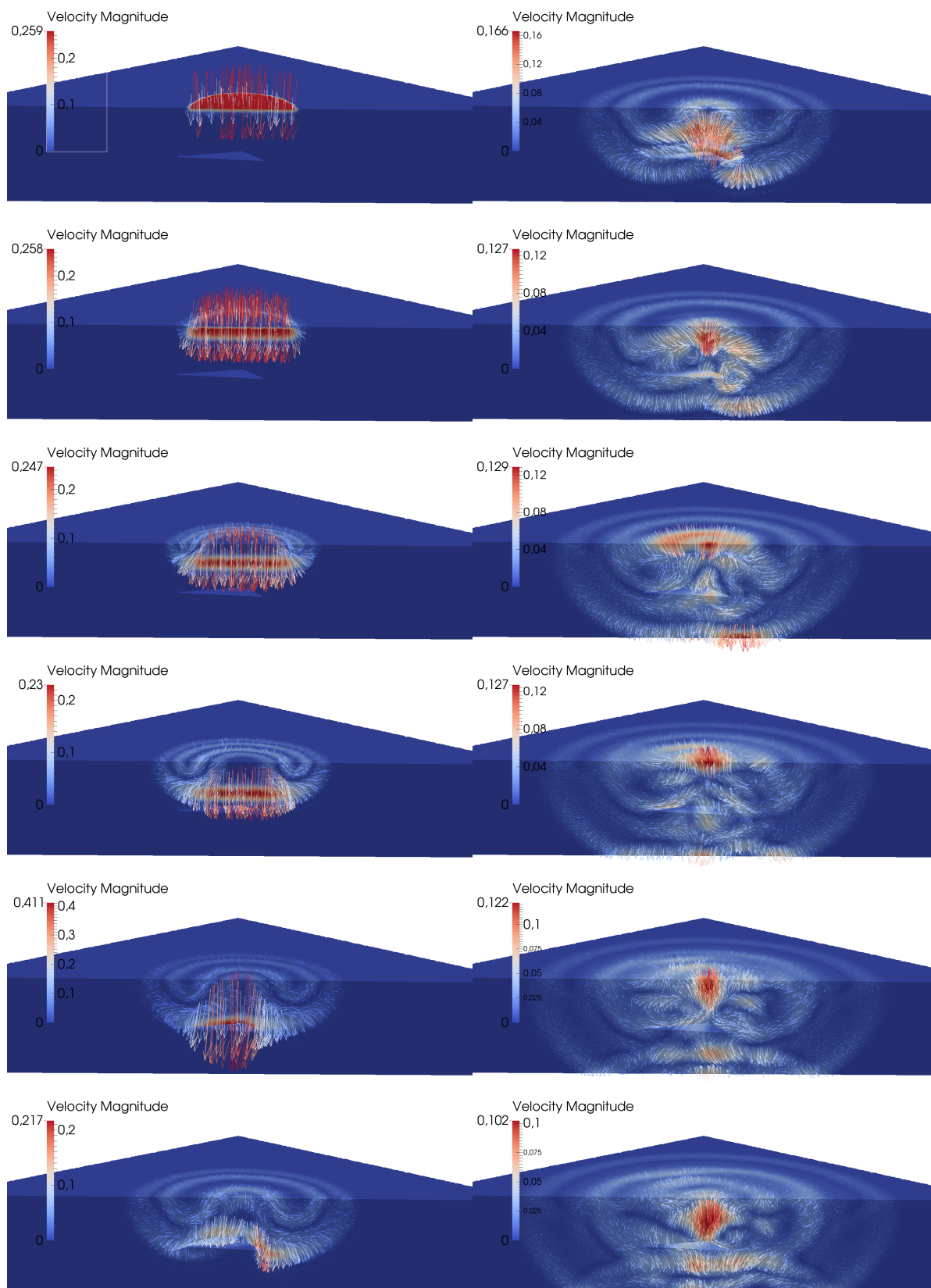


Рисунок 5.15 — Распространение волн в образце с дефектом произвольной формы в 3D. Тетраэдральная сетка. Последовательные моменты времени сверху вниз, слева направо. Цветом показано значение амплитуды скорости (масштаб величины меняется), стрелками показаны вектора скорости

5.2.3 Моделирование реального эксперимента неразрушающего контроля композиционных материалов

Изложенные выше результаты являются гипотетическими постановками, иллюстрирующими общие свойства и возможности метода. Представляет, однако, интерес провести сравнение моделирования с реальным экспериментом неразрушающего контроля.

Экспериментальные данные были предоставлены сотрудниками НИО-3 Центрального аэрогидродинамического института имени Жуковского В.И. Голованом, А.О. Шустровым и М.О. Тарасовым.

Ультразвуковой эхо-импульсный контроль композитной пластины проводится после низкоскоростного удара по ней металлического бойка, который формирует расслоение внутри пластины между слоями композитного материала. Для диагностики внутренних повреждений применяется дефектоскоп SiteScan D-20 с преобразователем RDT2550 [56], с которого снимаются показания интенсивности отражённой волны во времени.

Схематически та часть экспериментальной постановки, которая моделируется численно, изображена на рисунке 5.16.

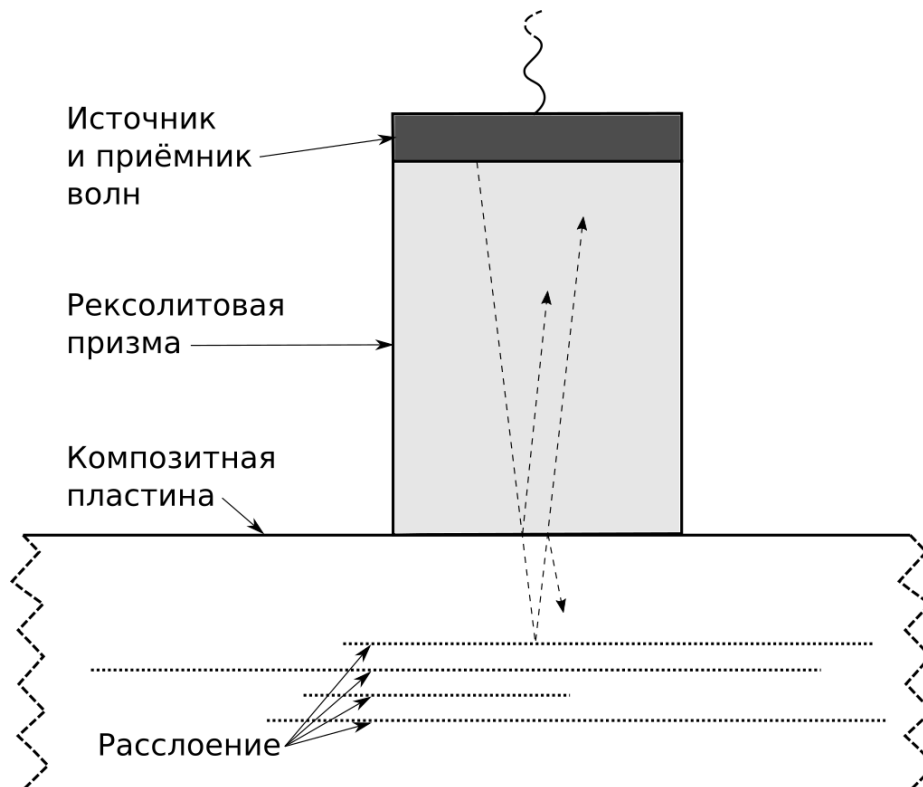


Рисунок 5.16 — Схема эксперимента

Образец – многослойная пластина из композиционного материала толщиной порядка 6 миллиметров. В данном случае многослойность материала не моделировалась явно, вместо этого использовались усреднённые характеристики пластины в целом. Это, во-первых, существенно сокращает объём вычислений, а во-вторых, параметры отдельных слоёв всё равно в точности не известны. Материал пластины считается орторомбически анизотропным 1.6, осреднённые параметры принимаются равными (плотность измеряется в г/куб.см, модули упругости – в ГПа):

ρ	c_{11}	c_{22}	c_{33}	c_{12}	c_{13}	c_{23}	c_{44}	c_{55}	c_{66}
1.6	23.3	12.0	12.0	6.96	6.96	6.96	1.67	5.0	5.0

Расслоение в материале моделируется как открытая трещина аналогично предыдущей главе.

