

Параллельные вычисления в задачах динамики сред с микроструктурой *

М.П. ВАРЫГИНА

Институт вычислительного моделирования СО РАН

e-mail: vmp@icm.krasn.ru

Разработаны эффективные алгоритмы для численного исследования модели моментной упругой среды, учитывающей вращательные степени свободы частиц микроструктуры материала, на многопроцессорных вычислительных системах. Создан комплекс программ для численного решения пространственных динамических задач в средах с микроструктурой. Установлено, что в моментной упругой среде существует собственная резонансная частота, соответствующая частоте колебаний вращательного движения частиц, которая зависит только от параметров упругости материала.

В 2009 году исполнилось 100 лет со дня опубликования работы братьев Коссера, в которой была предложена новая математическая модель сплошной среды [1]. В отличие от классической теории упругости, в этой модели каждая материальная точка наделяется свойствами твердого тела – для нее учитываются вращательные степени свободы. Математическая модель Коссера служит для описания напряженно-деформированного состояния структурно неоднородных материалов: композитов, гранулированных, порошкообразных, сыпучих, микроразрушенных и микрополярных сред. Структура – один из важнейших показателей качества материалов, непосредственно влияющий на их прочностные характеристики. В зависимости от типа материала и масштаба исследований в практических задачах требуется учитывать структуру нано-, микро- или мезоуровня.

При численном решении задач деформирования в средах с микроструктурой необходимо согласовывать размер ячеек используемых сеток с характерным размером неоднородности, представляющим собой малую величину. В результате дискретизации получаются задачи большой размерности, для реализации которых недостаточно вычислительных ресурсов персонального компьютера или рабочей станции с последовательной архитектурой. Методы моделирования с использованием высокопроизводительных распределенных вычислений оказываются едва ли не единственным способом получения информации об исследуемых процессах.

В модели моментной среды кроме поступательного движения, которое характеризуется вектором скорости \mathbf{v} , учитываются независимые малые повороты частиц с вектором угловой скорости $\boldsymbol{\omega}$, а наряду с тензором напряжений $\boldsymbol{\tau}$, компоненты которого несимметричны, вводится несимметричный тензор моментных напряжений \boldsymbol{m} . Основная система уравнений усложняется по сравнению с системой динамической теории упругости за счет дифференциальных уравнений вращательного движения. В эту систему входят уравнения движения, кинематические соотношения и обобщенный закон

*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.

линейной теории упругости [2]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \dot{\mathbf{v}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}, \quad j \dot{\boldsymbol{\omega}} = \nabla \cdot \mathbf{m} - 2\boldsymbol{\tau}_x + j \mathbf{q}, \\ \dot{\boldsymbol{\Lambda}} = \nabla \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega}, \quad \dot{\mathbf{M}} = \nabla \boldsymbol{\omega}, \\ \boldsymbol{\tau} = \lambda II \cdot \cdot \boldsymbol{\Lambda}^S + 2\mu \boldsymbol{\Lambda}^S + 2\alpha \boldsymbol{\Lambda}^A, \\ \mathbf{m} = \beta II \cdot \cdot \mathbf{M}^S + 2\gamma \mathbf{M}^S + 2\varepsilon \mathbf{M}^A. \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь $\boldsymbol{\Lambda}$ и \mathbf{M} – равные нулю в естественном (ненапряженном) состоянии среды тензоры деформаций и кривизн; $\boldsymbol{\Lambda}^S$, \mathbf{M}^S , $\boldsymbol{\Lambda}^A$, \mathbf{M}^A – симметричные и антисимметричные составляющие тензоров; $\boldsymbol{\tau}_x$ – вектор тензора $\boldsymbol{\tau}$; I – единичный тензор; ∇ – оператор градиента; точка над символом означает производную по времени; ρ – плотность среды; \mathbf{g} – вектор массовых сил; \mathbf{q} – вектор моментов; λ , μ , α , β , γ , ε – упругие характеристики среды; j – особая динамическая характеристика среды, равная произведению момента инерции частицы относительно оси, проходящей через ее центр тяжести, на число частиц в единице объема, которая определяется формой и размерами частиц. При описании гранулированных материалов параметр j можно определить по формуле $j = 2\rho r^2/5$, где r – характерный размер частиц среды.

