

# Математические модели структурно-неоднородных сред и их численная реализация на многопроцессорных системах\*

В.М. САДОВСКИЙ

*Институт вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск, Россия*  
e-mail: sadov@icm.krasn.ru

Развивается метод построения определяющих соотношений структурно-неоднородных сред, по-разному сопротивляющихся растяжению и сжатию, с учетом вращательного движения частиц микроструктуры материала. Для анализа математических моделей разработан параллельный вычислительный алгоритм, на основе которого выполнена серия расчетов распространения упругих и пластических волн в сыпучих и пористых средах.

Реологический метод построения определяющих уравнений является основой феноменологического подхода к описанию напряженно-деформированного состояния структурно-неоднородных сред со сложными механическими свойствами. Этот метод позволяет конструировать математические модели, учитывающие качественные и количественные характеристики деформационных процессов и имеющие хорошую математическую структуру. Как правило, такие модели приводят к корректным постановкам краевых задач, непротиворечивы с термодинамической точки зрения, допускают простую и естественную численную реализацию.

Характерной особенностью структурно-неоднородных сред является различное сопротивление растяжению и сжатию. Например, сыпучие среды ведут себя как упругие или упругопластические материалы при сжатии и не сопротивляются растяжению. Высокопористые материалы, податливые при растяжении и при сжатии до момента схлопывания пор, оказываются относительно жесткими в процессе сжатия после этого момента. Пределы прочности на растяжение и на сжатие для большинства горных пород, также относящихся к структурно-неоднородным материалам из-за вложенной слоистой или блочной структуры, различаются в десятки раз.

Другая характерная особенность состоит в том, что в структурно-неоднородных средах заметное влияние имеет вращательное движение частиц. Относительное вращение частиц микроструктуры, вызванное внешними механическими или электромагнитными воздействиями, вызывает упругую реакцию материала, что приводит к вращательным колебаниям. При совпадении собственных частот внешних воздействий с частотой собственных колебаний происходит резонансное возбуждение среды.

Для анализа такого рода процессов классические модели механики деформируемых сред оказываются непригодными. С помощью традиционного реологического метода, в котором для описания поведения материала под действием механической нагрузки

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 11-01-00053), Комплексной программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 2 “Интеллектуальные информационные технологии, математическое моделирование, системный анализ и автоматизация” и Междисциплинарного интеграционного проекта Сибирского отделения РАН № 40.

используются три типа элементов – упругая пружина, вязкий демпфер и пластический шарнир, строятся определяющие уравнения, обладающие симметрией по отношению к растяжению и сжатию. Чтобы учесть различное сопротивление материала, реологический метод дополняется новым элементом – жестким контактом, моделирующим идеально сыпучую среду с жесткими частицами [1]. Используя жесткий контакт в сочетании с традиционными элементами, можно строить реологические схемы материалов со сложным комплексом механических свойств. К ним относятся, например, пенные металлы – новые искусственные материалы, которые могут найти широкое применение в машиностроении благодаря низкой плотности и хорошим демпфирующим свойствам [2, 3]. Их деформационные характеристики существенно различаются при растяжении и сжатии, что характерно практически для всех пористых материалов. При растяжении выделяются этапы упругого деформирования скелета и пластического течения вплоть до разрушения. При сжатии – этапы упругого и пластического деформирования скелета до момента схлопывания пор, и последующий этап упругого или упругопластического деформирования сплошного, не пористого материала. При небольших размерах пор схлопывание может наступить непосредственно на упругой стадии с появлением пластичности только при достаточно высоком уровне нагрузки на последнем этапе.

В настоящее время разработаны технологии производства металлической пены на основе алюминия, меди, никеля, олова, цинка и других металлов. Теоретические вопросы, связанные с построением определяющих уравнений и анализом на этой основе пространственного напряженно-деформированного состояния элементов конструкций из металлической пены, судя по имеющимся публикациям, практически не изучены. На уровне физико-механических представлений процесс деформирования пены довольно сложен. При высокой пористости сжатие приводит к упругопластической потере устойчивости металлического скелета, в то время как при низкой пористости реализуется устойчивый механизм схлопывания пор. Схлопывание сопровождается контактным взаимодействием, трудно поддающимся моделированию на дискретном уровне. Кроме того, необходимо учитывать наличие в закрытых порах сжатого газа. Довольно сложно описать процесс сдвига, при котором, как следует из экспериментов, изменяется объем материала. Еще более сложно построить универсальную модель для описания пространственного напряженно-деформированного состояния среды. Проведение адекватных расчетов на основе дискретных моделей металлической пены, как структурно-неоднородного материала, возможно только с использованием многопроцессорных вычислительных систем, обладающих высоким быстродействием и большим объемом оперативной памяти.

