

# Комплекс параллельных программ для моделирования упругопластических волн в структурно неоднородных средах\*

В.М. Садовский, О.В. Садовская, М.П. Варыгина

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Разработан комплекс параллельных прикладных программ, представляющий собой набор инструментальных средств, предназначенных для решения задач динамики деформируемых сред с определяющими уравнениями достаточно общего вида на основе явных разностных схем сквозного счета. Созданы компьютерные приложения 2Dyn\_Granular, 2Dyn\_Cosserat и 3Dyn\_Granular, 3Dyn\_Cosserat для численного исследования процессов распространения упругопластических волн в структурно неоднородных средах с учетом и без учета моментных свойств материала на многопроцессорных вычислительных системах кластерного типа.

## 1. Введение

Классические модели механики деформируемого твердого тела – теории упругости, пластичности и ползучести – не учитывают различное сопротивление материалов растяжению и сжатию, а также их структурную неоднородность. Симметричными по отношению к растягивающим и сжимающим деформациям можно с некоторой погрешностью считать металлы и их сплавы, но этим свойством отнюдь не обладают грунты, горные породы, углеграфиты, полимеры, пористые материалы и т.п. Например, идеальные среды типа сухого песка, частицы которых свободно контактируют между собой, при сжатии ведут себя как упругие или упругопластические тела, в зависимости от уровня напряжений, и не сопротивляются растяжению. В связных средах (грунтах, горных породах) допустимые растягивающие напряжения существенно меньше сжимающих и не превышают критического значения, обусловленного сцеплением частиц. В последнее время в технических приложениях при конструировании демпфирующих элементов применяются новые искусственные материалы – пенометаллы, пористость которых достигает 75 % (пенистый алюминий, пористая медь и т.п.). При растягивающих или сжимающих нагрузках до момента схлопывания пор такие материалы достаточно податливы и их деформация сопровождается значительной пластической диссипацией энергии, а при дальнейшем сжатии прочность резко возрастает.

Структуру (структурную неоднородность), связанную с атомным и кристаллическим строением вещества, имеют, очевидно, все материалы. Это так называемая наноразмерная – мелкомасштабная структура. Многие материалы обладают также структурой более крупного масштаба. В частности, горные породы имеют естественную кусковатость и, таким образом, неоднородны на макроуровне. Костные ткани, искусственные материалы на основе пены, нефтенасыщенные горные породы и прочие материалы неоднородны на микро- и мезоуровнях.

При численном анализе деформаций структурированных материалов на основе методов конечных элементов или конечных разностей приходится использовать достаточно мелкие расчетные сетки, размер ячеек которых существенно меньше характерного масштаба неоднородности материала. При решении динамических задач в пространственной постановке оказываются эффективными параллельные алгоритмы, поскольку они позволяют распределять вычислительную нагрузку между большим числом узлов кластера. Использование распределенных вычислений дает возможность измельчать расчетные сетки, повышая тем самым точность численного решения.

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 11-01-00053).

## 2. Математические модели

Исходная математическая модель для описания процесса деформирования упругих тел задается системой уравнений

$$A \frac{\partial U}{\partial t} = \sum_{i=1}^n B^i \frac{\partial U}{\partial x_i} + Q U + G, \quad (1)$$

где  $U$  –  $m$ -мерная искомая вектор-функция,  $A$  – симметричная положительно определенная матрица коэффициентов при производных по времени,  $B^i$  – симметричные матрицы коэффициентов при производных по пространственным переменным,  $Q$  – антисимметричная матрица,  $G$  – заданный вектор,  $n$  – размерность задачи (2 или 3). Размерность  $m$  системы (1), а также конкретный вид матриц-коэффициентов определяется используемой математической моделью.

При учете пластической деформации материала система уравнений (1) заменяется вариационным неравенством

$$(\tilde{U} - U) \left( A \frac{\partial U}{\partial t} - \sum_{i=1}^n B^i \frac{\partial U}{\partial x_i} - Q U - G \right) \geq 0, \quad \tilde{U}, U \in F, \quad (2)$$

где  $F$  – заданное выпуклое множество, с помощью которого накладываются ограничения на возможные состояния среды,  $\tilde{U}$  – произвольный элемент  $F$ .

В задачах механики сыпучих сред с пластическими свойствами возникает более общее вариационное неравенство

$$(\tilde{V} - V) \left( A \frac{\partial U}{\partial t} - \sum_{i=1}^n B^i \frac{\partial V}{\partial x_i} - Q V - G \right) \geq 0, \quad \tilde{V}, V \in F, \quad (3)$$

в котором вектор-функции  $V$  и  $U$  связаны между собой уравнениями

$$V = \lambda U + (1 - \lambda) U^\pi, \quad U = \frac{1}{\lambda} V - \frac{1 - \lambda}{\lambda} V^\pi. \quad (4)$$

Здесь  $\lambda \in (0, 1]$  – параметр регуляризации модели, характеризующий отношение модулей упругости при растяжении и сжатии,  $U^\pi$  – проекция вектора-решения на заданный выпуклый конус  $K$ , с помощью которого описывается различное сопротивление материала растяжению и сжатию.