В пространственном случае система уравнений (1) включает в себя 24 уравнения относительно 24-х неизвестных функций, в случае плоского деформированного состояния система состоит из 12 уравнений.

Систему уравнений (1) можно привести к симметрическому виду

$$A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = B_1 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_1} + B_2 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_2} + B_3 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_3} + Q\mathbf{U} + \mathbf{G}, \quad (2)$$

где

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}(v_1, v_2, v_3, \tau_{11}, \tau_{22}, \tau_{33}, \tau_{23}, \tau_{32}, \tau_{31}, \tau_{13}, \tau_{12}, \tau_{21}, \omega_1, \omega_2, \omega_3, m_{11}, m_{22}, m_{33}, m_{23}, m_{32}, m_{31}, m_{13}, m_{12}, m_{21}).$$

Матрицы коэффициентов A , B_1 , B_2 и B_3 симметричны, матрица Q антисимметрична, в вектор \mathbf{G} входят массовые силы и моменты. При выполнении неравенств на параметры среды

$$3\lambda + 2\mu, \mu, \alpha > 0, \quad 3\beta + 2\gamma, \gamma, \varepsilon > 0, \quad (3)$$

матрица A положительно определена, и рассматриваемая система является гиперболической по Фридрихсу. Ее характеристические свойства описываются уравнением

$$\det(cA + n_1 B_1 + n_2 B_2 + n_3 B_3) = 0, \quad n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1,$$

положительные корни которого – скорости продольных волн c_p , поперечных волн c_s , волн кручения c_m и волн вращательного движения c_ω – равны

$$c_p = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}, \quad c_s = \sqrt{\frac{\mu + \alpha}{\rho}}, \quad c_m = \sqrt{\frac{\beta + 2\gamma}{j}}, \quad c_\omega = \sqrt{\frac{\gamma + \varepsilon}{j}}. \quad (4)$$

Начальные данные для задачи предполагают задание при $t = 0$ вектор-функции $\mathbf{U} = \mathbf{U}_0$. Граничные условия могут быть заданы в терминах скоростей

$$v_i = v_i^0, \quad \omega_i = \omega_i^0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (5)$$

или напряжений

$$\sum_{k=1}^3 n_k \tau_{ki} = p_i, \quad \sum_{k=1}^3 n_k m_{ki} = q_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (6)$$

Согласно общей теории гиперболических систем, возмущения распространяются в рамках модели (1) с конечными скоростями (4). При этом возмущения, соответствующие поперечным волнам, автоматически порождают волны вращательного движения, и наоборот, возмущения вращательного движения приводят к поперечным волнам. На таких волнах, как и на волнах кручения, возникают осцилляции решения, что является основным качественным отличием модели моментной среды Коссера от классической линейной теории упругости. Другое отличие состоит в том, что в моментной среде имеется собственная частота акустического резонанса материала, зависящая от инерционных свойств частиц микроструктуры и от параметров упругости материала и не зависящая от размеров исследуемой области [3, 4]. Действительно, в случае однородного сдвига возникает классическое резонансное уравнение

$$j \frac{\partial^2 \omega_3}{\partial t^2} = -4\alpha \omega_3 + 2\alpha \dot{\chi},$$

из которого следует, что если угол сдвига $\chi(t)$ изменяется по гармоническому закону с частотой $\nu_* = 1/T$, $T = \pi \sqrt{j/\alpha}$, равной собственной частоте вращательного движения, то амплитуда угловой скорости частиц неограниченно растет. В общем случае в моментной среде резонанс вращательного движения можно возбудить, например, за счет периодического изменения вращательного момента на границе слоя.