В отличие от гипотетических постановок в главе 5.2.1, в случае реального эксперимента оказалось необходимым учитывать и напрямую моделировать часть самого прибора неразрушающего контроля, которая находится в контакте с образцом – рексолитовую призму, так как факт её наличия существенно меняет вид графиков. Диаметр призмы 6.35 мм по документации, высота порядка 10 мм. Параметры материала рексолитовой призмы (единицы измерения те же):

ρ	λ	μ
1.05	3.03	1.39

Точное устройство датчика автору неизвестно, однако из доступной документации, общефизических соображений и сопоставления экспериментальных и численных результатов были сделаны следующие предположения:

Волна в призме датчика возбуждается на её верхней поверхности, проходит через призму, дальше часть отражается обратно, а часть проходит в материал, откуда затем часть приходит обратно в призму. Вот эта последняя пришедшая из образца волна и несёт информацию о его внутреннем состоянии.

Принцип передачи механических возмущений в аналоговый сигнал и обратно – пьезоэффект. В пьезокристаллах возникновение электрического поля обусловлено в первую очередь деформацией, а не приложенной силой. Поэтому логично предположить, что величина, измеряемая датчиком – продольная компонента скорости. Поскольку алгоритм дальнейшей обработки пришедшего на датчик сигнала в самом приборе неизвестен (а это может быть некое

сглаживание или усиление по времени), при построении графиков сигнала с моделируемого датчика был просто взят модуль вертикальной компоненты скорости, что дало приемлемое совпадение с показаниями прибора.

Сигнал, испускаемый датчиком, согласно документации – гауссиана, модулированная синусоидой, ширина гауссианы 0.1 мкс, период модулирующей синусоиды порядка ширины гауссианы.

Моделирование проводилось аналогично предыдущей главе. Мелкость кубической расчётной сетки – 20 узлов на 1 мм. Контактное условие между призмой и образцом – полное сцепление.

На расчётных графиках по горизонтальной оси идут микросекунды. На графиках с прибора по горизонтальной оси в качестве времени – половина расстояния, которое за такое время прошла бы волна в материале. Стробы G1 и G2 – промежутки времени, в течении которых прибор ожидает появления сигнала, превышающего пороговую амплитуду.

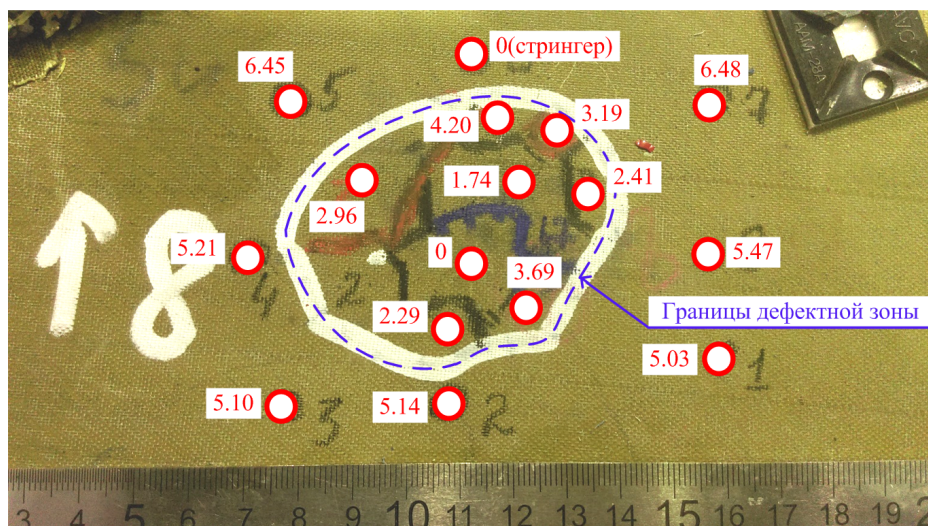


Рисунок 5.17 — Фото эксперимента. Размеченные по глубинам зоны на верхней поверхности пластины

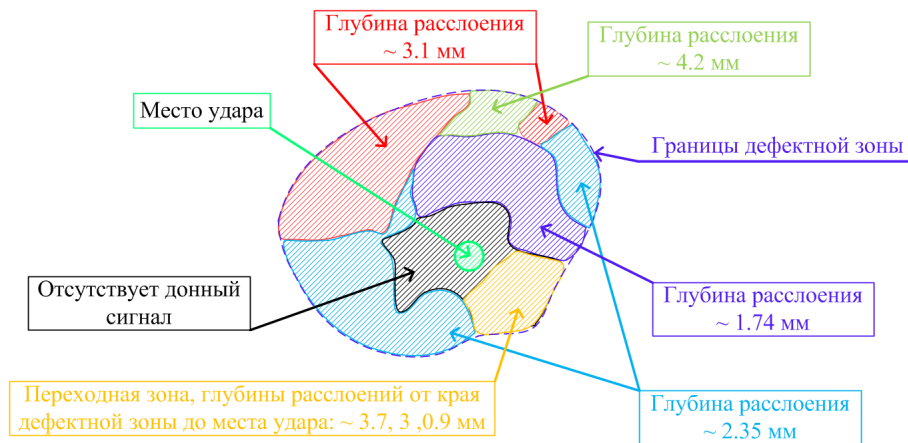


Рисунок 5.18 — Схема результатов эксперимента. Размеченные по глубинам зоны на верхней поверхности пластины

На рисунках 5.2.3 и 5.2.3 представлено сравнение реальных показаний прибора с результатами, полученными при численном моделировании – модуль вертикальной компоненты скорости. Первый и самый большой пик на всех графиках – первое отражение начальной волны от нижней поверхности рексолитовой призмы. Остальные пики связаны либо с повторными переотражениями внутри призмы, либо с волнами, прошедшими в образец и затем обратно в призму. Последние и несут полезную информацию.

Первый случай, графики на 5.2.3 а), соответствует тестированию прибора без образца – на нижней поверхности призмы свободная граница, второй пик на графиках соответствует повторному переотражению волны внутри призмы.

Случаи на графиках 5.2.3 b-d) и 5.2.3 а-с) соответствуют точкам на фотографии 5.17 с соответствующей глубиной расслоения. Видны многочисленные переотражения, природу каждого можно в отдельности рассмотреть. В частности, второй пик на каждом графике соответствует приходу на датчик волны, отражённой от свободной границы внутри образца, будь то тыльная сторона пластины или свободная поверхность открытой трещины.

Последний случай, графики на 5.2.3 d), соответствует месту удара, в котором отсутствует донный сигнал из-за разрушения материала – волна от прибора поглощается раскрошившимся от удара веществом.