Простое, но достаточно грубое решение рассматриваемых проблем дает феноменологический подход. Из-за интуитивной наглядности реологического метода конструирование определяющих уравнений одноосного растяжения–сжатия для материалов типа пористых металлов представляет собой несложную задачу. Обобщение определяющих уравнений на случай пространственного состояния производится естественным образом с помощью тензорных представлений. Пространственные определяющие уравнения оказываются существенно нелинейными, они формулируются в терминах проекций тензоров на допустимые множества напряжений и деформаций [1]. Так как оператор проекции на произвольное выпуклое множество представляет собой нерастягивающее отображение, то в результате получаются модели, допускающую реализацию на основе устойчивых вычислительных алгоритмов.

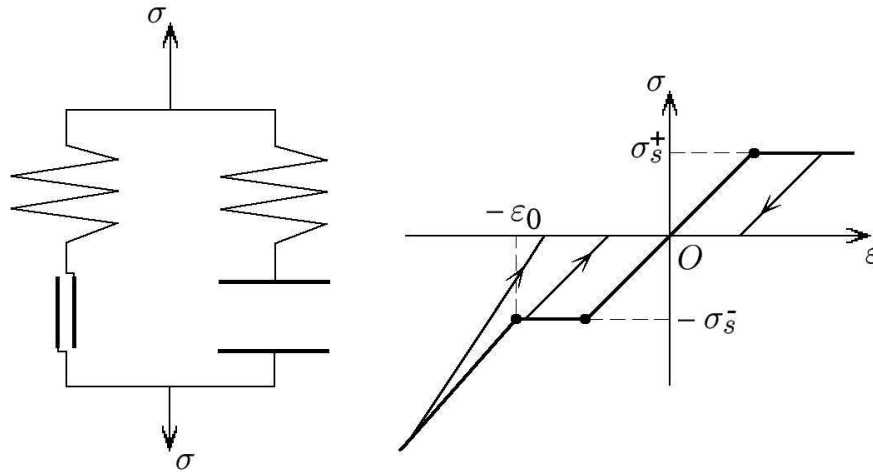


Рис. 1. Реологическая схема и диаграмма упругопластического деформирования скелета

На рис. 1 приведена реологическая схема пористого металла. Поведение материала при растяжении и при его сжатии до момента схлопывания пор имитируется упругой пружиной с модулем податливости  $a$ , а повышение жесткости по мере схлопывания пор – пружиной с модулем податливости  $b$ . Предполагается, что при растягивающем напряжении  $\sigma_s^+$  скелет переходит в состояние текучести, а при сжимающем напряжении  $-\sigma_s^-$  происходит пластическая потеря устойчивости. Соответствующая диаграмма одноосного деформирования представляет собой четырехзвенную ломаную.

В случае пространственного напряженно-деформированного состояния, в соответствии с реологической схемой, тензор напряжений  $\sigma$  равен сумме тензоров  $\sigma^p$  пластических напряжений и  $\sigma^c$  дополнительных напряжений, действующих после схлопывания пор. Предполагается, что эти тензоры симметричны. Упругая податливость материала при малых деформациях характеризуется тензорами четвертого ранга  $a$  и  $b$ , удовлетворяющими обычным условиям симметрии и положительной определенности. Последовательное соединение упругой пружины и пластического шарнира в схеме соответствует теории упругопластического течения Прандтля–Рейсса. В рамках теории течения определяющие соотношения постулируются в форме принципа максимума скорости диссипации энергии [1]:

$$(\tilde{\sigma} - \sigma^p) : (a : \dot{\sigma}^p - \dot{\varepsilon}) \geq 0, \quad \tilde{\sigma}, \sigma^p \in F. \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon$  – действительный тензор деформаций,  $F$  – выпуклое множество в пространстве напряжений, ограниченное поверхностью текучести материала. Точка над символом служит для обозначения производной по времени, волной отменяются произвольные варьируемые величины, двоеточие означает двойную свертку тензоров.