Упрощением модели Коссера является случай редуцированной среды. В редуцированной среде дополнительные вращательные степени свободы учитываются, но моментные напряжения не рассматриваются. Здесь три из восьми констант полной среды Коссера равны нулю ($\beta, \gamma, \varepsilon = 0$). Впервые эта модель была предложена в [5] для описания сыпучих материалов и представляется адекватной при описании сыпучих сред.

Как частный случай в предположении о зависимости потенциала напряжений только от двух инвариантов – объемной деформации среды и относительного угла поворота частицы – на основе редуцированной модели получена система уравнений, описывающая термомеханическое состояние нематического жидкого кристалла при слабых силовых и температурных воздействиях. В плоском случае система, записанная в скоростях и напряжениях, сводится к уравнениям поступательного и вращательного движения, вызванного вращением частиц, и связанному уравнению теплопроводности. Путем дифференцирования из системы получено уравнение Клейна–Гордона для касательного напряжения, позволяющее исследовать резонансное возбуждение структурно-неоднородного материала на частоте собственных колебаний вращательного движения частиц. В безмоментных средах (редуцированная среда Коссера) резонанс вращательного движения за счет только граничных условий не возникает.

В работах [6, 7] описан алгоритм численной реализации системы уравнений (1) на суперкомпьютерах с параллельной архитектурой. Алгоритм основан на методе двухциклического расщепления второго порядка точности по пространственным переменным и времени. Полученные в результате расщепления одномерные системы уравнений решаются с помощью явной монотонной ENO-схемы типа предиктор-корректор, представляющей собой обобщение схемы распада разрыва Годунова, с использованием кусочно-линейных сплайнов, разрывных на границах ячеек. Сплайны строятся на

основе процедуры предельной реконструкции. Получаемая таким образом 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.

Вычислительный алгоритм реализован с помощью библиотеки MPI (Message Passing Interface) по технологии SPMD (Single Program – Multiple Data) в виде комплекса программ для многопроцессорных вычислительных систем. Комплекс предназначен для описания нестационарных волновых процессов в массиве среды, составленном из произвольного числа разнородных блоков с криволинейными границами. Распараллеливание выполнено на основе блочного разбиения области решения задачи.

Программный комплекс 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.

Программа–препроцессор осуществляет построение независимых (несогласованных) криволинейных разностных сеток в блоках и вычисляет предельно допустимый по условию Куранта–Фридрихса–Леви шаг интегрирования системы уравнений на основе явных разностных схем. Кроме того, программа задает начальные данные (однородные в случае естественного состояния массива среды), распределяет расчетную область между параллельными вычислительными узлами по принципу равномерной загрузки.

На каждом узле кластера основной программой выполняются вычисления, сводящиеся к взаимно-согласованной поэтапной реализации метода расщепления по пространственным переменным. Исключение составляют процессы, производящие кроме того склейку решений на внутренних границах.

Программа–постпроцессор подготавливает данные для графического представления численного решения, которое выполняется с помощью специальных программ, предназначенных для персонального компьютера. Для визуализации решения нет необходимости использовать данные с точностью, полученной при численном решении задачи. Поэтому возможно применение методов сжатия данных с контролируемой потерей точности, что необходимо для сокращения объема файлов большого размера и времени транспортировки по сети, а также для компактного хранения численных решений в постоянной памяти компьютера [7].

В работах [3, 4] представлены результаты численного решения пространственной задачи Лэмба о мгновенном действии сосредоточенной силы на поверхности полупространства. Ниже приводятся результаты численного решения задачи о действии сосредоточенной импульсной нагрузки, периодической по времени, с частотой, равной собственной резонансной частоте вращательного движения ν_* (рис. 1).

Верификация работы алгоритма выполнялась путем сравнения численного и аналитического решения о распространении поверхностной волны Рэлея в полной и редуцированной среде Коссера, полученного в работах [8, 9] (рис. 2).