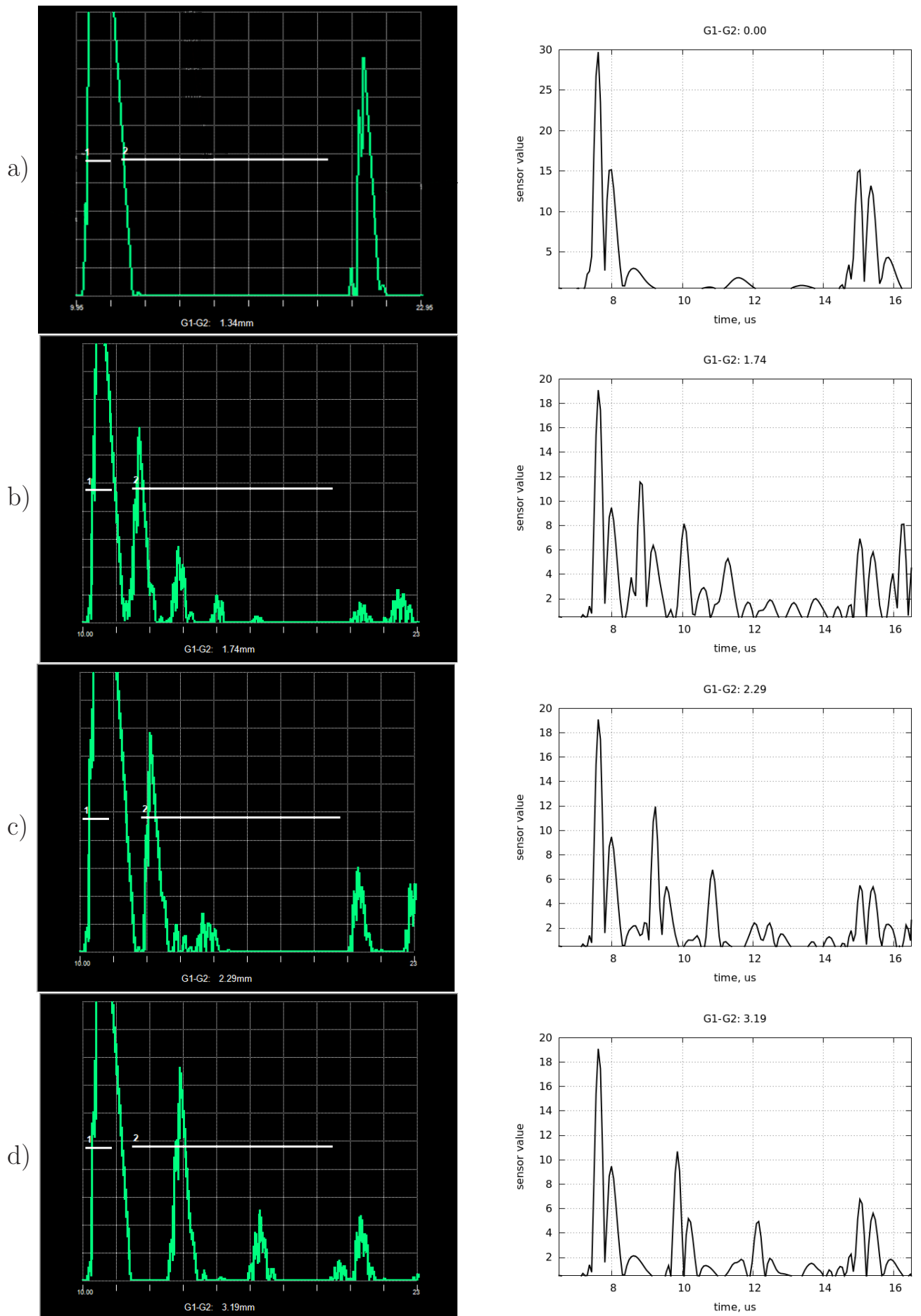


Рисунок 5.19 — Сравнение экспериментальных (слева) и численных (справа) результатов

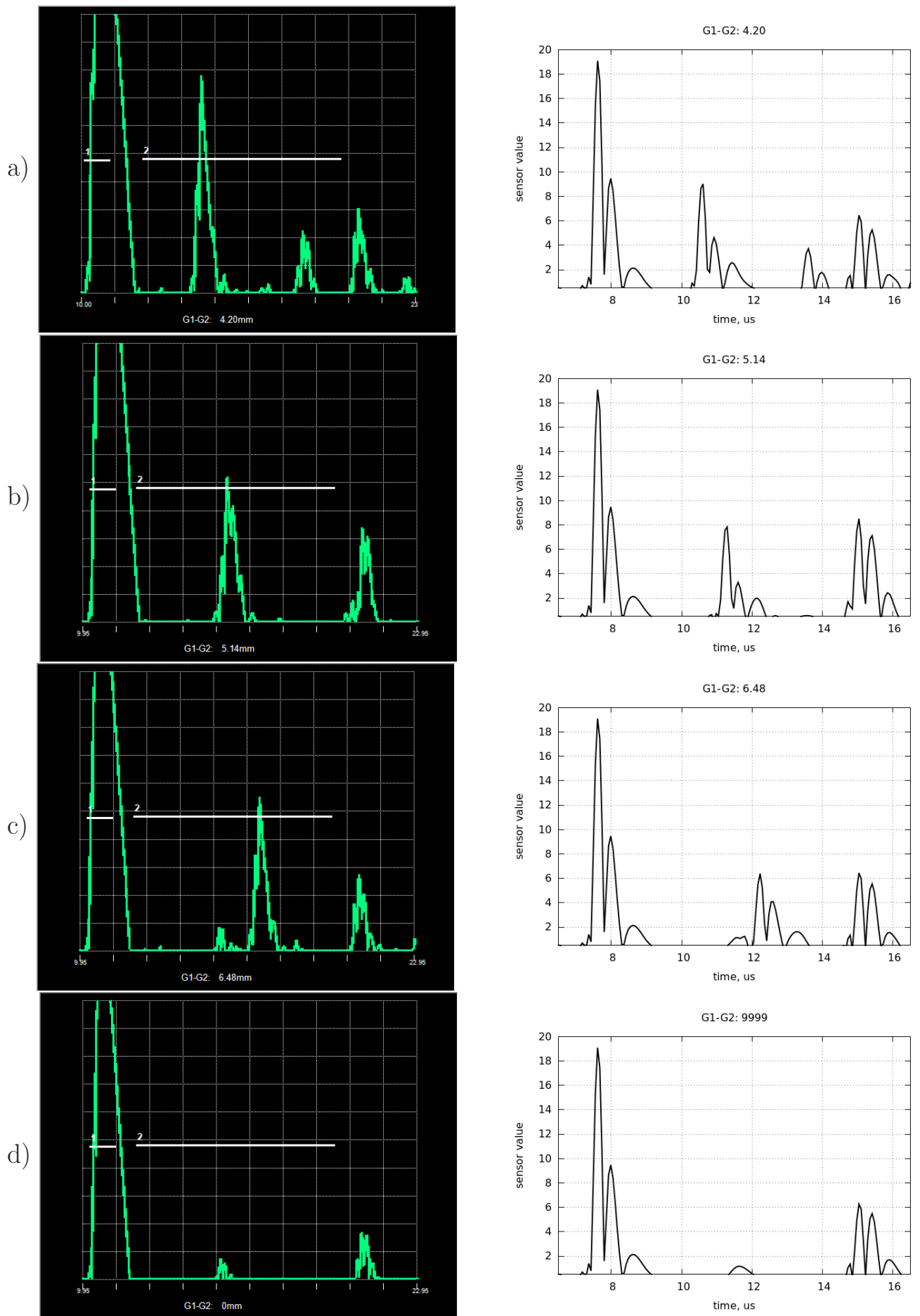


Рисунок 5.20 — Сравнение экспериментальных (слева) и численных (справа) результатов – продолжение

На всех графиках можно видеть небольшое опережение сигнала на расчетном графике относительно экспериментального. Это может быть вызвано несколькими причинами. Во-первых, реологические параметры изучаемого материала (полимерного композита) измеряются по стандартным методикам при статической нагрузке. Полимеры имеют сложную нелинейную реологию, которая в узких диапазонах амплитуды и скорости нагружения с хорошей точностью приближается линейной. При этом, параметры, измеренные при очень медленном нагружении могут существенно отличаться от параметров при быстром нагружении – ударной нагрузке и прохождении упругих волн. Для корректного измерения свойств материала необходимо проведение экспериментов при динамической нагрузке. Во-вторых, скорость распространения волн в композите может зависеть от направления укладки и качества волокон. Небольшие погрешности в их толщине могут приводить к заметному изменению реологических свойств композитной пластины в целом.

