

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ В'ЯЖУЧИХ МАТЕРІАЛІВ ЗА ДОПОМОГОЮ МЕТОДУ БЕЛЛМАНА І РІВНЯННЯ ЕЙКОНАЛУ

студ. Дуков І.М., гр. ВБК-523 м.н.

Науковий керівник к.т.н. доц. Колесников А.В.

Одеська державна академія будівництва та архітектури

Актуальність дослідження. Розвиток варіаційних методів моделювання твердіння в'язучих і композитів на основі принципу Ферма приводить до рівнянь Беллмана та ейконала, які описують динаміку поширення фронтів у складних середовищах. Врахування граничних умов дозволяє моделювати fronti кристалізації, що поширюються від поверхонь частинок і взаємодіють між собою. Це дає змогу враховувати складну геометрію системи та особливості фазових переходів. Коли fronti поширюються від об'ємних частинок і стінок судини, виникають зони самоперетину (каустики), що формують неоднорідні мікроструктури та впливають на механічні властивості композиту. Експерименти показують, що такі зони відповідають слабоупорядкованим і фрагментованим ділянкам із локально зниженою міцністю. Математичне моделювання цих процесів дозволяє деталізувати їхню геометрію, прогнозувати динаміку утворення та оптимізувати структуру матеріалів. Використання рівнянь Беллмана й ейконала відкриває нові можливості для прогнозування й контролю мікроструктурних характеристик композитів, що має значення для будівельного матеріалознавства.

Стан проблеми. Рівняння ейконала широко використовується для моделювання поширення фронтів фазових перетворень в активних середовищах [1]. Воно дозволяє визначати час досягнення фронтом певної точки простору, що є ключовим при аналізі процесів кристалізації та тверднення. Зокрема, у випадках складної геометрії або неоднорідностей середовища, рівняння ейконала допомагає прогнозувати поведінку фронту та його взаємодію з перешкодами. Рівняння Гамільтона-Якобі-Беллмана [2], яке походить з теорії оптимального керування, також застосовується для опису динаміки фронтів фазових перетворень. Воно враховує оптимізаційні аспекти процесу, дозволяючи моделювати поширення фронту з урахуванням мінімізації або максимізації певного функціоналу, наприклад, часу або енергії процесу. Це

особливо важливо при моделюванні процесів тверднення, де кінетика фазових перетворень може суттєво впливати на властивості матеріалу.

Однією з важливих проблем при моделюванні фазових перетворень є зіткнення фронтів та утворення каустик. Каустики – це області простору, де хвильові fronti самоперетинаються, що призводить до підсилення інтенсивності хвилі та може спричинити неоднорідності в структурі матеріалу. У процесах кристалізації та тверднення зіткнення фронтів від різних частинок та утворення каустик може призводити до виникнення дефектів, мікротріщин та зон зниженої міцності, що негативно впливає на експлуатаційні характеристики матеріалу. Дослідження показують, що області зіткнення фронтів відповідають зонам зниженої міцності через накопичення дефектів та залишкових напружень. Тому моделювання цих процесів з використанням рівнянь ейконала та Гамільтона-Якобі-Беллмана є важливим для прогнозування та покращення механічних властивостей матеріалів. Чисельні методи моделювання динаміки фронтів, такі як метод швидкого маршу (Fast Marching Method) та метод встановлення рівня (Level Set Method) [3], дозволяють детально аналізувати динаміку фронтів та їх взаємодію, що сприяє оптимізації процесів тверднення та кристалізації. Поєднання варіаційних методів з чисельними підходами дозволяє створювати більш точні моделі, які враховують складну геометрію та динаміку фазових перетворень, що є ключовим для розробки нових матеріалів з покращеними характеристиками.

Мета роботи. Розвинути методи моделювання твердіння в'язучих та композитів на основі рівняння Беллмана і ейконалу. Розглянути теоретично неупорядковані структури пониженої міцності, що утворюються як особливості зіткнення та самоперетинання фронтів твердіння.

Отримані результати. Нехай $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ – область, де відбувається твердіння. Введемо функцію Беллмана $T(x)$, що описує час досягнення точки $x \in \Omega$ фронтом кристалізації (1):

$$T(x) = \min_{\gamma \in A(x)} \int_{\gamma} L(y, \nu(y)) ds, \quad (1)$$

де $A(x)$ – множина допустимих траєкторій фронту, що ведуть до точки x ; $L(y, \nu)$ – локальна швидкість зростання фронту, що залежить від параметрів середовища.