Входящее в (2) и (3) множество допустимых вариаций  $F$  определяется условием пластичности Мизеса:

$$F = \left\{ \sigma \mid \tau(\sigma) \leq \tau_s \right\},$$

где  $\sigma$  – тензор напряжений,  $\tau(\sigma)$  – интенсивность касательных напряжений,  $\tau_s$  – предел текучести частиц. В качестве выпуклого конуса напряжений  $K$ , допускаемых критерием прочности, используется круговой конус Мизеса–Шлейхера:

$$K = \left\{ \sigma \mid \tau(\sigma) \leq \alpha p(\sigma) \right\},$$

где  $p(\sigma)$  – гидростатическое давление,  $\alpha$  – параметр внутреннего трения.

В плоских задачах динамики упругопластических сред вектор  $U$  включает в себя 6 неизвестных функций – 2 компоненты вектора скорости и 4 компоненты симметричного тензора напряжений:

$$U = (v_1, v_2, \sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}).$$

В пространственных задачах 9 неизвестных функций,

$$U = (v_1, v_2, v_3, \sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}).$$

При учете вращательных степеней свободы частиц микроструктуры материала в модели моментного континуума Коссера [1] этот вектор, наряду с компонентами вектора скорости  $v$  и тензора напряжений  $\sigma$ , содержит также компоненты вектора угловой скорости  $\omega$  и несимметричного тензора моментных напряжений  $m$ . В двумерных задачах вектор  $U$  состоит из 12 неизвестных функций:

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

а в трехмерных задачах – из 24 неизвестных функций:

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

При учете сыпучести упругопластических материалов искомым вектор  $V$  включает в себя отличные от нуля компоненты вектора скорости частиц среды  $v$  и тензора действительных напряжений  $\sigma$ , а в вектор  $U$  вместо  $\sigma$  входит тензор условных напряжений  $s$ , определяемый по закону Гука. В наиболее общей модели сыпучей среды, по-разному сопротивляющейся растяжению и сжатию, в которой учитывается вращение частиц, вектор  $U$  выглядит так:

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

а вектор  $V$  получается из  $U$  заменой компонент тензоров  $s$  и  $n$  на  $\sigma$  и  $m$ , соответственно.

### 3. Параллельный вычислительный алгоритм

Для численного решения задач о распространении волн напряжений и деформаций в средах со сложными реологическими свойствами в рамках рассматриваемых математических моделей разработан параллельный вычислительный алгоритм [2].

К решению системы уравнений (1) применяется метод расщепления по пространственным переменным. Вариационные неравенства (2) и (3) решаются методом расщепления по физическим процессам, который на каждом шаге по времени приводит к системе (1).

Технология распараллеливания вычислительного алгоритма основывается на методе двуциклического расщепления по пространственным переменным [3]. В трехмерном случае на временном интервале  $(t_0, t_0 + \Delta t)$  метод расщепления включает в себя 7 этапов: этап решения одномерной задачи в направлении  $x_1$  на интервале  $(t_0, t_0 + \Delta t/2)$ , аналогичные этапы в направлении  $x_2$  и в направлении  $x_3$ , этап решения системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с матрицей  $Q$ , этап повторного пересчета задачи в направлении  $x_3$  на интервале  $(t_0 + \Delta t/2, t_0 + \Delta t)$  и этапы повторного пересчета в направлениях  $x_2$  и  $x_1$ . Применение процедуры расщепления к системе уравнений (1) приводит к следующим одномерным системам:

$$\begin{aligned} A \frac{\partial U^1}{\partial t} &= B^1 \frac{\partial U^1}{\partial x_1} + G^1, & U^1(t_0, x) &= U(t_0, x), \\ A \frac{\partial U^2}{\partial t} &= B^2 \frac{\partial U^2}{\partial x_2} + G^2, & U^2(t_0, x) &= U^1(t_0 + \Delta t/2, x), \\ A \frac{\partial U^3}{\partial t} &= B^3 \frac{\partial U^3}{\partial x_3} + G^3, & U^3(t_0, x) &= U^2(t_0 + \Delta t/2, x), \\ A \frac{\partial U^4}{\partial t} &= Q U^4, & U^4(t_0, x) &= U^3(t_0 + \Delta t/2, x), \\ A \frac{\partial U^5}{\partial t} &= B^3 \frac{\partial U^5}{\partial x_3} + G^3, & U^5(t_0 + \Delta t/2, x) &= U^4(t_0 + \Delta t, x), \end{aligned}$$

$$A \frac{\partial U^6}{\partial t} = B^2 \frac{\partial U^6}{\partial x_2} + G^2, \quad U^6(t_0 + \Delta t/2, x) = U^5(t_0 + \Delta t, x),$$

$$A \frac{\partial U^7}{\partial t} = B^1 \frac{\partial U^7}{\partial x_1} + G^1, \quad U^7(t_0 + \Delta t/2, x) = U^6(t_0 + \Delta t, x).$$

Искомое значение  $U(t_0 + \Delta t, x)$  равно  $U^7(t_0 + \Delta t, x)$ . При расчете двумерной (плоской или осесимметричной) задачи в методе расщепления отсутствуют третий и пятый этапы, относящиеся к направлению  $x_3$ . В плоском случае  $Q = 0$  и, следовательно, отсутствует также четвертый этап.