С учётом этих замечаний, а также неполной информации о внутренней конструкции прибора, можно считать совпадение численных и экспериментальных результатов удовлетворительным.

5.2.4 Получение расчётных А- и В-сканов

Как правило, результаты расчётов визуализируются либо на изображениях трёхмерных объектов и их срезов, что позволяет детально изучать волновые поля внутри исследуемых тел, либо на одномерных графиках в зависимости от времени или координаты, что позволяет делать различные количественные оценки.

В предметной области ультразвуковых исследований распространены также и другие типы визуализации – А- и В-сканы, получаемые с датчиков, оснащённых фазированной решёткой [57]. Оба типа сканов фактически представляют собой перенос одномерных графиков зависимости прошедшего волнового отклика от времени построчно на двумерное изображение с интенсивностью, пропорциональной амплитуде величины на графиках.

При этом каждая строка изображения для А-сканов является просто показаниями каждой отдельной ячейки фазированной решётки, а каждая строка

изображения В-скана – это зависимость сигнала от времени вдоль каждого направления лучей, испускаемых фазированной решёткой.

Такие визуализации можно получить и в численном эксперименте: сначала рассчитывается отклик среды на элементарные возмущения – испускаемые конкретной ячейкой фазированной решётки в конкретном направлении, а затем А-сканы формируются укладкой таких графиков построчно в изображение, а для В-сканов посылка луча под нужным углом реализуется сложением волн, испущенных из разных ячеек с соответствующими фазовыми задержками.

На рисунках 5.21, 5.22, 5.23, 5.24 показаны численно рассчитанные А- и В-сканы неповреждённого образца и образца с расслоением.



Рисунок 5.21 — А-скан образца без повреждения



Рисунок 5.22 — В-скан образца без повреждения

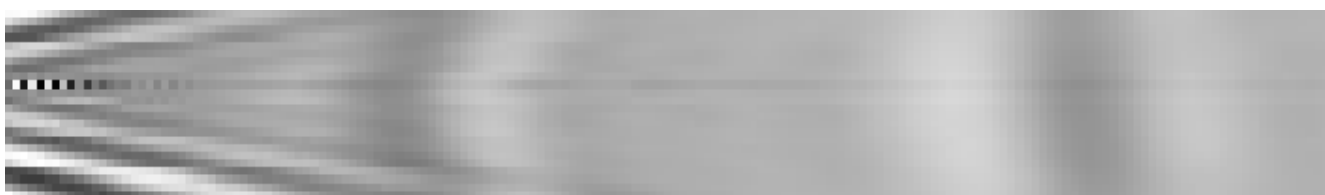


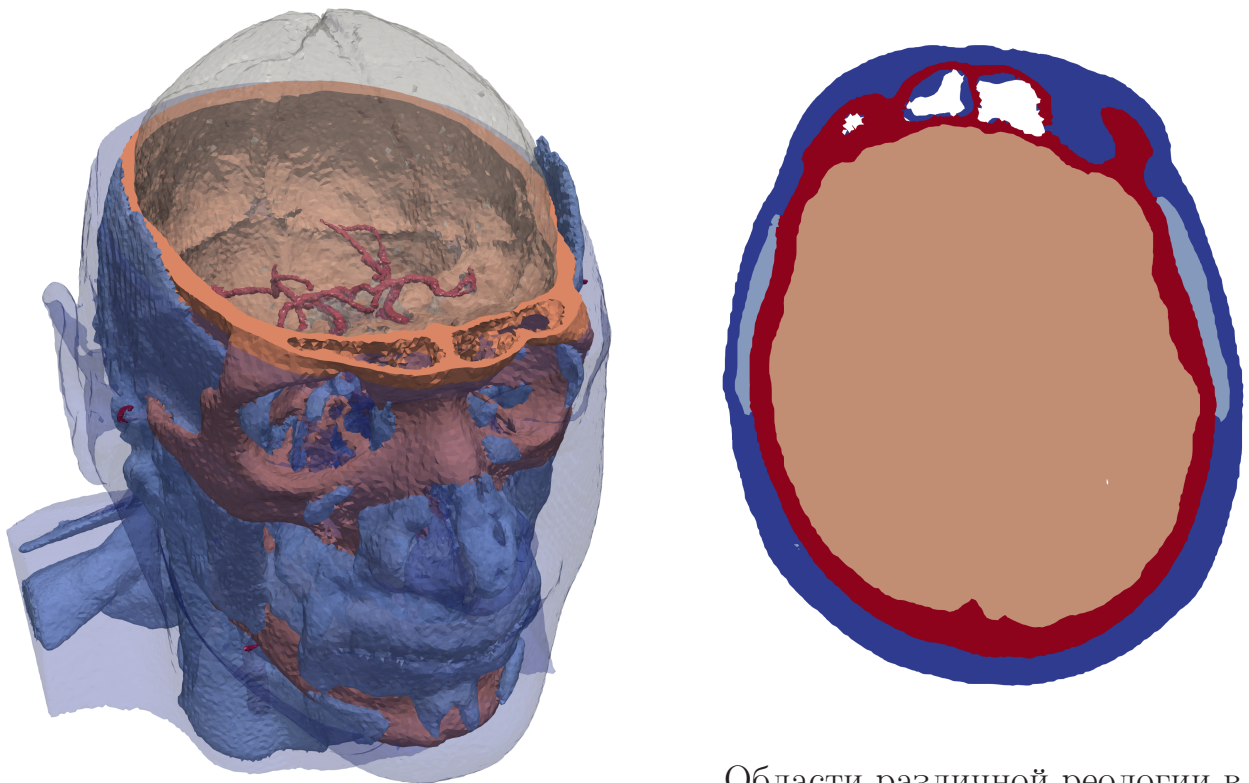
Рисунок 5.23 — А-скан образца с расслоением



Рисунок 5.24 — В-скан образца с расслоением

5.3 Моделирование ультразвукового исследования в биологических тканях

В качестве основного и наиболее показательного результата применения численного метода на неструктурированных расчётных сетках можно продемонстрировать расчёт распространения упругих волн малой амплитуды в тканях головы человека с явным выделением пяти тканей: соединительной, мышечной, костной, мозга и сосудов (см. рисунок 5.25).