При цьому $T(x_0) = 0$ у центрах кристалізації x_0 . З принципу динамічного програмування слід рівняння Гамільтона-Якобі-Беллмана (ГЯБ) для фронту твердіння (2):

$$|\nabla T(x)| F(x, \nabla T(x)) = 1, \quad (2)$$

де $F(x, \nabla T)$ – швидкість зростання фронту в залежності від градієнта функції Беллмана.

Якщо $F = V(x)$ – локальна швидкість кристалізації, отримуємо скалярне рівняння Гамільтона-Якобі-Беллмана (3):

$$|\nabla T(x)| = \frac{1}{V(x)}. \quad (3)$$

Початкові умови та геометрія фронтів:

- центри кристалізації x_0^i задані початковими умовами: $T(x_0^i) = 0$;
- фронт твердіння на момент часу t – рівень $T(x) = t$;
- анізотропія зростання: якщо швидкість кристалізації залежить від напрямку, то $F(x, \nabla T(x)) = V(x, \theta)$, де θ – кут напрямку зростання;
- якщо кристалізація ізотропна, то $V(x) = V_0$, і рівняння набуває вигляду (4):

$$|\nabla T(x)| = \frac{1}{V_0} \quad (4)$$

що приводить до рішення виду (5):

$$T(x) = \text{const} + \frac{d(x, x_0)}{V_0}, \quad (5)$$

де $d(x, x_0)$ – евклідова відстань.

Розглянемо модель зростання фронту кристалізації, коли процес поширюється не від точкових центрів, а від частинок кінцевого розміру і форми. Це призводить до більш складних напрямків та їх взаємодій, що потребує аналізу різних моделей. Нехай у розглянутій області $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ (двовимірний випадок, тонкі шари) або \mathbb{R}^3 (об'ємна модель) знаходяться структуроутворюючі частинки P_i з межами ∂P_i . Кристалізація починається з поверхні цих частинок і поширюється в середовищі зі швидкістю $v(x, t)$, яка залежить від координат і часу. Фронт кристалізації $\Gamma(t)$ визначається як множина точок, в яких матеріал переходить у затверділий стан.

Тоді еволюція фронту твердіння описується рівнянням (6):

$$\frac{\partial V}{\partial t} + v(x,t)|\nabla V| = 0, \quad x \in \Omega, \quad (6)$$

де $V(x,t)$ – функція часу досягнення фронтом точки x ; $v(x,t)$ – локальна швидкість кристалізації.

Початкові умови представлені в (7):

$$V(x,0) = 0, \quad x \in \bigcup_i \partial P_i, \quad (7)$$

тобто твердіння починається з меж структуроутворювальних частинок. Граничні умови: зовнішня межа області Ω може або поглинати фронт $V = T_{\max}$, де T_{\max} – граничний час твердіння, або змінювати його швидкість.

Аналогічний математичний апарат застосовується у геометричній оптиці, де використовується рівняння ейконалу. У геометричній оптиці ейконал $S(x)$ описує хвильовий фронт променів, а рівняння для нього має вигляд (8):

$$|\nabla S(x)| = \frac{1}{n(x)}, \quad (8)$$

де $S(x)$ – фаза хвильового фронту (аналог часу $T(x)$ в моделі твердіння), $n(x)$ – показник заломлення (аналог зворотної швидкості фронту $1/V(x)$).

Фронти твердіння $T(x) = \text{const}$ аналогічні поверхням рівного ейконалу $S(x) = \text{const}$. Якщо зростання кристалів ізотропне, фронти являють собою сферичні поверхні. Якщо швидкість твердіння анізотропна можливі еліпсоїдальні або більш складні фронти, аналогічні поширенню світла в кристалах з анізотропним показником заломлення.

Експериментальні дослідження показали, що області зіткнення хвильових фронтів кристалізації характеризуються локально зниженими характеристиками міцності. Так, для гіпсу такі області включають невпорядковані фази, що містять переплетені різноспрямовані кристали двоводного гіпсу та їх фрагменти (рис.1).

В ідеальних випадках при зростанні з різних центрів утворюється структура, подібна до розбиття Вороного, побудованого на центрах кристалізації. У цьому випадку процес кристалізації можна змодельовати як рішення рівняння Беллмана (або його варіанта, аналогічного рівнянню ейконала) (9):

$$|\nabla T(x)| = \frac{1}{V(x)}, \quad (9)$$

де $T(x)$ – час досягнення точки x фронтом кристалізації; $V(x)$ – швидкість зростання кристалів, що залежить від локальних умов. Области зіткнення фронтів

будуть визначатися як границі Вороного, якщо вважати, що фронти ростуть з однаковою швидкістю во всіх напрямках.