Известно, что рассматриваемый метод расщепления является методом второго порядка точности, если на его этапах используются схемы второго порядка, и что он обеспечивает устойчивость численного решения в пространственном случае при выполнении условия устойчивости для одномерных систем. Чтобы сохранить второй порядок точности, на четвертом этапе при решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений в линейных задачах, когда векторы  $V$  и  $U$  равны друг другу, применяется неявная бездиссипативная разностная схема Кранка–Николсон:

$$A \frac{U^{k+1} - U^k}{\Delta t} = Q \frac{U^{k+1} + U^k}{2}$$

( $k$  — номер шага по времени). Для нелинейной системы уравнений на четвертом этапе используется более общая схема и решение строится по методу последовательных приближений [2].

Оставшиеся шесть одномерных систем уравнений на этапах расщепления решаются с помощью явной монотонной ENO–схемы типа “предиктор–корректор” с кусочно-линейными распределениями скоростей и напряжений по ячейкам, построенной по принципам сеточно-характеристических методов [4]. Для наиболее общей модели, включающей в себя векторы  $U$  и  $V$  и описываемой неравенством (3), в случае постоянных матриц-коэффициентов на шаге “корректор” используются соотношения

$$U^{j+1/2} = U_{j+1/2} + \frac{\Delta t}{2} A^{-1} \left( B^i \frac{V_{j+1} - V_j}{\Delta x_i} + G^i \right).$$

Здесь индекс  $j + 1/2$  относится к центру ячейки пространственной разностной сетки, верхний индекс соответствует текущему временному слою, нижний — предыдущему слою. Вектор  $V^{j+1/2}$  вычисляется через  $U^{j+1/2}$  по формуле (4). Если матрицы переменные, то в качестве разностной производной по  $x_i$  берутся соответствующие слагаемые консервативной аппроксимации. Для замыкания схемы необходимо доопределить ее соотношениями шага “предиктор”. Пусть  $Y_l$  и  $c_l$  — полная система левых собственных векторов и собственных чисел матрицы  $B^i A^{-1}$ :  $Y_l B^i = c_l Y_l A$ ,  $Y_l A Y_h = \delta_{lh}$ . Умножая уравнения системы слева на вектор  $Y_l$ , перейдем к системе дифференциальных уравнений, которые для модели упругой среды представляют собой уравнения на характеристиках:

$$Y_l A \frac{\partial U}{\partial t} = c_l Y_l A \frac{\partial V}{\partial x_i} + Y_l G^i.$$

После аппроксимации получим

$$(I_l^{j+1/2})^\pm = I_{l,j+1/2} \pm \alpha_{l,j+1/2} \frac{\Delta x_i}{2} + (c_l \beta_l + Y_l G^i)_{j+1/2} \frac{\Delta t}{4},$$

где  $\alpha_{l,j+1/2}$  и  $\beta_{l,j+1/2}$  — производные от коэффициентов разложения  $U$  и  $V$  по базису  $Y_l$ :  $I_l = (Y_l A)_{j+1/2} U$  и  $J_l = (Y_l A)_{j+1/2} V$ , вычисленные с помощью итерационной процедуры предельной реконструкции. Индексами “−” и “+” отмечены значения этих коэффициентов на левой и правой границах одной и той же ячейки. Процедура предельной реконструкции позволяет повысить точность численного решения и состоит в построении монотонных

кусочно-линейных сплайнов, приближающих  $I_l$  и  $J_l$  с минимальными разрывами на границах соседних ячеек сетки. Во внутренних узлах расчетной области на шаге “предиктор” величины  $U_j$  находятся по формуле осреднения  $U_j = (U_j^+ + U_j^-)/2$  через значения  $U_j^\pm$ , относящиеся к разным сторонам границы между ячейками и удовлетворяющие системе нелинейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}(Y_l A)_{j+1/2} U_j^+ &= I_{l,j+1/2}^- \quad \text{для } c_l \geq 0, \\ (Y_l A)_{j-1/2} U_j^- &= I_{l,j-1/2}^+ \quad \text{для } c_l \leq 0, \\ D_l V_j^+ &= D_l V_j^-. \end{aligned}$$

В этой системе уравнения с матрицами  $D_l$  представляют собой условия непрерывности вектора скорости и вектора напряжений при переходе через границу, а число уравнений с учетом этих условий равно числу неизвестных величин. Условия непрерывности реализуются численно методом последовательных приближений. Значения  $V_j$  пересчитываются через  $U_j$  в соответствии с (4).