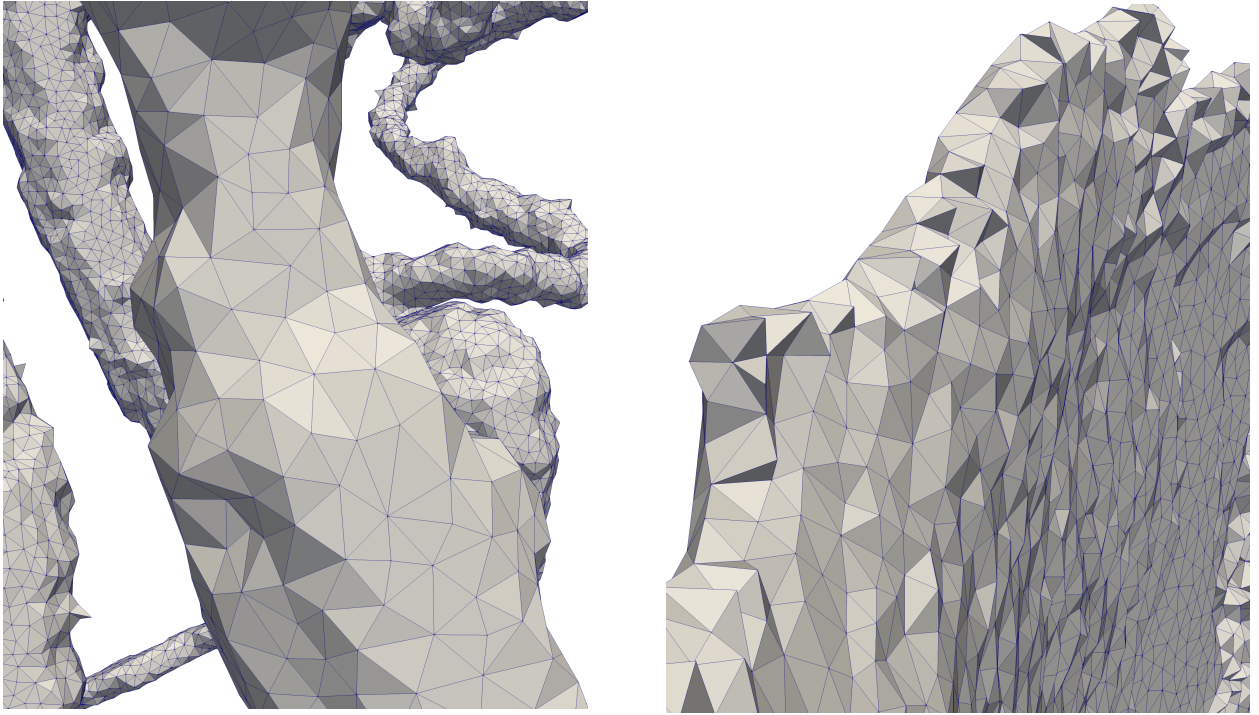


Области различной реологии в 3D

Рисунок 5.25 — Расчётная область: геометрия и материалы

Области различной реологии в
горизонтальном срезе

Для проведения расчётов используется тетраэдральная расчётная сетка, построенная средствами программного комплекса ИВМ РАН "Ani3D"[33]. В наиболее подробном её варианте содержится 1.4 млн. вершин и 8.5 млн. ячеек, что позволяет разрешить крупные сосуды и смену слоёв ткани в височной области: на наиболее тонкие места приходится по 5-10 ячеек, что продемонстрировано на рисунке 5.26.



Сосуды

Мышечная ткань в височной области

Рисунок 5.26 — Фрагменты расчётной сетки

Расчёты проводились сеточно-характеристическим методом 3 в приближении моделей линейной упругости 1.2.3 и акустики 1.2.4 с моделированием вязкости материалов в рамках модели Максвелла 1.4.

Начальные условия – нулевые напряжения и скорости. Граничные условия – свободная граница везде, кроме области воздействия. В области воздействия задаётся нормальная компонента тензора напряжений для модели упругости и значение давления для модели акустики. Её зависимость от времени – синусоида, модулированная гауссианой – часто встречающаяся форма импульса в приборах неразрушающего контроля:

$$f(t) = \sin\left(\omega(t - t_0)\right) \cdot \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2\tau^2}\right),$$

$$\tau = 5 \cdot 10^{-6} \text{ sec}$$

$$t_0 = 2\tau$$

$$\omega = 2\pi/\tau$$

Используемые усреднённые параметры биологических тканей сведены в таблицу 5.3. В ней ρ – плотность, K – модуль всестороннего сжатия (используется только в модели акустики), λ и μ – параметры Ламе (используются только в модели упругости), τ_0 – время релаксации в модели Максвелла. Данные

для плотности и модуля всестороннего сжатия взяты из Википедии, параметры Ламе пересчитаны из модуля всестороннего сжатия из условия постоянства скорости продольной волны и фиксированной пропорции между λ и μ .

Ткань	$\rho, \frac{g}{cm^3}$	K, GPa	λ, GPa	μ, GPa	$\tau_0, 10^{-5} sec$
Соединительная	0.916	1.886	1.415	0.236	1.585
Мышечная	1.041	2.648	1.968	0.331	0.878
Мозговая	1.030	2.475	1.856	0.309	1.293
Костная	1.904	7.854	5.891	0.982	∞
Сосуды	1.066	2.784	2.088	0.348	1.288

На рисунках 5.28 и 5.29 продемонстрированы результаты расчётов, полученные с использованием модели линейной упругости и максвелловского затухания. Волновая картина в трёхмерном пространстве представлена на рисунке 5.28, на горизонтальном срезе – на рисунке 5.29, соответствующая им цветовая схема – рисунок 5.27. Размер шага по времени равен $8 \cdot 10^{-7}$ секунд.

Волновая картина давления, получаемая при использовании модели акустики вместо модели упругости, не имеет принципиальных отличий при данных значениях констант материалов.