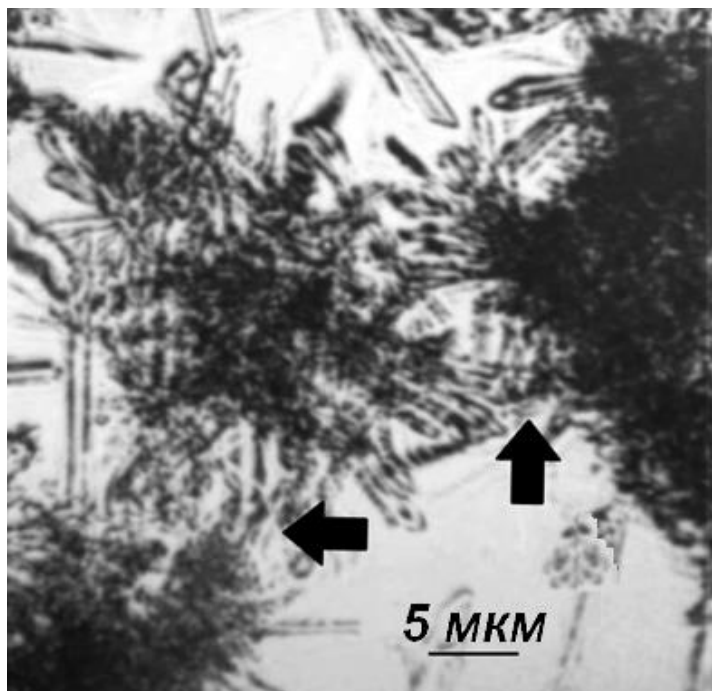


Рис.1. Приклад неупорядкованих структур, що утворюються при зіткненні фронтів кристалізації двоводного гіпсу

Для математичного опису зон руйнування, пов'язаних з особливостями хвильових фронтів кристалізації, можна використовувати наступну концепцію:

1. Геометричне подання фронту твердіння

Хвиля твердіння описується функцією $\phi(x, y, t)$, де рівні $\phi(x, y, t) = \text{const}$ представляють фронти зростання. Вони підкоряються рівнянню ейконала (10):

$$|\nabla \phi| = v(\mathbf{x}), \quad (10)$$

де $v(\mathbf{x})$ – локальна швидкість зростання, що залежить від концентрації та кристаліграфічної анізотропії.

2. Якщо кілька фронтів, що виходять з різних центрів кристалізації, сходяться в одній області, виникають області зіткнення. Це означає, що існує кілька значень $\phi(x, y, t)$ в одній точці простору. Такі точки можна знайти, аналізуючи багатозначні рішення рівняння Гамільтона-Якобі (11):

$$\max_i \{\phi_i(x, y, t)\} = \phi(x, y, t), \quad (11)$$

де індекс i нумерує незалежні хвильові фронти.

3. Умови утворення хаотичних структур

Якщо різниця між фронтами, що приходять, перевищує якийсь критичний поріг, можливе хаотичне зростання замість упорядкованої кристалізації (12):

$$|\phi_i - \phi_j| > \Delta\phi_c \Rightarrow \text{хаотична структура.} \quad (12)$$

Це призводить до неупорядкованого формуванню голчастих або неупорядкованих структур, що знижують міцність матеріалу.

Окрім областей з пониженою впорядкованістю, що виникає при зіткненні фронтів, які поширюються від різних активних часток, можливим є ще одне джерело і структура поширення тріщин руйнування – ділянки, де фронт кристалізації само перетинається (каустики), що виникають за умови розташування джерел фронту на поверхні судини, або на поверхні об'ємних часточок складної форми. Розглянемо випадок зростання фронту кристалізації, що утворюється на стінках судини, і досліджуємо особливості, що виникають залежно від геометрії судини. Нехай кристалізація починається від стінок судини, і фронт твердіння $\phi(x, y, t)$ поширюється по області Ω . Час досягнення фронтом точки (x, y) задається рівнянням ейконалу (13):

$$|\nabla\phi(x, y)| = \frac{1}{v(x, y)}, \quad (13)$$

де $v(x, y)$ – локальна швидкість зростання.

Якщо судина має еліптичну форму, то її межа описується рівнянням (14):

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (14)$$

Задамо початкову умову на границі (15):

$$\phi(x, y, t) = 0, \quad \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (15)$$

Рішення цього рівняння визначає еволюцію фронту твердіння. Зростання фронту з еліптичного кордону не є рівномірним – точки, що знаходяться ближче до фокусів, досягатимуться швидше, створюючи зону стиснення хвильових фронтів.

