

Модели сред с микроструктурой и их численная реализация на суперкомпьютерах*

М.П. ВАРЫГИНА, О.В. САДОВСКАЯ, В.М. САДОВСКИЙ

Учреждение Российской академии наук

Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения РАН

e-mail: varyginam@yandex.ru; o_sadov@icm.krasn.ru; sadov@icm.krasn.ru

С помощью обобщенного реологического метода строятся определяющие уравнения структурно неоднородных сред, по-разному сопротивляющихся растяжению и сжатию. Учитываются вращательные степени свободы частиц микроструктуры материала. Для анализа получаемых математических моделей разработан параллельный вычислительный алгоритм, на основе которого выполнена серия расчетов распространения упругих и пластических волн напряжений и деформаций в плоской и пространственной постановках.

При математическом моделировании деформации структурно неоднородных сред (сыпучих и пористых материалов, пенометаллов, волокнистых композитов) необходимо учитывать два исключительно важные фактора, которые не рассматриваются в рамках классической механики сплошных сред. Это различное сопротивление материала растяжению и сжатию, и относительное вращение частиц. Например, в связных средах (грунтах, горных породах) допустимые растягивающие напряжения существенно меньше сжимающих. Наоборот, волокнистые композиты обладают большей жесткостью при растяжении в направлении ориентации волокон, чем при сжатии в том же направлении. При некоторых специальных видах механических воздействий в сыпучих и пористых средах наблюдается вращательное движение частиц микроструктуры относительно связующего материала, которое вызывает упругую реакцию со стороны соседних частиц. К построению определяющих уравнений сыпучих сред с упругими и пластическими частицами, пористых сред, жесткость которых существенно возрастает при схлопывании пор, применяется обобщенный реологический метод, дополненный новым элементом – жестким контактом, служащим для учета несимметрии диаграммы одноосного деформирования материала, [1].

Жесткий контакт имитирует поведение идеально сыпучей среды с абсолютно твердыми частицами – системы не связанных между собой твердых шаров. При растяжении системы шары беспрепятственно раскатываются и напряжение в ней оказывается равным нулю. Процесс сжатия после предварительного растяжения происходит при нулевых напряжениях, но только до момента касания шаров, когда система по-прежнему возвращается в начальное положение. Сжимающие деформации недопустимы, а сжимающие напряжения могут быть произвольными, но деформация при этом равна нулю.

Используя жесткий контакт в сочетании с традиционными элементами – упругой пружиной, вязким демпфером и пластическим шарниром – можно строить реологические схемы материалов, обладающих сложным комплексом механических свойств. К ним

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 11-01-00053), Комплексной программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 2 и Междисциплинарного интеграционного проекта Сибирского отделения РАН № 40.

относятся, например, пенистые 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.

Из-за интуитивной наглядности реологического метода конструирование определяющих уравнений одноосного растяжения–сжатия для такого рода материалов представляет собой довольно простую задачу. Обобщение определяющих уравнений на случай пространственного состояния производится с привлечением конусов допустимых напряжений и деформаций [1]. Пространственные определяющие уравнения оказываются существенно нелинейными, они формулируются в терминах проекций тензоров на допустимые конусы. Так как оператор проекции на произвольное выпуклое множество представляет собой нерастягивающее отображение, то в результате получаются модели, имеющие хорошую математическую структуру, допускающую устойчивую численную реализацию.

Алгоритм численного решения задач на суперкомпьютерах с параллельной архитектурой на примере модели упругопластической сыпучей среды 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 отсечения части расчетной области. 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. Программирование выполнено на языке Fortran с применением библиотеки передачи сообщений MPI по технологии SPMD. 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.

ки 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. 1 приведены результаты расчетов для плотного грунта. Расчеты показали, что при кумуляции волн гидростатическое давление может возрасти более, чем в три раза по сравнению с лобовым столкновением плоских волн.

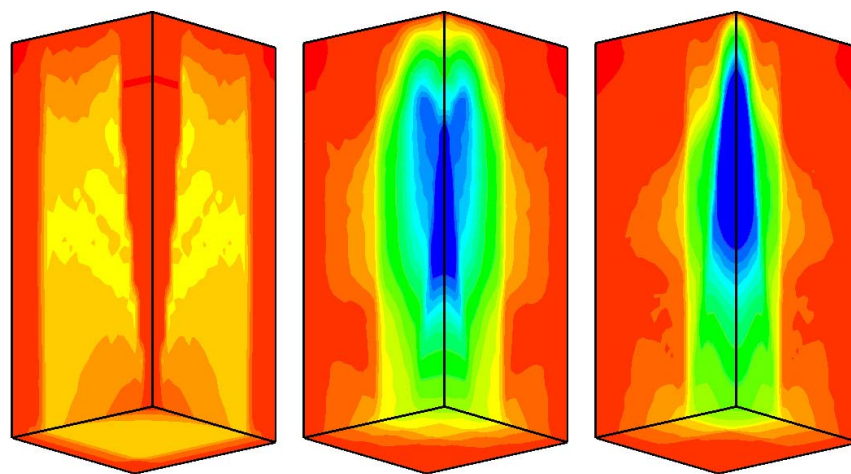


Рис. 1. Кумулятивное взаимодействие сигнотонов в неоднородно разрыхленной сыпучей среде: поверхности уровня нормального напряжения в различные моменты времени