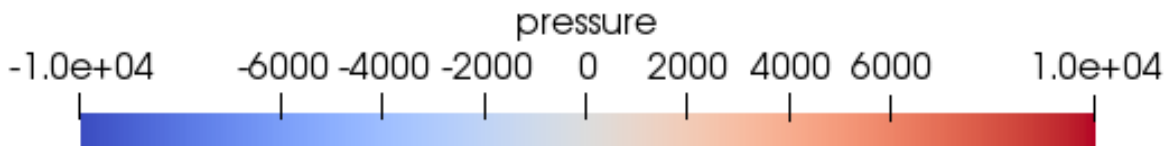


Рисунок 5.27 — Соответствие цвета значениям давления для рисунков 5.28 и 5.29

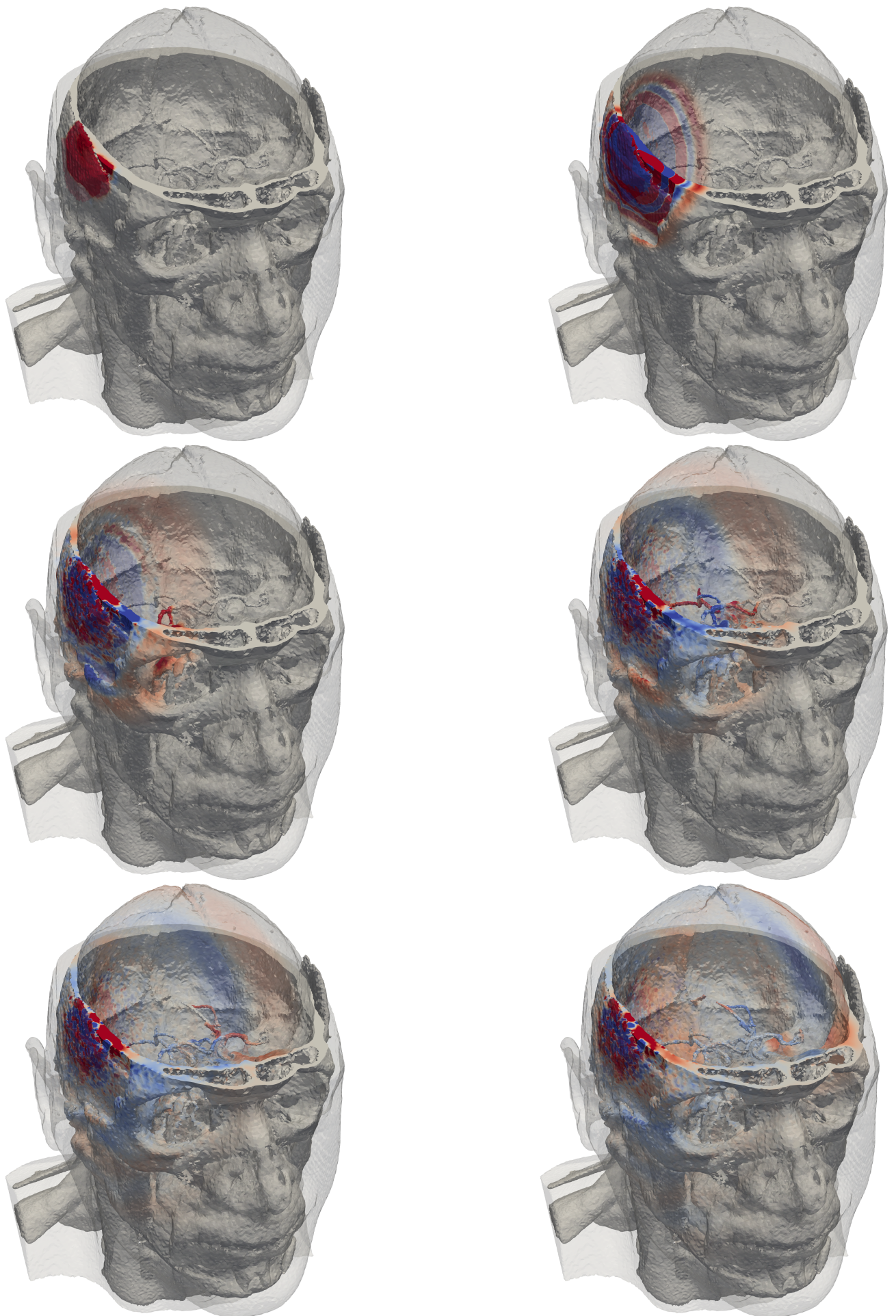


Рисунок 5.28 — Волновая картина в 3D. Слева направо, сверху вниз: 1, 7, 13, 19, 25, 31-й шаги по времени. Цветом показаны значения давления (см. рис.

5.27)

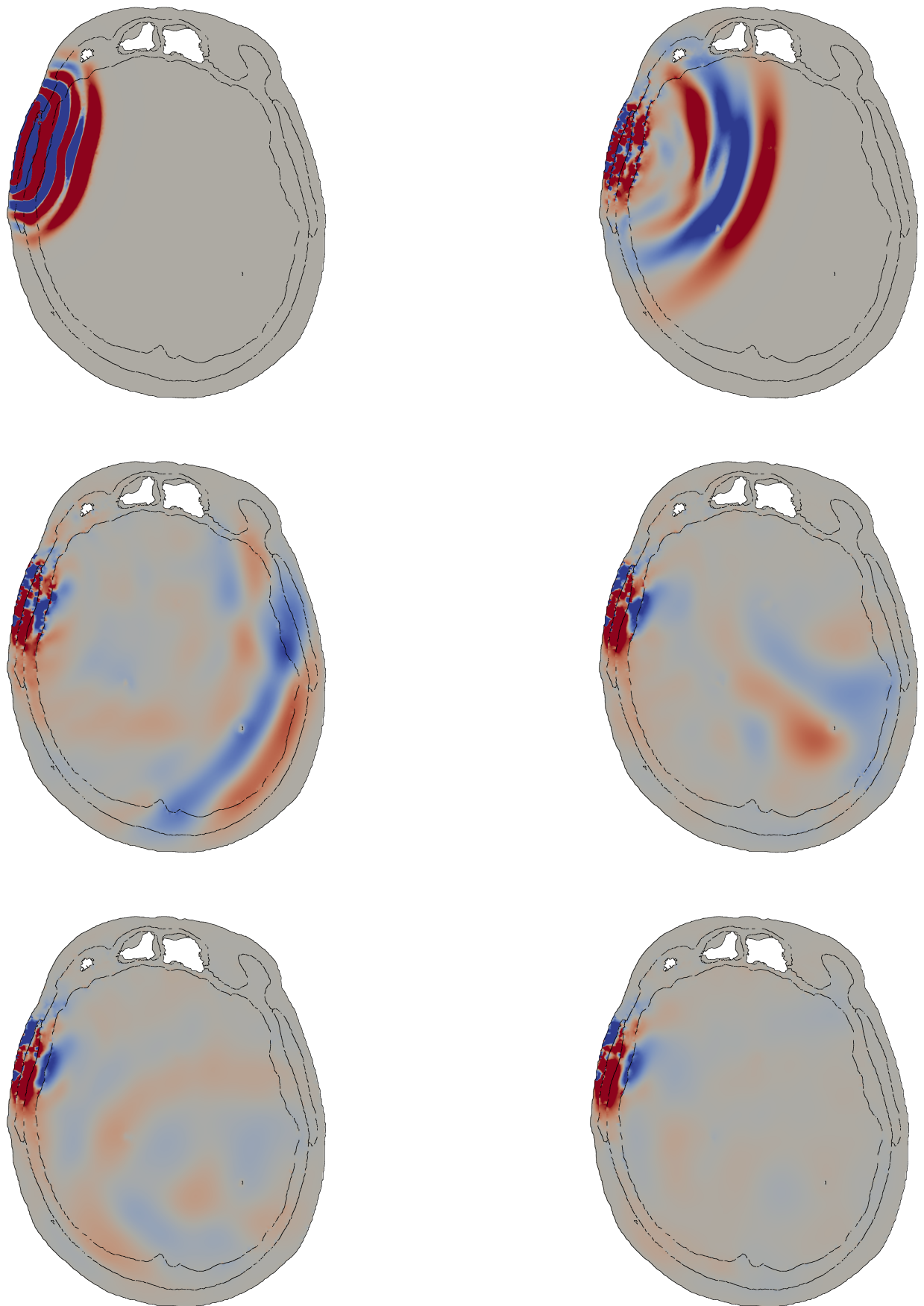


Рисунок 5.29 — Волновая картина в горизонтальном срезе. Слева направо, сверху вниз: 8, 20, 40, 60, 75, 90-й шаги по времени. Цветом показаны значения давления (см. рис. 5.27), чёрными линиями разделены области различной реологии

Представленные волновые картины иллюстрируют проблему используемого численного метода, обсуждавшиеся в 3.2.4 и 3.2.5. Как можно видеть, в местах контакта областей интегрирования образуются нефизичные незатухающие осцилляции, в увеличенном масштабе показанные на рисунке 5.30. По мнению автора, такие осцилляции не могут быть устранены в рамках версии сеточно-характеристического метода, основанного на расщеплении по перпендикулярным направлениям.

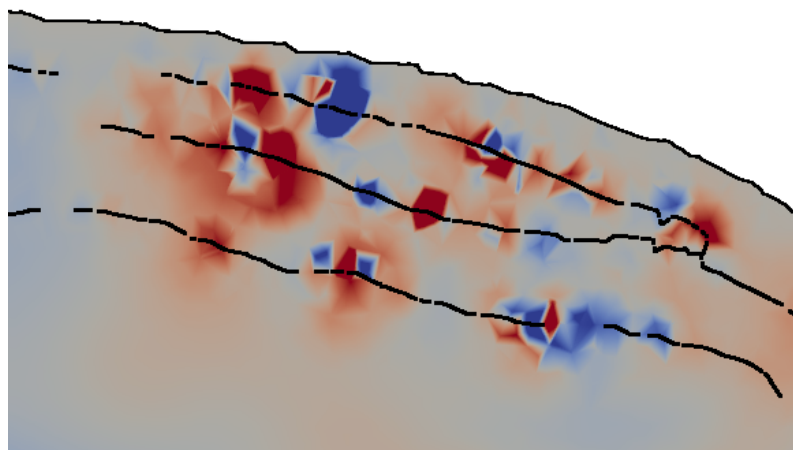


Рисунок 5.30 — Нефизичные осцилляции на контакте областей интегрирования

Как можно видеть из данного примера, адаптация сеточно-характеристического метода к расчётам на существенно неструктурированных расчётных сетках сталкивается с трудностями, особенно в трёхмерном случае.