Для учета пластических свойств материалов вариационные неравенства (2) и (3) после аппроксимации производной по времени конечной разностью на интервале  $(t_0, t_0 + \Delta t)$  в каждой ячейке пространственной сетки приводятся к виду:

$$(\tilde{V} - V) A (U - \bar{U}) \geq 0, \quad \tilde{V}, V \in F,$$

где  $\bar{U}$  – решение упругой задачи в данный фиксированный момент времени  $t_0$  (для неравенства (2)  $V = U$ ). С учетом (4) получается неравенство

$$(\tilde{V} - V) A (V - (1 - \lambda) V^\pi - \lambda \bar{U}) \geq 0.$$

Отсюда, по определению проекции,

$$V = \left( (1 - \lambda) V^\pi + \lambda \bar{U} \right)^\Pi.$$

Отображение, заданное правой частью, является сжимающим. Процедура корректировки решения для учета пластических свойств состоит, таким образом, в определении неподвижной точки сжимающего отображения, и реализуется методом последовательных приближений. В случае упругопластической среды Прандтля–Рейсса данная процедура не требует итераций и совпадает с известной процедурой корректировки напряжений Уилкинса.

Распараллеливание вычислений производится на этапе расщепления системы уравнений по пространственным переменным. Для численной реализации алгоритма используется библиотека передачи сообщений MPI [5, 6], язык программирования Fortran. Обмен данными между процессорами осуществляется на уровне коэффициентов разложения решения по базису из левых собственных векторов на этапе предельной реконструкции. Значения элементов массивов  $\alpha_l$  и  $\beta_l$  в ячейках сетки, граничащих с линией раздела, в параллельной программе пересчитываются с использованием законтурных ячеек, обмен данными через которые производится с помощью функции MPI\_Sendrecv.

Вычислительный алгоритм реализован в виде комплекса параллельных прикладных программ для решения плоских и пространственных задач динамики упругопластических сред с микроструктурой на многопроцессорных вычислительных системах. Программный комплекс позволяет проводить расчеты распространения волн, вызванных внешними механическими воздействиями, в массиве среды, составленном из произвольного числа разнородных блоков с криволинейными границами. Встраивание математической модели в программный комплекс осуществляется посредством программных модулей, реализующих определяющие уравнения нестационарной модели, начальные данные и граничные условия

задачи. 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.

Универсальность программ достигается за счет произвола в выборе числа неизвестных функций, описывающих изменяющиеся со временем искомые физические поля, а также в возможности задания любого количества слоев, полос в слое и блоков в полосе, числа узлов сетки в каждом из блоков и количества исполняющих процессоров кластера. Комплекс оснащен программами автоматического построения криволинейных расчетных сеток с помощью кубических сплайнов в плоских и пространственных областях блочной структуры по заданным координатам вершин блоков и касательным векторам к поверхностям раздела в вершинах, со статическим распределением области решения задачи между рабочими процессорами по принципу равномерной загрузки. Склеивка решений на межблочных границах выполняется специальной процедурой, в которой решение на измельченной сетке, получаемой пересечением граничных ячеек соседних блоков, определяется с помощью уравнений на характеристиках, а затем переносится на исходные сетки методом осреднения. Процессоры обмениваются данными посредством блокирующих функций `MPI_Send` и `MPI_Recv`.

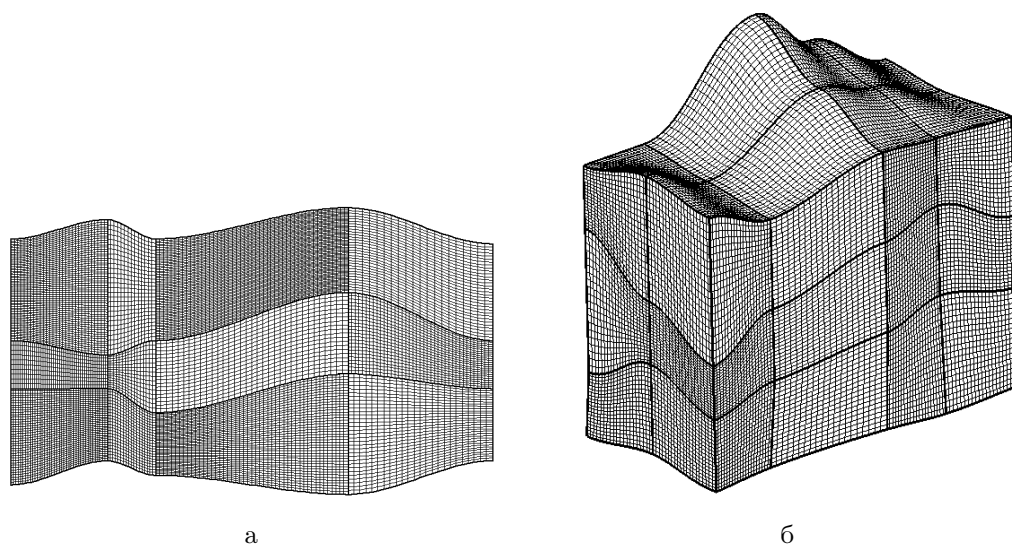
Необходимые для расчета исходные данные задачи представляются в виде текстовых файлов. Один из таких файлов содержит механические параметры материалов в блоках, другой – условия нагружения, в третьем хранится информация о блочной структуре массива – количество слоев по переменной  $x_1$ , количество полос в слое по переменной  $x_2$  и количество блоков в полосе по переменной  $x_3$ , координаты вершин блоков, а также идентификационные номера материалов и пространственные размерности сеток. Каждый из узлов кластера при выполнении программы–препроцессора упаковывает исходные данные в двоичный файл прямого доступа – файл вещественных чисел, в который поблочно записываются параметры материала, часть сетки, приходящуюся на этот узел, и начальные значения решения, и файл целых чисел, содержащий соответствующие им адреса (указатели) – порядковые номера первых элементов. Вещественные файлы такой же структуры в дальнейшем создаются основной программой для организации контрольных точек при счете и для последующего анализа полученных результатов. Суммарный размер таких файлов может значительно превышать объем оперативной памяти отдельного процессора. Каждый процессор при старте основной программы считывает целочисленный файл и соответствующий ему вещественный файл. Далее целочисленный массив редуцируется – параметры сетки и указатели принимают в нем индивидуальные значения для данного узла.

