Применение параллельных вычислений в решении пространственных динамических задач моментной теории упругости*

М.П. Варыгина

В работе рассматривается параллельный алгоритм сквозного счета для численного моделирования распространения упругих волн на основе моментной теории упругости. Применяется метод двуциклического расщепления по пространственным переменным второго порядка точности в сочетании с явной монотонной ENO схемой решения одномерных задач. Алгоритм предназначен для численного решения пространственных динамических задач на многопроцессорных вычислительных системах.

1. Введение

Технологии распределнных вычислений оказываются незаменимыми для численного моделирования в задачах механики сплошных сред, для численного решения пространственных задач, связанных с большим объемом обрабатываемых данных. Это, прежде всего, касается задач, решаемых на мелких сетках, что позволяет повысить точность получаемого численного решения. Применение параллельных вычислений позволяет существенно снизить время расчета задач, что особенно актуально при решении пространственных динамических задач.

Данная работа посвящена применению параллельных вычислений для решения трехмерных динамических задач в рамках моментной теории упругости. В отличие от классической теории упругости, модель моментного континуума учитывает малые независимые повороты частиц, в этой модели неявно присутствует малый параметр среды - размер частиц. Как следствие, для получения корректных численный решений, расчеты необходимо выполнять на сетках, размер которых сравним с характерным размером частиц.

Моментные модели применяются при описании напряженно-деформированного состояния композитов, материалов со структурой, гранулированных и сыпучих сред, при построении неклассических моделей тонкостенных конструкций - стержней, пластин, оболочек [2].

В задаче предполагается, что исходная среда имеет сложную структуру - имеет большое количество внутренних поверхностей раздела материалов с отличающимися свойствами, жесткие включения небольшого размера и т.п. Структура среды представляет собой набор блоков с криволинейными границами между ними. Каждый блок характеризуется свойствами одного материала. На одной из граней среды задается внешнее воздействие. Задача заключается в определении полей скоростей, угловых скоростей, компонент тензора напряжений и моментных напряжений.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда науки (номер гранта 17G029), Комплексной программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 14 "Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий"(проект 14.8).

2. Постановка задачи

Полную систему уравнений, описывающих независимые малые повороты частиц, составляют уравнения [1]:

$$\begin{cases} \nabla\tau - \rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \\ \nabla m + \tau_x - j\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = 0 \\ \Lambda = \nabla u - 2\Phi^A \\ M = \nabla\Phi \\ \tau = \lambda II\cdot\cdot\Lambda^S + 2\mu\Lambda^S + 2\alpha\Lambda^A \\ m = \beta II\cdot\cdot M^S + 2\gamma M^S + 2\varepsilon M^A. \end{cases} \tag{1}$$

Здесь u - вектор перемещения частиц, Φ - вектор поворота частиц; τ, m - тензоры напряжений и моментных напряжений соответственно, τ_x - вектор тензора τ. Верхние индексы S и A обозначают симметричную и антисимметричную составляющие тензора. ρ, λ, μ, α, β, γ, ε, j - упругие характеристики среды: ρ - плотность, λ, μ - параметры Ламе, α, β, γ, ε - параметры среды Коссера, j - особая динамическая характеристика, равная произведению момента инерции частицы вокруг оси, проходящей через ее центр тяжести, на число частиц в единице объема (инерция вращения микроэлемента). Параметр инерции вращения микроэлемента j определяется формой и размерами микроэлементов [3]. Для описания гранулированных материалов параметр j можно определить как $j = \frac{2}{5}\rho r^2$, где r - характерный размер частиц среды.

