

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ МОМЕНТНОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ¹

М.П. Варыгина, О.В. Садовская*

Разработан параллельный алгоритм сквозного счета для численного моделирования распространения упругих волн на основе моментной теории упругости Коссера. Используется метод двуциклического расщепления по пространственным переменным в сочетании с явной монотонной ENO-схемой решения одномерных задач, адаптированной к расчету сильных разрывов. Алгоритм предназначен для численного решения двумерных динамических задач на многопроцессорных вычислительных системах.

Математическая модель моментного континуума Коссера, учитывающая микроструктуру материала, применяется для описания напряженно-деформированного состояния композитов, гранулированных, порошкообразных и сыпучих материалов, а также для построения неклассических моделей тонкостенных конструкций – стержней, пластин, оболочек [1, 2]. Кроме поступательного движения, которое характеризуется вектором перемещений u , в этой модели рассматриваются независимые повороты частиц с вектором вращений ϕ , а наряду с тензором напряжений τ , компоненты которого несимметричны, вводится несимметричный тензор моментных напряжений m . Полную систему уравнений составляют уравнения движения, кинематические соотношения и обобщенный закон линейной теории упругости [1]:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \nabla \tau + \rho g, & j \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} &= \nabla m + \tau_{\times}, \\ \Lambda &= \nabla u - 2\phi^a, & M &= \nabla \phi, \\ \tau &= \lambda(I : \Lambda^s)I + 2\mu \Lambda^s + 2\alpha \Lambda^a, & m &= \beta(I : M^s)I + 2\gamma M^s + 2\varepsilon M^a. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь g – вектор массовых сил; ρ – плотность среды; j – особая динамическая характеристика, равная произведению момента инерции частицы вокруг оси, которая проходит через ее центр тяжести, на число частиц в единице объема; $\lambda, \mu, \alpha, \beta, \gamma, \varepsilon$ – феноменологические параметры упругости для изотропной среды. Верхние индексы s и a служат для обозначения симметричной и антисимметричной частей тензора. Используются общепринятые операции тензорного анализа, в частности, через $\tau_{\times}$ обозначен вектор антисимметричной составляющей тензора τ .

Для простоты рассмотрим далее случай плоского деформированного состояния. В этом случае модель приводится к следующей системе уравнений:

$$A \frac{\partial U}{\partial t} = B^1 \frac{\partial U}{\partial x_1} + B^2 \frac{\partial U}{\partial x_2} + QU + G, \quad (2)$$

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 04-01-00267), гранта Президента РФ (код проекта МК-982.2004.1) и Комплексной Программы фундаментальных исследований Президиума РАН “Параллельные вычисления на многопроцессорных вычислительных системах”.

* © М.П. Варыгина, Красноярский государственный университет; E-mail: varyginam@yandex.ru; О.В. Садовская, Институт вычислительного моделирования СО РАН; E-mail: o_sadov@icm.krasn.ru; 2005.

записанной относительно вектор-функции U , включающей в себя линейные скорости и угловую скорость частиц, а также отличные от нуля компоненты тензоров напряжений:

$$U = (v_1, v_2, \omega, \tau_{11}, \tau_{22}, \tau_{33}, \tau_{12}, \tau_{21}, m_{13}, m_{23}, m_{31}, m_{32}). \quad (3)$$

Матрицы-коэффициенты системы A , B^1 и B^2 симметричны, а матрица Q антисимметрична:

$$A = \begin{pmatrix} \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & j & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_1 & -a_2 & -a_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -a_2 & a_1 & -a_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -a_2 & -a_2 & a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_3 & -a_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a_4 & a_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_5 & -a_6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a_6 & a_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_5 & -a_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a_6 & a_5 \end{pmatrix},$$

$$B^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$B^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$G = \begin{pmatrix} \rho g_1 \\ \rho g_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