Балансировка вычислительной нагрузки достигается за счет равномерного распределения сеточной области между узлами кластера. Если размерность сетки какого-либо блока больше средней размерности в расчете на один узел кластера, то этот блок обслуживается несколькими узлами, и наоборот, один и тот же узел обслуживает несколько блоков, если их суммарная размерность не превосходит средней. Из соображений минимизации количества пересылок используются 1D, 2D или 3D–разбиения расчетной области.

Основной программой на каждом узле кластера выполняются в принципе одни и те же вычисления, которые сводятся к взаимно согласованной поэтапной реализации метода расщепления по пространственным переменным (на каждом шаге по времени). Исключение составляют процессоры, производящие склейку решений на внутренних границах раздела. Условия склейки реализуются по следующей схеме. Процессоры, обслуживающие приграничные блоки (блоки, расположенные по обе стороны от границы раздела), передают необходимую информацию одному из таких процессоров, который в дальнейшем производит расчет всей границы в целом и рассылает результаты в обратном направлении. Если разделяющая блоки граница лежит внутри области, обслуживаемой одним процессором, то склейка выполняется автономно. Обмен данными между процессорами происходит при реализации шага “предиктор” ENO–схемы на этапах расщепления задачи по пространственным переменным.

Программа-постпроцессор производит сжатие файлов, содержащих результаты счета в контрольных точках, поскольку размер таких файлов может быть очень большим и для их транспортировки по глобальной сети потребуются значительные ресурсы. Графический вывод результатов осуществляется с помощью специальных программ, предназначенных для обычного персонального компьютера. Разработана также программа для представления результатов расчетов волновых задач, полученных на кластерах, в формате SEG-Y Международного геофизического общества с целью последующей обработки данных в системе SeisView.

Комплекс программ для численного решения задач динамики структурно неоднородных деформируемых сред ориентирован на применение при изучении процессов распространения сейсмических волн в блочных массивах с криволинейными поверхностями раздела. Блочная структура массива считается регулярной в том смысле, что входящие в него отдельные блоки из однородных материалов могут быть пронумерованы тремя индексами вдоль осей декартовой системы координат. Такая нумерация возможна, только если внутренние границы раздела согласованы между собой. При наличии несогласованных границ необходимо, продолжив эти границы, произвести фиктивное регулярное разбиение массива, в котором будет участвовать большое количество блоков из одного и того же материала. Примеры регулярного разбиения на блоки, ограниченные криволинейными поверхностями, приведены на рис. 1. В двумерном случае (рис. 1 а) массив среды включает в себя 12 блоков, в трехмерном случае (рис. 1 б) он состоит из 24 блоков. Если материал в соседних блоках один и тот же, а на границе раздела заданы условия непрерывности решения, то эта граница является фиктивной. Возможно задание различных материалов во всех блоках.