Это обусловлено тем, что, в отличие от большинства численных методов, применяемых на неструктурированных расчётных сетках, в сеточно-характеристическом, во-первых, значения интегрируемой функции представляются в узлах, а не в ячейках сетки, во-вторых, существенно используется расщепление по направлениям. Как было продемонстрировано в разделах 3.2.4 и 3.2.5, оба эти свойства являются нежелательными для неструктурированных сеток и ведут к нефизичным осцилляциям и даже неустойчивости вблизи изогнутых граничных и контактных поверхностей.

Заключение

Основные результаты работы

1. Разработана математическая модель для расчётов волновых процессов в среде при проведении ультразвукового неразрушающего контроля изотропных и анизотропных материалов, в том числе сложной геометрии, в приближении малых деформаций.
2. Разработан численный метод из семейства сеточно-характеристических. Метод рассчитан на применение как на периодических прямоугольных, так и на непериодических тетраэдральных расчётных сетках, благодаря чему позволяет проводить расчёты в областях сложной формы, вплоть до моделирования распространения волн в частях тела человека с выделением различных тканей. Произведён подробный анализ метода на треугольных и тетраэдральных расчётных сетках с указанием сложностей, связанных с непериодичностью сетки и вызывающих неустойчивость расчёта. Предложенные в работе модификации метода позволили провести ряд расчётов, до этого неустойчивых.
3. Создан параллельный программный комплекс на C++, реализующий предложенные модель и метод. За счёт использования техники шаблонизации программный комплекс расширяемый без потери производительности, на данный момент реализованы модели изотропного и анизотропного упругого тела и акустики, периодические прямоугольные и непериодические тетраэдральные и треугольные расчётные сетки.
4. Проведены расчёты, моделирующие эксперимент по ультразвуковому неразрушающему контролю композитной панели с учётом её анизотропной реологии и с учётом влияния геометрии прибора на его показания. Результаты моделирования сверены с экспериментальными данными для верификации модели, метода и программной реализации.
5. Проведены расчёты, моделирующие ультразвуковые исследования в биологических тканях головы человека с явным выделением соединительной, костной, мозговой, мышечной ткани и сосудов. На сетках такой неоднородности и непериодичности, исходя из известных автору работ, устойчивый расчёт сеточно-характеристическим методом удался впервые.

Благодарности Автор выражает благодарность научному руководителю Васюкову А.В. за научное руководство и поддержку этой работы, заведующему кафедрой Петрову И.Б. за полезные советы, Беклемешиевой К.А и Ермакову А.С. за многолетнюю совместную деятельность в данном направлении, а также всему коллективу кафедры информатики и вычислительной математики МФТИ за плодотворные обсуждения этой работы.

Также автор выражает благодарность сотрудникам НИО-3 Центрального аэрогидродинамического института имени Жуковского В.И. Головану, А.О. Шустрову и М.О. Тарасову за предоставленные экспериментальные данные по неразрушающему контролю композитных образцов и сотрудникам ИВМ РАН Ю.В. Василевскому, А.А. Данилову, В.Ю. Саламатовой за предоставленные сетки головы человека с явным выделением тканей.

Список литературы

1. *Зимбицкий, А.* Применение композиционных материалов в современном авиастроении, контроль за их состоянием в эксплуатации / А. Зимбицкий, Ю. Стасюк // Научный вестник МГТУ ГА. — 2014. — № 208. — С. 99—103.
2. *Магомедов, К. М.* Сеточно-характеристические численные методы / К. М. Магомедов, А. С. Холодов. — 1988.
3. *Казаков, А. О.* К вопросу расчёта граничных и контактных узлов в сеточно-характеристическом методе на неперiodических тетраэдральных сетках / А. О. Казаков // Сиб. журн. вычисл. матем. — 2018. — Т. 21, № 4. — С. 375—391.
4. Grid-Characteristic Numerical Method for Low-Velocity Impact Testing of Fiber-Metal Laminates / K. Beklemysheva, A. Vasyukov, A. Kazakov, I. Petrov // Lobachevskii J Math. — 2018. — Vol. 39, no. 7. — P. 874—883.
5. Transcranial ultrasound of cerebral vessels in silico: proof of concept / Y. Vassilevski, K. Beklemysheva, G. Grigoriev, A. Kazakov, N. Kulberg, I. Petrov, V. Salamatova, A. Vasyukov // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2016. — Vol. 31, no. 5. — P. 317—328.
6. О численном моделировании волновых процессов в анизотропных средах / И. Б. Петров, А. В. Фаворская, А. В. Васюков, А. С. Ермаков, К. А. Беклемышева, А. О. Казаков, А. В. Новиков // Доклады Академии Наук. — 2014. — Т. 495, № 3. — С. 285—287.
7. Numerical Modelling of Composite Delamination and Non-destructive Testing / K. A. Beklemysheva, A. V. Vasyukov, A. O. Kazakov, A. S. Ermakov // Innovations in Wave Processes Modelling and Decision Making: Grid-Characteristic Method and Applications / ed. by A. Favorskaya, I. Petrov. — Springer International Publishing, 2018. — (Smart Innovation, Systems and Technologies). — URL: <https://books.google.ru/books?id=E2RZtAEACAAJ>.
8. Numerical Modeling of Transcranial Ultrasound / I. B. Petrov, A. V. Vasyukov, K. A. Beklemysheva, A. S. Ermakov, A. O. Kazakov, Y. V. Vassilevski, V. Y. Salamatova, A. A. Danilov, G. K. Grigoriev, N. S. Kulberg. — Springer,

- Cham, 2018. — (Mondaini R. (eds) Trends in Biomathematics: Modeling, Optimization and Computational Problems).
9. Численное моделирование волновых процессов при неразрушающем контроле анизотропных композиционных материалов / А. Васюков, К. Беклемышева, А. Ермаков, А. Казаков // Модели и методы обработки информации, изд-во МФТИ, 2016. — 2016.
 10. *Седов, Л. И.* Механика сплошной среды. Том 1 / Л. И. Седов. — М.: Наука, 1970.
 11. *Работнов, Ю. Н.* Механика деформируемого твёрдого тела / Ю. Н. Работнов. — М.: Наука, 1988.
 12. *Александров, К. С.* Анизотропия упругих свойств минералов и горных пород / К. С. Александров, Г. Т. Продайвода. — 2000.
 13. *Извеков, О. Я.* Применение simulia/abaqus при изучении курса механики твёрдого деформируемого тела: реологические модели / О. Я. Извеков, Д. В. Корнев. — М.: МФТИ, 2014.
 14. *Реслер, И.* Механическое поведение конструкционных материалов. Перевод с немецкого / И. Реслер, Х. Хардерс, М. Бекер. — Долгопрудный, Издательский дом «Интеллект», 2011.
 15. *Кукуджанов, В. Н.* Вычислительная механика сплошное сред / В. Н. Кукуджанов. — М.: Издательство Физико-математической литературы, 2008.
 16. Полимерные композиционные материалы: прочность и технология / С. Баженов, А. Берлин, А. Кульков, В. Опмян. — Интеллект, 2010.
 17. *Ландау, Л.* Гидродинамика / Л. Ландау, Е. Лифшиц. — Наука, 1988. — (Теоретическая физика).
 18. *Ландау, Л.* Теория упругости / Л. Ландау, Е. Лифшиц. — Наука, 1965. — (Теоретическая физика).
 19. *Аки, К.* Количественная сейсмология. Теория и методы / К. Аки, П. Ричардс. — Москва «Мир», 1983.
 20. *Рождественский, Б. Л.* Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике / Б. Л. Рождественский, Н. Н. Яненко. — М.: Наука, 1978.