Численные расчеты задач в рамках полной и редуцированной среды выполнены на кластерах МВС-1000 Института вычислительного моделирования СО РАН и МВС-100k Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Для исследования динамики жидкокристаллической среды под действием механических напряжений построена разностная схема типа Неймана–Рихтмайера второго порядка точности. Численные расчеты выполнены на видеокарте NVIDIA TESLA C2050 с использованием технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture).

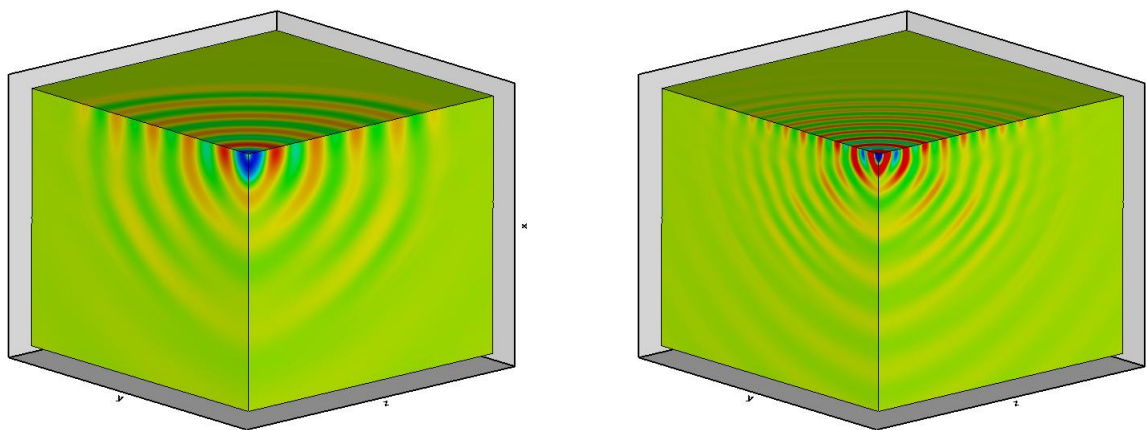


Рис. 1. Поверхности уровня скорости v_1 для резонансной (слева) и нерезонансной (справа) частоты

Список литературы

- [1] COSSERAT E., COSSERAT F. *Theorie des Corps Deformables* // Chwolson's *Traité Physique*: 2nd ed. Paris, 1909. P. 953-1173.
- [2] ПАЛЬМОВ В. А. Основные уравнения теории несимметричной упругости // *Прикладная математика и механика*. 1964. Т. 28, вып. 3. С. 401-408.
- [3] ВАРЫГИНА М. П., САДОВСКАЯ О. В., САДОВСКИЙ В. М. О резонансных свойствах моментного континуума Коссера // *Прикладная математика и техническая физика*. 2010. Т. 51, № 3. С. 126–136.
- [4] САДОВСКИЙ В. М., САДОВСКАЯ О. В., ВАРЫГИНА М. П. Численное моделирование пространственных волновых движений в моментных средах // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2009. Т. 2, № 4. С. 111-121.
- [5] SCHWARTZ L. M., JOHNSON D. L., FENG S. Vibrational modes in granular materials // *Physical Review Letters*. 1984. Vol. 52, № 10. P. 831-834.
- [6] САДОВСКАЯ О. В., САДОВСКИЙ В. М. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред. М.: Физматлит, 2008. 368 с.
- [7] ВАРЫГИНА М. П., КИРЕЕВ И. В., САДОВСКАЯ О. В., САДОВСКИЙ В. М. Программное обеспечение для анализа волновых движений в моментных средах на многопроцессорных вычислительных системах // *Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. акад. М.Ф. Решетнева*. 2009. Вып. 2 (23). С. 104-108.
- [8] КУЛЕШ М. А., МАТВЕЕНКО В. П., ШАРДАКОВ И. Н. О распространении упругих поверхностных волн в среде Коссера // *Доклады РАН*. 2006. Т. 405, № 2. С. 196–198.
- [9] КУЛЕШ М. А., ГРЕКОВА Е. Ф., ШАРДАКОВ И. Н. Задача о распространении поверхностной волны в редуцированной среде Коссера // *Акустический журнал*. 2009. Т. 55, № 1. С. 216-225.