**Рис. 1.** Разностные сетки в блочных массивах с криволинейными поверхностями раздела

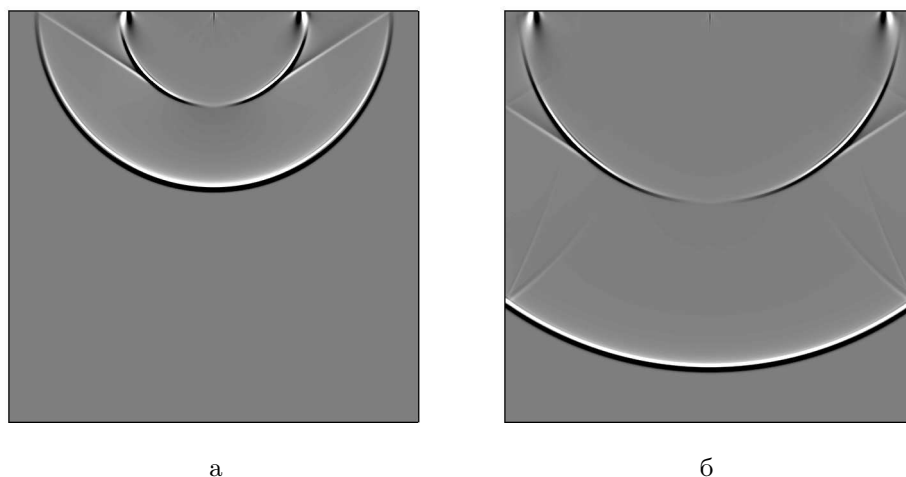
Криволинейные разностные сетки в пространственных блоках строятся с помощью алгебраического подхода, который заключается в вычислении взаимно-однозначных отображений  $x = x(\xi)$  единичного куба с равномерной сеткой в пространстве параметров  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  на физическую область. Выбор данного подхода связан с относительной простотой реализации алгоритмов склейки решений на поверхностях раздела. Функция, осуществляющая отображение, ищется в виде многомерного кубического сплайна  $x = \sum_{i_1, i_2, i_3=0}^3 C_{i_1 i_2 i_3} \xi_1^{i_1} \xi_2^{i_2} \xi_3^{i_3}$ , векторные коэффициенты которого находятся в явном виде из условий сопряжения в вершинах блоков. В двумерных (плоских, осесимметричных) задачах отображение не зависит от одного из параметров.

## 4. Комплексы программ

### 4.1. Комплекс параллельных программ для решения двумерных упругопластических задач динамики сыпучих сред (2Dyn\_Granular)

Разработан комплекс прикладных программ 2Dyn\_Granular, предназначенный для численного решения динамических задач в плоской постановке на основе универсальной математической модели, описывающей малые деформации упругих, пластических и сыпучих сред. Допускается задание блочной расчетной области, составленной из разнородных материалов с произвольным числом слоев и блоков. В случае упругого материала модель сводится к гиперболической по Фридрихсу системе уравнений (1), записанной в терминах скоростей и напряжений в симметрической форме. В случае упругопластического материала модель представляет собой специальную формулировку теории течения Прандтля–Рейсса в виде вариационного неравенства (2) с односторонними ограничениями на напряжения. Обобщение модели для описания деформации сыпучей среды (3), (4) получено на основе реологического подхода, учитывающего различное сопротивление материала растяжению и сжатию. Начальные данные краевой задачи формулируются в терминах смещений, скоростей и напряжений. На межблочных границах ставятся условия непрерывности векторов скорости и напряжений. На внешних границах расчетной области могут быть заданы граничные условия в скоростях, в напряжениях, смешанные граничные условия или условия симметрии, обеспечивающие математическую корректность задачи.

В качестве иллюстрации работоспособности программного комплекса на рис. 2 приведены результаты численного решения задачи Лэмба о действии сосредоточенной импульсной нагрузки на границе упругого блока для двух моментов времени (а и б), выполненные на сетке из  $1000 \times 1000$  узлов на 15 процессорах кластера МВС-100к Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.



**Рис. 2.** Результаты расчета двумерной задачи Лэмба (линии уровня напряжения  $\sigma_{11}$ )

На рис. 2 с помощью линий уровня нормального напряжения выделены фронты продольной, поперечной, конической и поверхностной волн, движущихся от точки приложения нагрузки в середине верхней границы вовнутрь блока. На боковых сторонах блока поставлены неотражающие граничные условия в некотором упрощенном варианте, которые дают, судя по рисунку, незначительное отражение при падении волны под углом. Сравнение с точным решением показало соответствие результатов в пределах погрешности используемой разностной схемы. Решение задачи Лэмба автоматично, не зависит от масштаба по пространственным переменным и времени, поэтому маркировка осей не приведена.



#### 4.2. Комплекс параллельных программ для решения трехмерных упругопластических задач динамики сыпучих сред (3Dyn\_Granular)

Разработан комплекс программ 3Dyn\_Granular, предназначенный для численного решения динамических задач в пространственной постановке на основе универсальной математической модели, описывающей малые деформации упругих, пластических и сыпучих сред. По аналогии с двумерным вариантом при подготовке расчета допускается задание пространственной блочной области, составленной из разнородных материалов с произвольным числом слоев, полос в слое и блоков в полосе с согласованными между собой криволинейными границами раздела. В случае изначально несогласованных границ необходимо применить процедуру фиктивного разбиения на блоки, задав в блоках, полученных в результате такого разбиения, одинаковые параметры материала. Используется трехмерный вариант представленной в предыдущем пункте модели. Постановка начальных данных и граничных условий осуществляется подобно двумерному варианту задачи.

На рис. 3 а, б приведены результаты численного решения задачи Лэмба для упругого блока (в различные моменты времени), выполненные на сетке из  $400 \times 400 \times 400$  узлов на 64 процессорах кластера МВС-100к МСЦ РАН. Поверхности уровня нормального напряжения изображают фронты продольной, поперечной, конической и поверхностной пространственных волн.