На рис. 2 представлены результаты численного решения в трехмерной постановке задачи Лэмба для упругой среды с жестким включением на 68 узлах кластера МВС-15000ВМ 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

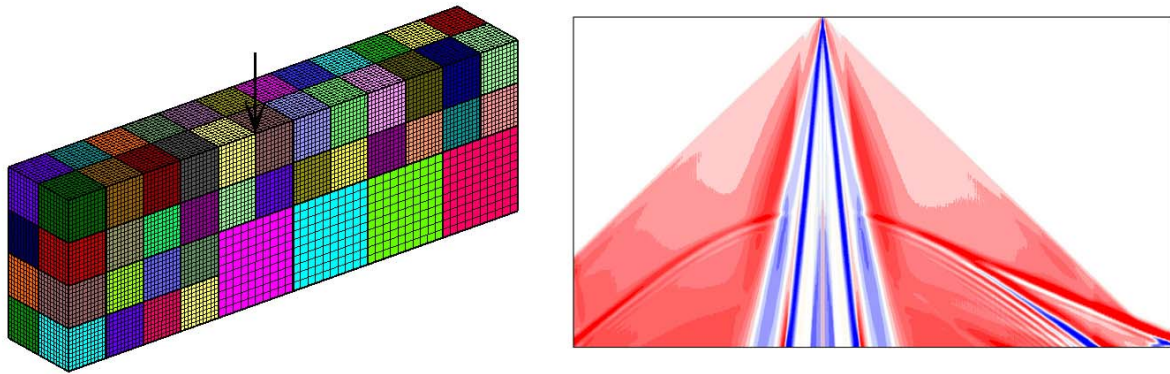


Рис. 2. Задача Лэмба о распространении упругих волн под действием сосредоточенной импульсной нагрузки в массиве с включением: схема распределения расчетной области между вычислительными узлами и сейсмограмма отраженных волн

горизонтальной оси. Видны падающие продольные и поперечные волны, конические, отраженные и преломленные продольные волны.

В отличие от обычной теории упругости, в модели моментной упругой среды неявно присутствует малый параметр – характерный размер частиц микроструктуры. Решая задачу численно, необходимо выполнять расчеты на достаточно мелких сетках, размер ячеек которых согласован с этим параметром. На рис. 3 приведены поверхности уровня нормального и касательного напряжений, а также одного из моментов для задачи о действии сосредоточенной нормальной нагрузки $\sigma_{11} = -p_0\delta(x)\delta(t)$ в угле верхней границы расчетной области (материал – синтетический полиуретан). Видны падающие продольные и поперечные волны, конические поперечные волны и поверхностные волны Рэлея. На искусственно введенных гранях куба ставились условия симметрии [5] и неотражающие условия, моделирующие беспрепятственное прохождение волн. Каждым из 64-х узлов кластера МВС–100К МСЦ РАН решалась часть задачи на подсетке размерностью $50 \times 50 \times 50$ ячеек. Для расчета 200 шагов по времени потребовалось 18 часов машинного времени. Расчеты подтвердили основное качественное отличие волнового поля в моментной среде по сравнению с классической упругой средой, которое заключается в появлении колебаний вращательного движения частиц на фронтах волн.

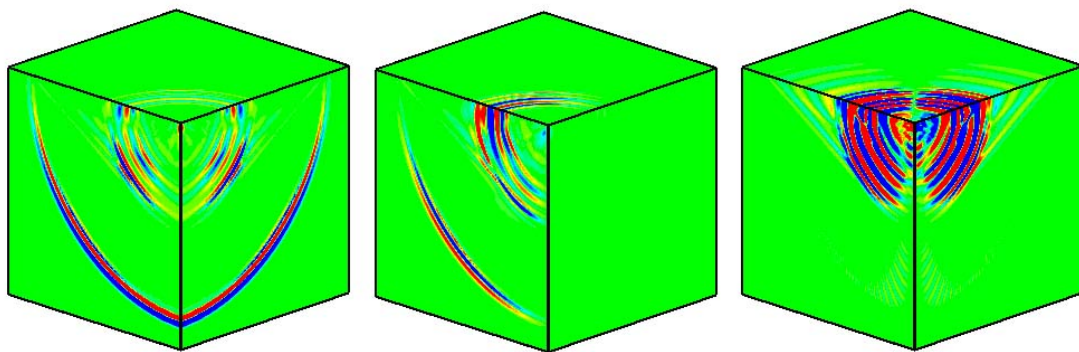


Рис. 3. Задача Лэмба для моментной упругой среды: поверхности уровня напряжений σ_{11} , σ_{12} и момента m_{23} (слева направо)