21. *Pons, J.-P.* Delaunay Deformable Models: Topology-Adaptive Meshes Based on the Restricted Delaunay Triangulation / J.-P. Pons, J.-D. Boissonnat // IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. — 2007.
22. *Челноков, Ф. Б.* Численное моделирование деформационных динамических процессов в средах со сложной структурой : дис. ... канд. / Челноков Ф. Б. — 2005.
23. *Уилкинс, М. Л.* Расчёт упругопластических течений / М. Л. Уилкинс // Вычислительные методы в гидродинамике. — М: Издательство Мир, 1967.
24. *Петров, И. Б.* Численное исследование некоторых динамических задач механики деформируемого твёрдого тела сеточно-характеристическим методом / И. Б. Петров, А. С. Холодов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1984. — Т. 24, № 5.
25. Numerical computation of wave propagation in fractured media by applying the grid-characteristic method on hexahedral meshes / V. I. Golubev, I. B. Petrov, N. I. Khokhlov, K. I. Shul'ts // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2015. — No. 55. — P. 509—518.
26. *Golubev, V. I.* Compact grid-characteristic schemes of higher orders of accuracy for a 3D linear transport equation / V. I. Golubev, I. B. Petrov, N. I. Khokhlov // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2016. — No. 8. — P. 577—584.
27. *Favorskaya, A.* Numerical Modeling of Wave Processes during Shelf Seismic Exploration / A. Favorskaya, I. B. Petrov, N. I. Khokhlov // In Procedia Computer Science. — 2016. — No. 96. — P. 920—929.
28. *Челноков, Ф. Б.* Явное представление сеточно-характеристических схем для уравнений упругости в двумерном и трехмерном пространствах / Ф. Б. Челноков // Матем. моделирование. — 2006. — Т. 18, № 6.
29. Virtual blunt injury of human thorax: Age-dependent response of vascular system / K. A. Beklemysheva, A. A. Danilov, I. B. Petrov, V. Y. Salamatova, Y. V. Vassilevski, A. V. Vasyukov // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2015. — No. 30. — P. 259—268.

30. Grid-characteristic method on unstructured tetrahedral grids / I. B. Petrov, A. V. Favorskaya, M. V. Muratov, V. A. Biryukov, A. V. Sannikov // *Doklady Mathematics*. — 2014. — No. 90. — P. 781—783.
31. Казаков, А. О. Численное моделирование сеточно-характеристическим методом волновых процессов при неразрушающем контроле изделий из изотропных и анизотропных композитных материалов / А. О. Казаков. — 2016.
32. *The CGAL Project. CGAL User and Reference Manual* / The CGAL Project. — 4.13. — CGAL Editorial Board, 2018. — URL: <https://doc.cgal.org/4.13/Manual/packages.html>.
33. 3D generator of anisotropic meshes. — 2019. — URL: <http://sourceforge.net/projects/ani3d> (дата обр. 03.03.2019).
34. *Schöberl, J. NETGEN An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules* / J. Schöberl // *Comput Visual Sci*. — 1997. — Т. 1, № 41. — URL: <https://doi.org/10.1007/s007910050004>.
35. Агапов, П. И. Сравнительный анализ разностных схем для численного решения двумерных задач механики деформируемого твердого тела / П. И. Агапов, Ф. Б. Челноков // *Моделирование и обработка информации*: М., МФТИ. — 2003. — С. 19—27.
36. Балк, М. Б. Геометрия масс / М. Б. Балк, В. Г. Болтянский. — М.: Наука, 1987. — (Библиотечка «Квант». Вып. 61).
37. *Flötotto, J. 2D and Surface Function Interpolation* / J. Flötotto // *CGAL User and Reference Manual*. — 4.13. — CGAL Editorial Board, 2018. — URL: <https://doc.cgal.org/4.13/Manual/packages.html#PkgInterpolation2Summary>.
38. *Sibson, R. A brief description of natural neighbour interpolation* / R. Sibson // *Chichester*. — 1981. — P. 21—36. — In Vic Barnett, editor, *Interpreting Multivariate Data*.
39. Петров, И. Б. Лекции по вычислительной математике. / И. Б. Петров, А. И. Лобанов. — Интернет-университет информационных технологий, 2006.

40. *Фаворская, А. В.* Разработка численных методов для моделирования распространения упругих волн в неоднородных средах : дис. . . . канд. / Фаворская А. В. — 2015.
41. *Devillers, O.* Walking in a triangulation / O. Devillers, S. Pion, M. Teillaud // RR-4120, INRIA. — 2001.
42. Технический долг – Википедия. — URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Technical_debt (дата обр. 03.03.2019).
43. *Schroeder, W.* The Visualization Toolkit (4th ed.) / W. Schroeder, K. Martin, B. Lorensen. — Kitware, 2006.
44. 1-2-3-dimensional simulation of wave and associated processes. — 2019. — URL: <https://github.com/AlexanderKazakov/gcm> (дата обр. 03.03.2019).
45. GCM engine for 3d problems. — 2019. — URL: <https://github.com/avasyukov/gcm-3d> (дата обр. 03.03.2019).
46. GCC Options That Control Optimization. — URL: <http://gcc.gnu.org/onlinedocs/gcc/Optimize-Options.html> (дата обр. 03.03.2019).
47. *Alexandrescu, A.* Modern C++ Design: Generic Programming and Design Patterns Applied / A. Alexandrescu. — Addison-Wesley, 2001. — (C++ in-depth series). — URL: <https://books.google.ru/books?id=aJ1av7UFBPwC>.
48. Design Patterns: Elements of Reusable Object-oriented Software / E. Gamma, R. Helm, R. Johnson, J. Vlissides. — Boston, MA, USA : Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1995.
49. *Walt, S. v. d.* The NumPy Array: A Structure for Efficient Numerical Computation / S. v. d. Walt, S. C. Colbert, G. Varoquaux // Computing in Science & Engineering. — 2011. — Т. 13, № 2. — С. 22–30. — eprint: <https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1109/MCSE.2011.37>. — URL: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1109/MCSE.2011.37>.
50. Automatic differentiation in PyTorch / A. Paszke, S. Gross, S. Chintala, G. Chanan, E. Yang, Z. DeVito, Z. Lin, A. Desmaison, L. Antiga, A. Lerer // NIPS-W. — 2017.
51. *Wenzel, J.* pybind11 — Seamless operability between C++11 and Python / J. Wenzel, R. Jason, M. Dean. — 2016. — <https://github.com/pybind/pybind11>.

52. *Хохлов, Н. И.* Численное моделирование сейсмических процессов на высокопроизводительных вычислительных системах : дис. ... канд. / Хохлов Н. И. — 2011.
53. *Петров, И.* О численном изучении нестационарных процессов в деформируемых средах многослойной структуры / И. Петров, А. Тормасов, А. Холодов // *Механика твердого тела.* — 1989. — Т. 4. — С. 89—95.
54. *Васюков, А. В.* Численное моделирование деформаций и повреждений в сложных конструкциях при действии динамической нагрузки : дис. ... канд. / Васюков А. В. — 2012.
55. *Ahrens, J.* ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization, *Visualization Handbook* / J. Ahrens, B. Geveci, C. Law. — Elsevier, 2005.
56. SITESCAN D+ SERIES. LIGHTWEIGHT DIGITAL ULTRASONIC FLAW DETECTORS. — URL: https://sonatest.com/application/files/6015/0530/5482/Sitescan_D_Series_brochure.pdf (дата обр. 03.03.2019).
57. Numerical modelling of medical ultrasound: phantom-based verification / K. Beklemysheva, G. Grigoriev, N. Kulberg, I. Petrov, Y. Vassilevski, A. Vasyukov // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* — 2017. — Т. 5, № 32.