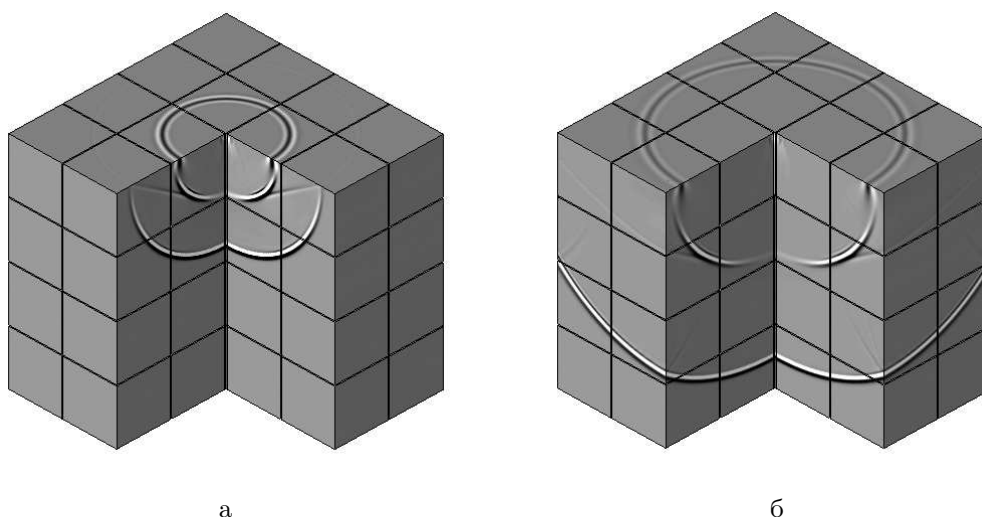


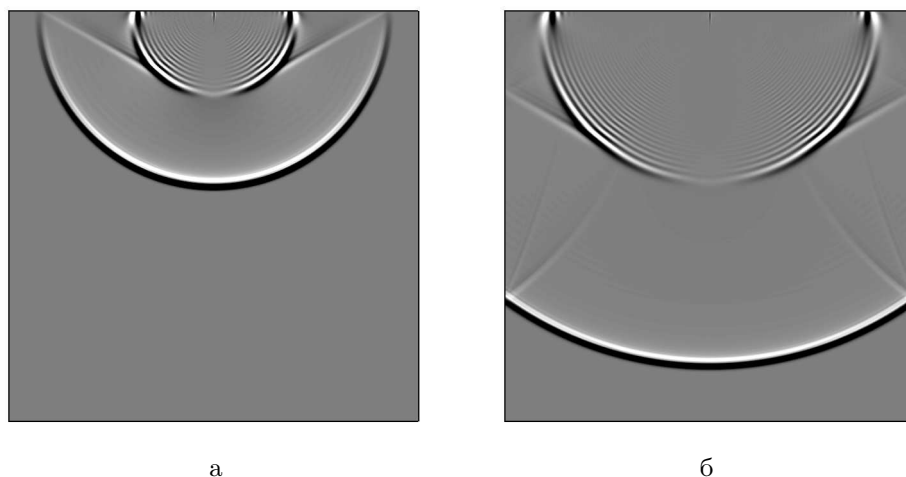
Рис. 3. Результаты расчета трехмерной задачи Лэмба (линии уровня напряжения  $\sigma_{11}$ )

#### 4.3. Комплекс параллельных программ для расчета двумерных динамических задач моментной теории упругости (2Dyn\_Cosserat)

Разработан комплекс программ 2Dyn\_Cosserat, предназначенный для численного решения плоских динамических задач моментной теории упругости Коссера, учитывающей в рамках теории малых деформаций вращательные степени свободы частиц микроструктуры материала. Допускается задание блочной расчетной области, составленной из разнородных материалов с произвольным числом слоев и блоков с согласованными криволинейными границами раздела. Модель формулируется в виде гиперболической по Фридрихсу системы уравнений (1), записанной в терминах вектора скорости поступательного движения и скорости вращательного движения, а также тензоров напряжений и моментных напряжений. Начальные данные краевой задачи формулируются в терминах смещений, угла поворота, скоростей поступательного и вращательного движения, напряжений и моментных

напряжений. На межблочных границах ставятся условия непрерывности вектора скорости и угловой скорости, векторов напряжения и моментного напряжения. На внешних границах могут быть заданы граничные условия в скоростях поступательного и вращательного движений, в напряжениях и моментных напряжениях, а также смешанные граничные условия или условия симметрии.

Для иллюстрации работоспособности программного комплекса на рис. 4 приведены результаты расчетов задачи Лэмба о действии сосредоточенной импульсной нагрузки на границе упругого блока для двух моментов времени (а и б), выполненные на сетке из  $1000 \times 1000$  узлов на 10 процессорах кластера.