В пространственном случае при малых деформациях среды кинематические уравнения (1) представляются в виде системы уравнений, записанной относительно вектора скорости v, угловой скорости ω, несимметричных тензоров напряжений τ и моментных напряжений m:

$$A\frac{\partial U}{\partial t} = B^1\frac{\partial U}{\partial x_1} + B^2\frac{\partial U}{\partial x_2} + B^3\frac{\partial U}{\partial x_3} + QU + G, \tag{2}$$

где

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

v_i, ω_i - проекции вектора скорости и угловой скорости, τ_{ij}, m_{ij} - компоненты несимметричных тензоров напряжений и моментных напряжений, матрицы A, B^i - симметричны, матрица Q - антисимметрична, G - вектор массовых сил, $i, j = 1, 2, 3$.

При выполнении условий на параметры среды

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

матрица A является положительно определенной, а система (2) - гиперболической по Фридрихсу. Для такой системы выполняется закон сохранения энергии, из которого следует корректность постановки задачи Коши и краевых задач. Характеристические свойства системы описываются уравнением

$$det(cA - n_1B^1 - n_2B^2 - n_3B^3) = 0, \quad n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1,$$

корни которого - скорости продольных, поперечных волн и волн вращения - равны

$$c_1 = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}, \quad c_2 = \sqrt{\frac{\mu + \alpha}{\rho}}, \quad c_3 = \sqrt{\frac{\beta + 2\gamma}{j}}, \quad c_4 = \sqrt{\frac{\gamma + \varepsilon}{j}}.$$

Начальные данные для задачи Коши предполагают задание вектор-функции U при $t = 0$. Краевые условия могут быть заданы в терминах скоростей

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

или напряжений

$$\sum_{j=1}^{3} n_i \tau_{ji} = p_i, \quad \sum_{j=1}^{3} n_i m_{ji} = q_i, \quad i = 1,2,3.$$

3. Алгоритм решения

Алгоритм численного решения задачи основан на методе двуциклического расщепления второго порядка точности по пространственным переменным и времени [4,5]. На временном интервале $(t, t + \triangle t)$ система уравнений (2) решается в семь этапов:

1. Решается одномерная задача в направлении x_1 на временно интервале $(t, t + \triangle t/2)$;
2. Аналогично первому этапу в направлении x_2;
3. Аналогично первому этапу в направлении x_3;
4. Решается система обыкновенных дифференциальных уравнений методом Кранка-Николсона второго порядка точности;
5. Повторный пересчет задачи в направлении x_3 на интервале $(t + \triangle t/2, t + \triangle t)$;
6. Повторный пересчет задачи в направлении x_2;
7. Повторный пересчет задачи в направлении x_1.

Двойной пересчет задачи обеспечивает устойчивость метода при выполнении условий Куранта.

Процедура расщепления приводит к следующим одномерным системам:

$$\begin{aligned}
A\frac{\partial U^{(1)}}{\partial t} &= B^1\frac{\partial U^{(1)}}{\partial x_1} + G^1, \quad U^{(1)}(t_0) = U(t_0),\\
A\frac{\partial U^{(2)}}{\partial t} &= B^2\frac{\partial U^{(2)}}{\partial x_2} + G^2, \quad U^{(2)}(t_0) = U^{(1)}(t_0 + \triangle t/2),\\
A\frac{\partial U^{(3)}}{\partial t} &= B^3\frac{\partial U^{(3)}}{\partial x_3} + G^3, \quad U^{(3)}(t_0) = U^{(2)}(t_0 + \triangle t/2),\\
A\frac{\partial U^{(4)}}{\partial t} &= QU^{(4)}, \quad U^{(4)}(t_0) = U^{(3)}(t_0 + \triangle t/2),\\
A\frac{\partial U^{(5)}}{\partial t} &= B^3\frac{\partial U^{(5)}}{\partial x_3} + G^3, \quad U^{(5)}(t_0 + \triangle t/2) = U^{(4)}(t_0 + \triangle t),\\
A\frac{\partial U^{(6)}}{\partial t} &= B^2\frac{\partial U^{(6)}}{\partial x_2} + G^2, \quad U^{(6)}(t_0 + \triangle t/2) = U^{(5)}(t_0 + \triangle t),\\
A\frac{\partial U^{(7)}}{\partial t} &= B^1\frac{\partial U^{(7)}}{\partial x_1} + G^1, \quad U^{(7)}(t_0 + \triangle t/2) = U^{(6)}(t_0 + \triangle t).
\end{aligned}$$

Искомое решение $U(t + \triangle t) = U^{(7)}(t_0 + \triangle t)$, при этом $G^1 + G^2 + G^3 = G$.