Предполагая, что деформацию перемычек пористого скелета, распределенных хаотично по макрообъему материала, с удовлетворительной точностью можно описать стержневой моделью, конкретизируем множество допустимых напряжений  $F$ , задав его в следующем виде:

$$F = \left\{ \tilde{\sigma} \mid -\sigma_s^- \leq \tilde{\sigma}_k \leq \sigma_s^+, k = 1, 2, 3 \right\},$$

где  $\tilde{\sigma}_k$  – главные значения тензора.

Определяющие соотношения жесткого контакта формулируются в виде вариационного неравенства:

$$(\tilde{\sigma} - \sigma^c) : (\varepsilon^c + \varepsilon^0) \leq 0, \quad \tilde{\sigma}, \sigma^c \in K. \quad (2)$$

Здесь  $\varepsilon^c = \varepsilon - b : \sigma^c$  – тензор деформаций пористого скелета,  $\varepsilon^0 = \varepsilon_0 \delta/3$  – шаровой тензор начальной пористости материала ( $\delta$  – символ Кронекера),  $K$  – выпуклый конус в пространстве напряжений, с помощью которого моделируется переход от пористого к сплошному состоянию материала. В качестве  $K$  используется круговой конус Мизеса–Шлейхера:

$$K = \{ \tilde{\sigma} \mid \tau(\tilde{\sigma}) \leq \varkappa p(\tilde{\sigma}) \},$$

где  $\varkappa$  – параметр дилатансии,  $p(\tilde{\sigma}) = -\tilde{\sigma} : \delta/3$  – гидростатическое давление,  $\tau(\tilde{\sigma})$  – интенсивность касательных напряжений, вычисляемая через девиатор тензора напряжений  $\tilde{\sigma}' = \tilde{\sigma} + p(\tilde{\sigma})\delta$  по формуле:  $\tau^2(\tilde{\sigma}) = \tilde{\sigma}' : \tilde{\sigma}'/2$ .

С учетом введенных обозначений вариационное неравенство (2) преобразуется к следующему виду

$$(\tilde{\sigma} - \sigma^c) : b : (\sigma^c - s) \geq 0, \quad \tilde{\sigma}, \sigma^c \in K. \quad (3)$$

Здесь  $s$  – тензор условных напряжений, который вычисляется по закону линейной теории упругости с начальными деформациями:  $b : s = \varepsilon + \varepsilon^0$ . В общем случае вариационное неравенство (3) позволяет определить тензор  $\sigma^c = \pi_K(s)$  как проекцию тензора  $s$  на конус  $K$  по евклидовой норме  $|s| = \sqrt{s : b : s}$ .

Замкнутая математическая модель динамического деформирования пористого металла, включающая в себя систему уравнений движения и определяющие соотношения (1), (2), приводится к вариационному неравенству

$$(\tilde{U} - U) \left( A \frac{\partial U}{\partial t} - \sum_{k=1}^n B^k \frac{\partial U^\pi}{\partial x_k} - G \right) \geq 0, \quad \tilde{U}, U \in F, \quad (4)$$

в котором  $U = (v_k, \sigma_{ij}^p, s_{ij})$  – вектор, составленный из компонент вектора скорости частиц и тензоров пластических и условных напряжений в декартовой системе координат  $x_k$ ,  $U^\pi$  – проекция этого вектора на множество  $F$ ,  $A$  и  $B^k$  – квадратные матрицы, коэффициентами которых служат феноменологические параметры модели,  $G$  – заданный вектор объемных сил. Пористость материала учитывается при постановке начальных условий  $U|_{t=0} = U^0$  в терминах тензора  $s$ .