где $a_1 = \frac{\lambda + \mu}{\mu(3\lambda + 2\mu)}$, $a_2 = \frac{\lambda}{2\mu(3\lambda + 2\mu)}$, $a_3 = \frac{\mu + \alpha}{4\mu\alpha}$, $a_4 = \frac{\mu - \alpha}{4\mu\alpha}$, $a_5 = \frac{\gamma + \varepsilon}{4\gamma\varepsilon}$, $a_6 = \frac{\gamma - \varepsilon}{4\gamma\varepsilon}$. При выполнении системы неравенств, гарантирующих неотрицательность упругой энергии:

$$\mu > 0, \quad 3\lambda + 2\mu > 0, \quad \mu, \alpha, \gamma, \varepsilon > 0, \quad (5)$$

матрица A положительно определена. Таким образом, система уравнений (2) является гиперболической по Фридрихсу. Для такой системы выполняется закон сохранения энергии

$$\frac{\partial}{\partial t}(UAU) = \frac{\partial}{\partial x_1}(UB^1U) + \frac{\partial}{\partial x_2}(UB^2U) + 2UG, \quad (6)$$

из которого следует корректность постановки задачи Коши и краевых задач с диссипативными граничными условиями, ограниченность областей зависимости и влияния решения (конечность скорости распространения возмущений). Характеристические свойства системы описываются уравнением

$$\det(cA - n_1 B^1 - n_2 B^2) = 0, \quad n_1^2 + n_2^2 = 1, \quad (7)$$

корни которого – скорости продольных, поперечных волн и волн вращения – равны:

$$c_1 = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}, \quad c_2 = \sqrt{\frac{\mu + \alpha}{\rho}}, \quad c_3 = \sqrt{\frac{\gamma + \varepsilon}{\rho}}. \quad (8)$$

Алгоритм численного решения задачи основан на методе двуциклического расщепления второго порядка точности по пространственным переменным и времени. На временном интервале $(t, t + \Delta t)$ метод расщепления включает в себя четыре этапа: этап решения одномерной задачи в направлении x_1 на интервале $(t, t + \Delta t/2)$, аналогичный этап в направлении x_2 , этап повторного пересчета задачи в том же направлении на интервале $(t + \Delta t/2, t + \Delta t)$ и этап повторного пересчета в направлении x_1 .

Пространственное расщепление на криволинейных сетках производится не по физическим переменным x_1 и x_2 , а по параметрам ξ_1 и ξ_2 , на плоскости которых область решения отображается в прямоугольник. На параметрической плоскости вводится равномерная прямоугольная сетка. Процедура расщепления приводит к следующим одномерным системам:

$$\begin{aligned} A \frac{\partial U^1}{\partial t} &= \bar{B}^1 \frac{\partial U^1}{\partial \xi_1} + Q^1 U^1 + G^1, \quad U^1(t) = U(t), \\ A \frac{\partial U^2}{\partial t} &= \bar{B}^2 \frac{\partial U^2}{\partial \xi_2} + Q^2 U^2 + G^2, \quad U^2(t) = U^1(t + \Delta t/2), \\ A \frac{\partial U^3}{\partial t} &= \bar{B}^2 \frac{\partial U^3}{\partial \xi_2} + Q^2 U^3 + G^2, \quad U^3(t + \Delta t/2) = U^2(t + \Delta t/2), \\ A \frac{\partial U^4}{\partial t} &= \bar{B}^1 \frac{\partial U^4}{\partial \xi_1} + Q^1 U^4 + G^1, \quad U^4(t + \Delta t/2) = U^3(t + \Delta t), \end{aligned} \quad (9)$$

где $Q^1 + Q^2 = Q$, $G^1 + G^2 = G$, $\bar{B}^i = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_1} B^1 + \frac{\partial \xi_i}{\partial x_2} B^2$ ($i = 1, 2$). Искомое значение $U(t + \Delta t)$ равно

$U^4(t + \Delta t)$. Одномерные системы решаются с помощью монотонной схемы типа “предиктор – корректор” (обобщения схемы “распада разрыва” Годунова) с использованием кусочно-линейных сплайнов, разрывных на границах ячеек.