Одномерные системы уравнений решаются с помощью явной монотонной ENO-схемы типа "предиктор-корректор являющейся обобщением схемы "распада-разрыва"Годунова, с использованием кусочно-линейных сплайнов, разрывных на границах ячеек. Сплайны строятся при помощи процедуры предельной реконструкции. Процедура предельной реконструкции позволяет повысить точность численного решения.

4. Реализация алгоритма

Алгоритм реализован на языке Fortran 90 с применением библиотеки передачи сообщений MPI. Распараллеливание осуществляется на этапе расщепления задачи по пространственным переменным.

Для построения расчетной сетки задачи предварительно задаются координаты вершин блока, который характеризуется однородным материалом. Криволинейные границы блока строятся при помощи кубических сплайнов. Далее исходная область разделяется на вычислительные узлы кластера по принципу равномерной загрузки процессоров. В зависимости от размера сетки области, один вычислительный узел может обрабатывать несколько блоков, и наоборот, один блок может распределяться по нескольким процессорам. Для разделения блока по нескольким вычислительным узлам применяется способ 3D-разбиения. На каждом узле кластера программой выполняется поэтапная согласованная реализации метода расщепления. Для визуального представления результатов, файлы, подготовленные каждым процессором, обрабатываются с помощью графических программ, предназначенных для персонального компьютера. Результаты расчетов могут быть также использованы для подготовки файлов сейсмограмм.

Расчеты проводились для численного решения задачи Лэмба о действии сосредоточенной нагрузки на поверхности полупространства, численного исследования распространения упругих волн, генерируемых периодическим источником возмущений на грани полупространства, построения сейсмограмм.

Эффективность распараллеливания алгоритма определялась по формуле

$$E_n = \frac{T_1}{nT_n} \cdot 100\%$$

где E_n - ускорение работы программы на n процессорах, T_i - время расчета задачи на i процессорах. Расчетное время вычислялось для одного шага по времени задачи с размерностью сетки 100x100x100. Время работы программы уменьшалось с 2404 секунд (40 минут) на одном процессоре до 23 секунд на 125 процессорах, эффективность распараллеливания для 8 процессоров составила 97%, для 64 процессоров - 85%, для 125 - 83%.

Расчеты проводились на кластерах МВС-1000/16, МВС-1000/48 института вычислительного моделирования СО РАН, МВС-15000ВМ межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

5. Заключение

Разработан параллельный вычислительный алгоритм для решения пространственных задач динамики в рамках моментной теории упругости, основанный на методе двуциклического расщепления по пространственным переменным.

Расчеты проводились для численного решения задачи Лэмба о действии сосредоточенной нагрузки на поверхности полупространства, численного исследования распространения упругих волн, генерируемых периодическим источником возмущений на грани полупространства, построения сейсмограмм.

Литература

1. Пальмов В.А. Основные уравнения теории несимметричной упругости /В.А. Пальмов // ПММ. - 1964. - Т. 28. - Вып. 3. - С. 401-408.

2. Шкутин Л.И. Механика деформаций гибких тел /Л.И. Шкутин. - Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1988.

3. Ерофеев В.И. Волновые процессы в твердых телах с микроструктурой /В.И. Ерофеев. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999.

4. Марчук Г.И. Методы расщепления /Г.И. Марчук. - М.: Наука. Гл. ред. Физ.-мат. лит., 1988.

5. Куликовский А.Г. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений /А.Г. Куликовский, Н.В. Погорелов, А.Ю. Семенов. - М.: Физматлит, 2001.