Алгоритм численного решения задач на суперкомпьютерах с параллельной архитектурой на примере модели упругопластической сыпучей среды, которая приводится к вариационному неравенству, более общему, чем (4), описан в [4]. В [5] представлен алгоритм численного решения динамических задач в рамках модели моментной упругой среды, учитывающей вращательные степени свободы частиц микроструктуры материала, и дана формулировка граничных условий симметрии, позволяющих снизить объем вычислений за счет отсека части расчетной области. В [6] численно установлено, что в моментной среде существует резонансная частота, соответствующая частоте собственных колебаний вращательного движения частиц. В общих чертах предлагаемый алгоритм основан на методе расщепления по физическим процессам и по пространственным переменным. Одномерные гиперболические системы уравнений решаются с помощью явной ENO–схемы типа предиктор–корректор, с использованием кусочно–линейных сплайнов, разрывных на границах ячеек. Эта расчетная схема обладает свойством монотонности, поэтому она, в отличие от многих более простых схем, пригодна для исследования обобщенных решений в задачах об ударных, импульсных и сосредоточенных воздействиях.

Комплекс параллельных программ предназначен для описания нестационарных волновых процессов в массиве среды, составленном из произвольного числа разнородных

блоков с криволинейными границами. Он состоит из программы-препроцессора, основной программы расчета полей скоростей и напряжений, подпрограмм реализации граничных условий и условий склейки решений на несогласованных сетках соседних блоков и программы-постпроцессора. Используется библиотека передачи сообщений MPI. Универсальность программ достигается за счет специальной упаковки переменных, используемых на каждом из вычислительных узлов кластера, в одномерные массивы большой размерности. Распараллеливание вычислений осуществляется на этапе расщепления задачи по пространственным переменным. Препроцессор подготавливает исходные данные задачи, строит независимые криволинейные разностные сетки в блоках и распределяет расчетную область между вычислительными узлами по принципу равномерной загрузки посредством 1D, 2D или 3D-разбиения. Постпроцессор производит сжатие файлов, содержащих результаты счета, необходимое для их транспортировки по глобальной сети и последующей обработки с помощью математического обеспечения персонального компьютера, а также для компактного хранения получаемого численного решения.

Разработанный комплекс программ применялся к решению методических задач, ориентированных на приложения в геофизике (сейсмике). Основная цель – демонстрация возможностей распределенных вычислений в этих задачах.

На кластере МВС-1000 ИВМ СО РАН проведена серия расчетов взаимодействия ударных волн уплотнения в неоднородно разрыхленной сыпучей среде. Показано, что распространяясь в рыхлой среде, плоские фронты сигнотонов (ударноволновых переходов, меняющих знак деформации), вызванных действием импульсной нагрузки, постепенно искривляются, замедляясь в области сильного разрыхления по сравнению с более плотной областью. Волны разгрузки следуют за сигнотонами по сжатой среде, в которой скорости волн постоянны, поэтому их фронты остаются практически плоскими вплоть до момента встречи. В месте встречи сигнотонов в результате взаимодействия искривленных фронтов зарождается кумулятивный выплеск (характерная зона сжимающих напряжений, которая со временем перемещается в вертикальном направлении в сторону более рыхлых слоев). На рис. 2 приведены результаты расчетов для плотного грунта. Расчеты показали, что при кумуляции волн гидростатическое давление может возрасти в три раза по сравнению с лобовым столкновением плоских волн.

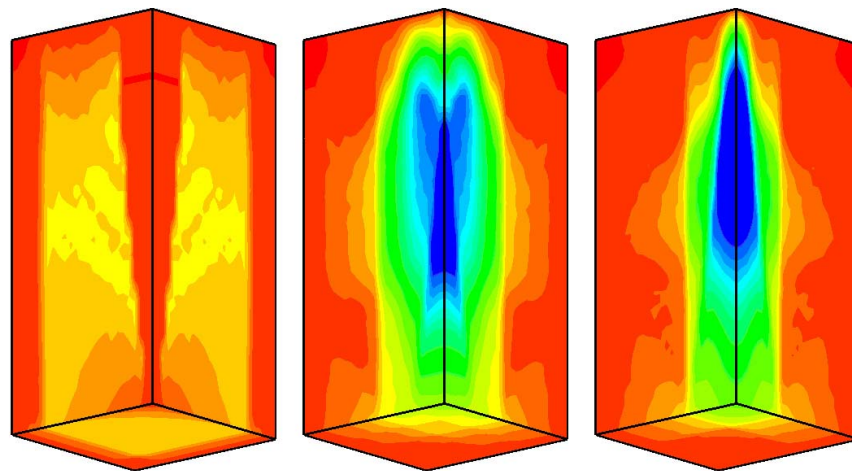


Рис. 2. Кумулятивное взаимодействие сигнотонов в неоднородно разрыхленной сыпучей среде: поверхности уровня нормального напряжения в различные моменты времени