Способ построения схемы решения одномерных задач рассмотрим на примере системы уравнений общего для всех этапов расщепления вида

$$A \frac{\partial U}{\partial t} = \bar{B} \frac{\partial U}{\partial \xi} + QU + G. \quad (10)$$

На шаге “корректор” используются соотношения

$$A \frac{U^{k+1/2} - U_{k+1/2}}{\Delta t/2} = \bar{B} \frac{U_{k+1} - U_k}{\Delta \xi} + Q \frac{U_{k+1} + U_k}{2} + G. \quad (11)$$

Здесь индекс $k + 1/2$ относится к центру ячейки пространственной разностной сетки, верхний индекс соответствует текущему временному слою, нижний – предыдущему слою. Для замыкания схемы необходимо доопределить ее соотношениями шага “предиктор”. Пусть Y_l и y_l – полная система левых собственных векторов и собственных чисел матрицы $\bar{B}A^{-1}$:

$$y_{1,2} = \pm c_1 \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}, \quad y_{3,4} = \pm c_2 \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}, \quad y_{5,6} = \pm c_3 \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2}, \quad y_{7,\dots,12} = 0, \quad (12)$$

где $\alpha_1 = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_1}$, $\alpha_2 = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_2}$ в направлении ξ_i . Умножая (10) слева на Y_l , перейдем к системе дифференциальных уравнений, представляющих собой уравнения на характеристиках:

$$Y_l A \frac{\partial U}{\partial t} = y_l Y_l A \frac{\partial U}{\partial \xi} + Y_l (QU + G), \quad l = 1, \dots, 12. \quad (13)$$

После аппроксимации получим

$$(I_l^{k+1/2})^\pm = I_{l,k+1/2} \pm \beta_{l,k+1/2} \Delta \xi / 2 + [y_l \beta_l + Y_l (QU + G)]_{k+1/2} \Delta t / 4, \quad (14)$$

где $\beta_{l,k+1/2}$ – производные от $I_l = (Y_l A)_{k+1/2} U$ в пределах ячейки, полученные с помощью итерационной процедуры предельной реконструкции [3]; 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 с минимальными разрывами на границах соседних ячеек сетки. Во внутренних узлах расчетной области на шаге “предиктор” величины U_k находятся по формуле осреднения $U_k = (U_k^+ + U_k^-) / 2$ через значения $U_k^\pm$, относящиеся к разным сторонам границы между ячейками и удовлетворяющие системе линейных алгебраических уравнений, которая состоит из уравнений на характеристиках и условий непрерывности:

$$\begin{aligned} (Y_l A)_{k+1/2} U_k^+ &= I_{l,k+1/2}^- \text{ для } y_l \geq 0, & (Y_l A)_{k+1/2} U_{k+1}^- &= I_{l,k+1/2}^+ \text{ для } y_l \leq 0; \\ [v_1]_{k+1/2} &= 0, & [v_2]_{k+1/2} &= 0, & [\omega]_{k+1/2} &= 0, \\ [n_1 \tau_{11} + n_2 \tau_{21}]_{k+1/2} &= 0, & [n_1 \tau_{12} + n_2 \tau_{22}]_{k+1/2} &= 0, & [n_1 m_{13} + n_2 m_{23}]_{k+1/2} &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь n_1 и n_2 – проекции вектора нормали, квадратные скобки служат для обозначения скачка при переходе через границу.

Начальные данные краевой задачи предполагают задание вектор-функции U при $t = 0$. Граничные условия могут быть сформулированы в терминах скоростей

$$v_1 = v_1^0, \quad v_2 = v_2^0, \quad \omega = \omega^0 \quad (16)$$

или напряжений

$$n_1 \tau_{11} + n_2 \tau_{21} = p_1, \quad n_1 \tau_{12} + n_2 \tau_{22} = p_2, \quad n_1 m_{13} + n_2 m_{23} = p_3. \quad (17)$$

Алгоритм расчета основных типов граничных условий аналогичен приведенному в [4].