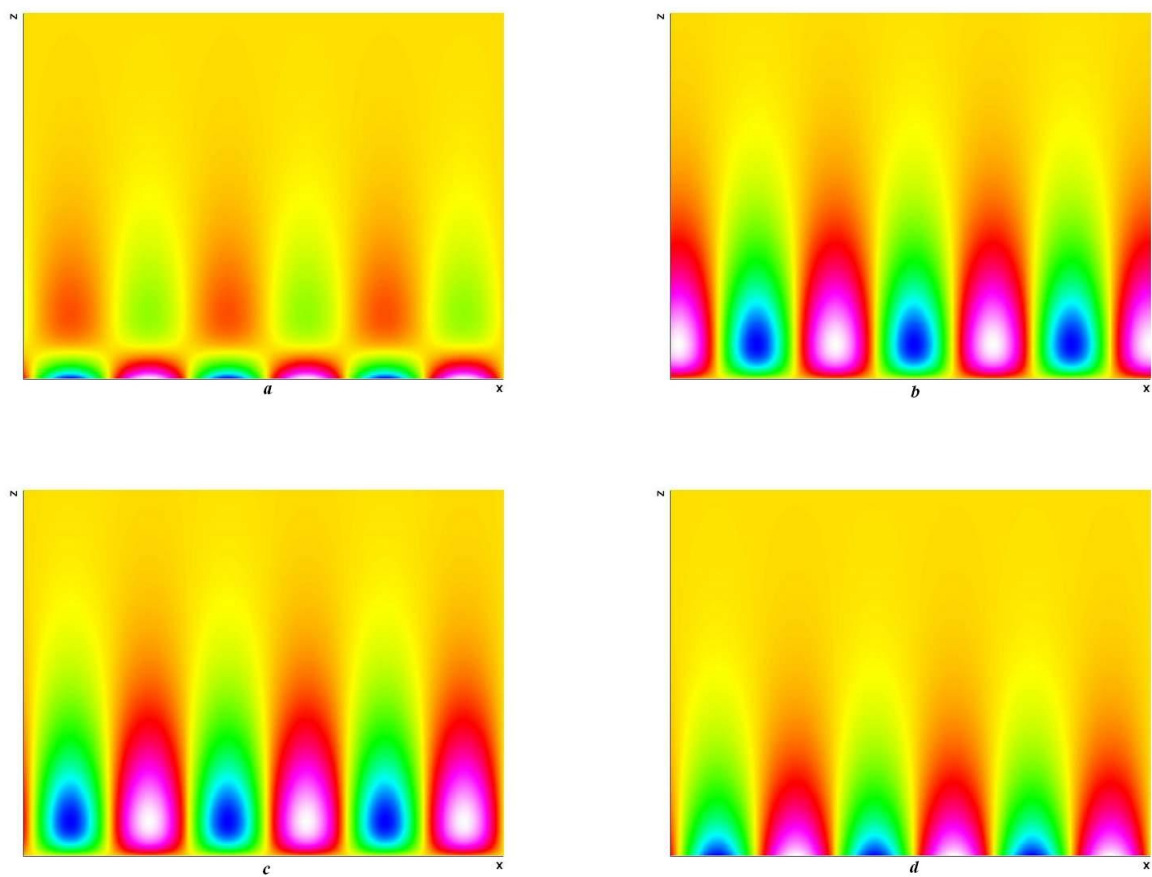


Рис. 2. Поверхностная волна Рэлея в редуцированной моментной среде: a, b, c – компоненты напряжений $\tau_{11}, \tau_{31}, \tau_{33}$ соответственно, d – компонента угловой скорости ω_2