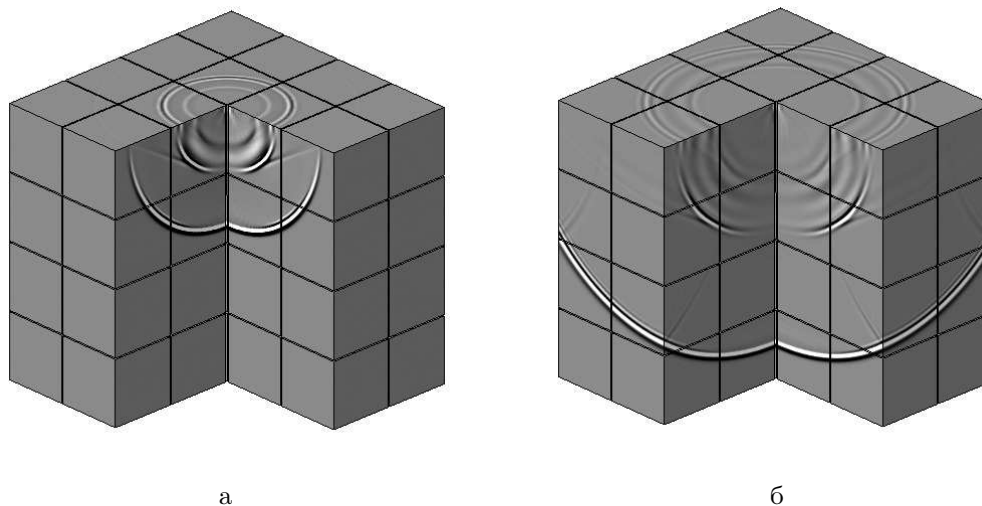
**Рис. 4.** Результаты численного решения двумерной задачи Лэмба для моментной среды (линии уровня напряжения  $\sigma_{11}$ )

На рис. 4 с помощью линий уровня нормального напряжения выделены фронты продольной, поперечной, конической и поверхностной волн, движущихся от точки приложения нагрузки в середине верхней границы вовнутрь блока. Видны также осцилляции за фронтом поперечной волны, которые зависят от характерного размера частиц микроструктуры. На боковых сторонах блока поставлены неотражающие граничные условия в упрощенном варианте.

#### 4.4. Комплекс параллельных программ для расчета трехмерных динамических задач моментной теории упругости (3Dyn\_Cosserat)

Разработан комплекс программ 3Dyn\_Cosserat, предназначенный для численного решения пространственных динамических задач моментной теории упругости Коссера. Допускается задание блочной расчетной области, составленной из разнородных материалов с произвольным числом слоев, полос в слое и блоков в полосе с согласованными между собой криволинейными границами раздела. Уравнения модели записываются в виде гиперболической по Фридрихсу системы уравнений (1) в терминах векторов скоростей поступательного и вращательного движения, а также тензоров напряжений и моментных напряжений. Начальные данные краевой задачи формулируются в терминах смещений, углов поворота, скоростей поступательного и вращательного движения, напряжений и моментных напряжений. На межблочных границах ставятся условия непрерывности векторов скорости и угловой скорости, векторов напряжения и моментного напряжения. На внешних границах могут быть заданы граничные условия в скоростях поступательного и вращательного движений, в напряжениях и моментных напряжениях, смешанные граничные условия или условия симметрии.

На рис. 5 приведены численные результаты для трехмерной задачи Лэмба, выполненные на сетке из  $400 \times 400 \times 400$  узлов на 64 процессорах кластера МВС–100k МСЦ РАН. Поверхности уровня нормального напряжения изображают фронты продольной, поперечной, конической и поверхностной пространственных волн.



**Рис. 5.** Результаты численного решения трехмерной задачи Лэмба для моментной среды (линии уровня напряжения  $\sigma_{11}$ )

Существенное отличие результатов расчетов по моментной теории (рис. 4 и 5) от безмоментной теории (рис. 2 и 3) состоит в том, что в моментной среде за фронтом поперечной волны появляется дополнительная система высокочастотных волн, обусловленных вращательным движением частиц.

## 5. Заключение

Разработанные алгоритмы и комплексы программ для численного решения задач динамики структурно неоднородных деформируемых сред ориентированы на применение при изучении процессов распространения сейсмических волн в блочных массивах с криволинейными поверхностями раздела.

## Литература

1. Cosserat E., Cosserat F. *Theorie des Corps Deformables* // Chwolson's *Traité Physique*: 2nd ed. Paris, 1909. P. 953–1173.
2. Садовская О.В., Садовский В.М. *Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред*. М.: Физматлит, 2008. 368 с.
3. Марчук Г.И. *Методы расщепления*. М.: Наука, 1988. 263 с.
4. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. *Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений*. М.: Физматлит, 2001. 607 с.
5. Корнеев В.Д. *Параллельное программирование в MPI*. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2002. 215 с.
6. Антонов А.С. *Параллельное программирование с использованием технологии MPI*. М.: Изд-во МГУ, 2004. 71 с.