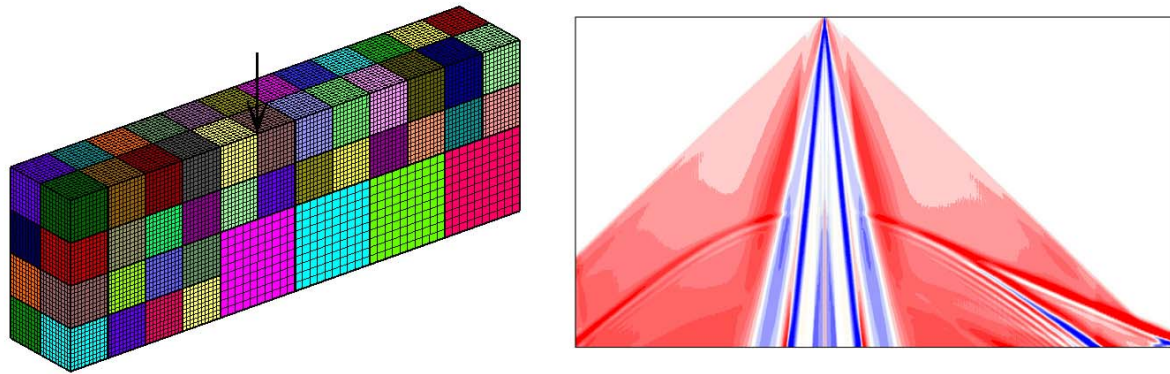


Рис. 3. Задача Лэмба о распространении упругих волн под действием сосредоточенной импульсной нагрузки в массиве с включением: схема распределения расчетной области между вычислительными узлами и сейсмограмма отраженных волн

На рис. 3 представлены результаты численного решения в трехмерной постановке задачи Лэмба для упругой среды с жестким включением на 68 узлах кластера МВС–100К МСЦ РАН. Расчетная область состоит из четырех блоков, три из которых заняты плотным грунтом, а четвертый (нижний правый блок, покрытый сеткой с крупным шагом) – прочной горной породой. Справа приведена сейсмограмма, полученная по результатам счета на кластере с помощью системы SeisView, описывающая поведение вертикальной компоненты перемещения в зависимости от времени. Приемники расположены на верхней границе расчетной области вдоль линии, проходящей через точку приложения нагрузки (она отмечена стрелкой на левом рисунке) параллельно горизонтальной оси. Видны падающие продольные и поперечные волны, конические, отраженные и преломленные продольные волны.

## Список литературы

- [1] САДОВСКАЯ О.В., САДОВСКИЙ В.М. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред. М.: Физматлит, 2008.
- [2] GIBSON L.J. Properties and applications of metallic foams // Comprehensive Composite Materials. 2003. Chapter 3.31. P. 821–842.
- [3] ТРОФИМЕНКО В.В., ЧУПРИНА А.Л. Особенности свойств и перспективы использования пористых литых материалов // Строительство, материаловедение, машиностроение. Сб. научн. тр. Вып. 43. Днепропетровск: ПГАСА, 2006. С. 95–101.
- [4] САДОВСКАЯ О.В., САДОВСКИЙ В.М. Параллельные вычисления в пространственных задачах динамики сыпучей среды // Вестник Красноярского гос. ун-та: Физ.-мат. науки. 2006. № 1. С. 215–221.
- [5] САДОВСКАЯ О.В. Численное решение пространственных динамических задач моментной теории упругости с граничными условиями симметрии // Ж. вычислительной математики и математической физики. 2009. Т. 49, № 2. С. 313–322.
- [6] ВАРЫГИНА М.П., САДОВСКАЯ О.В., САДОВСКИЙ В.М. О резонансных свойствах моментного континуума Коссера // ПМТФ. 2010. Т. 51, № 3. С. 126–136.