Особливість виникає там, де перетинаються характеристики рівняння ейконалу. Для еліпса з початковим зростанням від стін (16):

$$t = \int \frac{ds}{v(x, y)}, \quad (16)$$

та лінії постійного $\phi(x, y)$ будуть еліптичними рівнями.

Особливості утворюються вздовж лінії, званої каустикою, яка в еліпсі набуває форми астроїди (17):

$$\left(\frac{x}{a-b}\right)^{\frac{2}{3}} + \left(\frac{y}{b-a}\right)^{\frac{2}{3}} = 1 \quad (17)$$

Ці області відповідають місцям самоперетину хвильових фронтів, де спостерігається хаотична кристалізація.

Поширення фронту можна описати також рівнянням Беллмана (18):

$$\min_u \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + H(\nabla \phi, u) \right] = 0. \quad (18)$$

Гамільтоніан має вигляд (19):

$$H(\nabla \phi, u) = v(x, y) |\nabla \phi|. \quad (19)$$

Для еліптичної геометрії зручніше перейти до еліптичних координат (ξ, η) , де:

$$x = f \cosh \xi \cos \eta, \quad y = f \sinh \xi \sin \eta. \quad (20)$$

Тоді рівняння (19) приймає вигляд (21):

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta}\right)^2 = \frac{1}{v^2(\xi, \eta)}. \quad (21)$$

Особливості фронту відповідають спеціальним траєкторіям показників. Области підвищеної напруги в зоні перетину фронтів визначаються функцією (22):

$$D(x, y) = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}, \quad (22)$$

яка максимальна в областях каустики. Там відбувається хаотичне зростання кристалів.

Висновки. Варіаційні методи, що виходять з принципу Ферма для фронтів тверднення, рівнянь Белмана і ейконалу дозволяють одержати моделі твердіння в'язучих матеріалів і композитів на їх основі. Вони дозволяють, зокрема, передбачати розташування зон зниженої впорядкованості і міцності, що відповідають стиканню фронтів тверднення, які йдуть від поверхонь різних активних частинок. Окрім того, зони слабкої впорядкованості відповідають самоперетину хвильових фронтів кристалізації – каустикам. Вивчення геометрії подібних областей та мінімізація їх негативного впливу на міцність є шляхом до покращення властивостей будівельних матеріалів та виробів.

Summary

Variational methods based on Fermat's principle, Bellman equations, and the Eikonal equation enable modeling binder and composite hardening. They help predict weak zones formed at the contact of hardening fronts from different active particles and caustics from crystallization wave self-intersections. Analyzing these geometries and minimizing their impact enhances material strength.

ЛІТЕРАТУРА

1. Haderer K.P., Schieborn Dirk, Granular matter and the time-dependent viscous eikonal equation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2012. Volume 241, Issue 5. P. 616-622,
2. Голдстейн Г. Классическая механика. Голдстейн Г. Классическая механика. М., Наука, 1975 г. 416 с.
3. Sethian, J. A. *Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. 378 p
4. Мацько І. К., Кравець Л. Б., Яворський І. М., Заяць В. М. Модель вібраційного відгуку від тіла з тріщиною. Відбір і обробка інформації. 2009. Вип. 30. С. 34 – 43.

УДК 515.14+551.58

РОЗРОБКА КОМПЛЕКСНОЇ СОНЯЧНОЇ КАРТИ ДЛЯ м. ОДЕСА

Студ. Навроцький Н.В., гр. БЦІ-205,

Науковий керівник к.ф.-м.н. доц. Загинайло І.В.

Одеська державна академія будівництва та архітектури

Актуальність дослідження. Для розробки ефективних сонцезахисних пристроїв (СЗП) ДСТУ-Н Б В.2.2-27:2010 [1] рекомендує використовувати комплексні сонячні карти (КСК) із виділенням зон можливого перегріву, де інсоляція вважається надлишковою, та зон переохолодження, де інсоляція є бажаною та відіграє роль пасивного опалення. Тіньова маска розробленого СЗП має поглинати зону можливого перегріву на сонячній карті та не перекривати зону бажаної інсоляції. При цьому в ДСТУ-Н Б В.2.2-27:2010 ані самих КСК, ані методу їх розрахунку не приведено. Тому розробка КСК для різних міст України – актуальна задача, яка має важливе практичне значення.