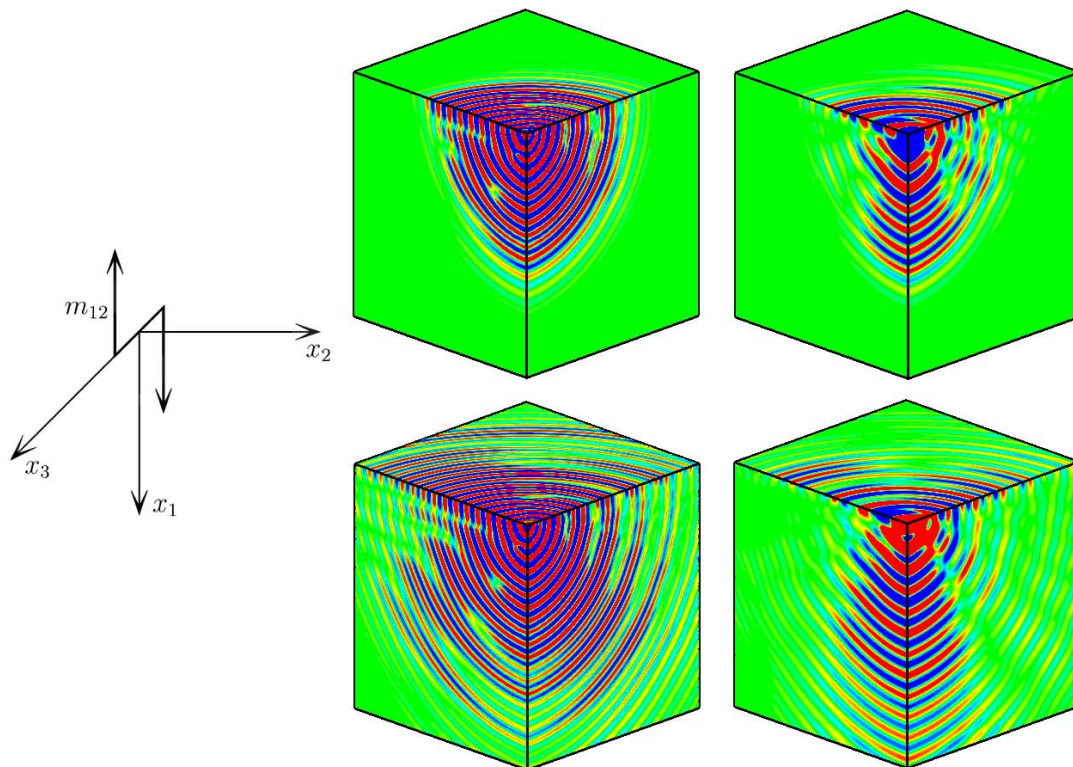


Рис. 4. Задача о периодическом воздействии сосредоточенного момента: схема нагружения и поверхности уровня угловой скорости ω_2 для нерезонансной (слева) и резонансной (справа) частот в различные моменты времени (вверху – 6.5 мкс, внизу – 13 мкс)

На рис. 4 представлены результаты расчетов для задачи о действии сосредоточенного вращательного момента $m_{12} = -m_0\delta(x)\delta(t)$, изменяющегося периодически по времени. Расчеты показали [6, 7], что при частоте внешнего воздействия, равной собственной частоте вращательного движения частиц, происходит рост амплитуды со временем и более медленное затухание колебаний с ростом расстояния, характерное для акустического резонанса.

Список литературы

- [1] САДОВСКАЯ О.В., САДОВСКИЙ В.М. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред. М.: Физматлит, 2008. 368 с.
- [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] БАРЫГИНА М.П., САДОВСКАЯ О.В., САДОВСКИЙ В.М. О резонансных свойствах моментного континуума Коссера // ПМТФ. 2010. Т. 51, № 3. С. 126–136.
- [7] SADOVSKAYA O.V., SADOVSKII V.M. Analysis of rotational motion of material microstructure particles by equations of the Cosserat elasticity theory // Acoustical Physics. 2010. V. 56, No. 6. P. 942–950.