Разработанный вычислительный алгоритм допускает распараллеливание на этапе расщепления задачи по пространственным переменным. При этом область решения должна быть разбита на горизонтальные или вертикальные полосы (1D разбиение) по числу процессов. Предположим, что полосы горизонтальные. Тогда на каждом временном шаге решение одномерных систем уравнений типа (10) в горизонтальном направлении, параллельном линиям разбиения на процессы, происходит автономно. В вертикальном направлении обмен между процессами осуществляется на уровне коэффициентов разложения (14) на этапе предельной реконструкции. Может быть использована обычная технология законтурных ячеек, когда каждый узел кластера содержит в своей автономной памяти расширенные массивы, включающие ячейки данных, которые относятся к соседним узлам. Обмен данными производится через эти ячейки по мере необходимости. Для минимизации времени счета объем блока передаваемых данных (и, следовательно, число передач) можно варьировать путем совместного решения определенного количества однотипных одномерных систем.

Необходимые для расчета исходные данные задачи представляются в виде текстовых файлов, содержащих механические параметры материала, координаты вершин криволинейных границ области решения и пространственную размерность сетки. Расчетная сетка в простейшем варианте строится с помощью кубических эрмитовых сплайнов.

Программный комплекс целесообразно разбить на три независимые программы: программу-препроцессор, основную программу и программу-постпроцессор [5]. Программа-препроцессор служит для упаковки исходных данных в два двоичных файла прямого доступа – файл вещественных чисел, в который записываются параметры материала, сетка и начальные значения решения, и файл целых чисел, содержащий соответствующие им указатели – порядковые номера первых элементов. Вещественные файлы такой же структуры в дальнейшем должны создаваться основной программой для организации контрольных точек при счете и для последующего анализа полученных результатов. Размер каждого из таких файлов может значительно превышать объем оперативной памяти отдельного узла кластера. Каждый из узлов при старте программы считывает весь целочисленный файл и только ту часть вещественного файла, которая относится к его процессу. Далее целочисленный массив (образ целочисленного файла) редуцируется – параметры сетки и указатели принимают в нем индивидуальные значения для данного узла. Разбиение на процессы должно проводиться по принципу равномерной загрузки. На каждом узле кластера основной программой выпол-

няются в принципе одни и те же вычисления, которые сводятся к взаимно согласованной поэтапной реализации метода расщепления. Программа-постпроцессор выполняет прореживание файлов, содержащих результаты счета в контрольных точках, пробегаая ячейки сетки с заданным шагом. Такое прореживание необходимо, поскольку размер файлов может быть очень большим и для их транспортировки по сети потребуются значительное время. Графический вывод результатов осуществляется с помощью специальных программ, предназначенных для обычного персонального компьютера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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. Куликовский А.Г. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений / А.Г. Куликовский, Н.В. Погорелов, А.Ю. Семенов. – М.: Физматлит, 2001.
4. Садовская О.В. Метод сквозного счета для исследования упругопластических волн в сыпучей среде / О.В. Садовская // ЖВМиМФ. – 2004. – Т. 44. – № 10. – С. 1909-1920.
5. Садовская О.В. Параллельная реализация алгоритма для расчета упругопластических волн в сыпучей среде / О.В. Садовская, В.М. Садовский // Вычисл. методы и программирование. – 2005. – Т. 6. – С. 128-135.

PARALLEL COMPUTATIONAL ALGORITHM FOR THE SOLUTION OF DYNAMIC PROBLEMS OF MOMENT ELASTICITY THEORY

M.P. Varygina, O.V. Sadovskaya

A parallel shock-capturing algorithm is worked out for computational modeling of the elastic waves propagation on the basis of Kosserrat's moment elasticity theory. The space-variable two-cyclic decomposition method in combination with the explicit monotone ENO-scheme of the one-dimensional problems solution, adapted to the strong discontinuities calculation, is used. The algorithm is intended for numerical solution of two-dimensional dynamic problems on multiprocessor computer systems.