

Исходная геометрическая модель создана с использованием программного пакета SolidWork, сохранялась в формате Parasolid и затем часть элементов импортировалась в ANSYS. Разбиение на конечно-элементную сеть и дальнейшие операции осуществлялись в ANSYS. Решалась задача нахождения НДС при приложении управляющих усилий, находилась зависимость угла поворота торсиона (лопасти) от приложенного усилия. При решении механические свойства стеклопластика задавались как для ортотропного материала. Для резинового слоя рассматриваемые механические свойства соответствовали изотропному материалу.

Полученные результаты позволяют оценить возможность и эффективность применения такого типа крепления лопасти, а также определить конструктивные параметры торсиона.

А.В. Шулепов, И.Ю. Зубко

Пермский государственный технический университет

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РАСЧЕТА КОНСТАНТ В НЕСИММЕТРИЧНОМ ЗАКОНЕ УПРУГОСТИ

Стремительное наращивание мощности современных вычислительных устройств позволяет решать прикладные задачи на качественно новом уровне. Еще десятилетие назад прямые методы моделирования использовались крайне редко и в основном для получения качественных оценок ввиду большой ресурсоемкости данных методов. На сегодняшний день прямое моделирование используется для получения как качественных, так и количественных оценок.

В представляемой работе используются методы прямого моделирования внутренней структуры материала для получения независимых компонент тензора упругих свойств $\mathbf{G}$. Определение компонент тензора напряжений осуществляется с использованием метода молекулярной статики [1]. Как и многие прямые методы моделирования, данный метод является ресурсоемким в силу не-

обходимости расчета парного взаимодействия между десятками тысяч частиц. В работе рассматривается представительный на атомарном уровне объем меди, имеющей ГЦК-решетку. В качестве парного потенциала взаимодействия используется потенциал Морзе, параметры которого были взяты из [2]:

$$U(r) = 4\varepsilon \left(e^{-2\alpha(r-\sigma)} - 2e^{-\alpha(r-\sigma)} \right).$$

Метод молекулярной статики позволяет рассчитывать силы парного взаимодействия между частицами системы (атомами кристаллической решетки). В данном случае необходимо определить компоненты меры напряженного состояния, которая используется в несимметричном законе упругости. Для этого рассматривается некоторая атомарная плоскость (конечная площадка) и компонента тензора напряжений определяется как сумма всех сил, действующих на атомы из выделенной плоскости, отнесенная к ее площади. Небольшой обзор по существующим методам определения напряжений на атомарном уровне можно найти в [3]. В силу быстрого затухания силы взаимодействия на расстоянии уже около 3σ сила составляет около 1 % от максимальной. Все частицы, находящиеся на большем расстоянии, можно просто не учитывать (в крайнем случае вводить некоторую поправку для потенциала). Таким образом, данный метод позволяет получить практически N -кратное ускорение ввиду того, что задачу можно разделить на независимые подзадачи.

Второй частью решаемой задачи является определение параметров потенциала, так как при введенных выше параметрах значения компонент G_{1111} и G_{1122} не совпадают с экспериментальными значениями. Для этого решается двумерная задача оптимизации, где варьируемыми переменными являются параметры α и ε , а критерием является соответствие получаемых компонент G_{1111} и G_{1122} экспериментальным значениям.

Основной вычислительный блок (решатель) был разработан с использованием языка Fortran. Для эффективного распараллеливания и возможности работы на кластерных системах также была использована библиотека MPI (возможно, в дальнейшем решатель будет использован в гибридной системе, для

чего потребуется также использование других библиотек, например OpenMP). Алгоритм решения задачи можно условно разделить на несколько частей:

- первоначальное определение координат частиц;
- разделение расчетной области между процессорами (сюда же входит обмен данными для последующего расчета);
- параллельное вычисление компонент вектора результирующей силы;
- сборка данных и вычисление компонент тензора упругих свойств.

При таком алгоритме одним из узких мест является первый шаг, состоящий в определении координат частиц. Тем не менее, при тестировании решателя удалось подтвердить возможность эффективного распараллеливания, а также определить максимальное количество процессов, необходимое для эффективного решения задачи в зависимости от количества частиц. В дальнейшем планируется осуществить оптимизацию алгоритма, а также добавить возможность эффективного использования решателя в гибридных системах.

Список литературы

1. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. – М.: Наука, 2007. – 301 с.
2. Girifalco L. A., Weizer V. G. Phys. Rev. 1959.
3. Trovalusci P., Capecchi D., Ruta G. Genesis of the multiscale approach for materials with microstructure, Springer-Verlag, 2008.