

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ЗАДАЧАХ ДИНАМИКИ СЫПУЧЕЙ СРЕДЫ¹

О.В.Садовская, В.М.Садовский *

Разработаны алгоритмы и программы для численного решения пространственных динамических задач в рамках нелинейных моделей упругопластической среды и разнородной (сыпучей) среды, по-разному сопротивляющейся растяжению и сжатию. Применяется метод расщепления по физическим процессам, который приводит к решению на каждом временном шаге задачи теории упругости с последующей итерационной корректировкой решения. Проведена верификация основной расчетной программы на одномерных тестах – точных решениях задач с плоскими упругими и пластическими волнами. На кластере МВС-1000 в трехмерной постановке выполнены расчеты взаимодействия ударных волн уплотнения (сигнотонов) в неоднородно разрыхленной сыпучей среде.

В отличие от жидкостей или газов, которые растекаются в условиях неравномерного поля давлений, в сыпучих и пористых материалах можно создавать устойчивые статические состояния неоднородного разрыхления. Скорость волн в таких состояниях оказывается зависящей от начальной деформации среды [1, 2] аналогично зависимости скорости ударных волн в газах от локального значения плотности, и это приводит к искажению первоначально плоских волновых фронтов, отставанию волн в разреженных областях по сравнению с более плотными областями.

Для численного моделирования распространения волн в сыпучих средах в работе [3] предложен метод сквозного счета, основанный на расщеплении математической модели по физическим процессам и по пространственным переменным. Прямое численное решение трехмерных задач на современном персональном компьютере ограничено по объему оперативной памяти размерностью сетки примерно в $200 \times 200 \times 200$ узлов. Точность получаемого на такой сетке решения не всегда оказывается удовлетворительной, особенно если расчетная область имеет сложную структуру – содержит большое количество внутренних поверхностей раздела материалов с существенно различающимися механическими свойствами, жесткие включения небольшого размера и т.п. Кроме того, при реализации в каждой ячейке сеточной области итерационных процессов возникают естественные ограничения на время счета задач, которые снимаются с применением многопроцессорных вычислительных систем.

В настоящей работе описан комплекс прикладных программ для суперкомпьютеров с параллельной архитектурой, позволяющий исследовать нестационарные волновые процессы в массиве среды, составленном из произвольного числа разнородных криволинейных блоков. На внутренних поверхностях раздела векторы перемещения, скорости и напряжения предполагаются непрерывными, что соответствует условиям жесткой склейки блоков. На внешней границе массива допускается постановка основных типов граничных условий в напряжениях и скоростях, а также неотражающих условий, моделирующих беспрепятственное прохождение волн.

Препроцессор. Сначала необходимо ввести исходные данные задачи – область решения, составленную из пространственных криволинейных блоков, а также механические свойства материалов в блоках и условия нагружения. Геометрия блочной области задается координатами вершин блоков относительно декартовой системы координат, которые формируются в виде текстового файла данных. В начале этого файла указывается число слоев N_1 по переменной x_1 , число полос в слое N_2 по переменной x_2 и число блоков в полосе N_3 по переменной x_3 . Предполагается, что границы блоков согласованы между собой. Таким образом, число блоков в массиве сыпучей среды оказывается равным произведению $N_1 N_2 N_3$. Перейти к более общему случаю несогласованных границ можно, очевидно, за счет фиктивного разбиения массива.

Второй текстовый файл исходных данных содержит феноменологические параметры материалов в определенной системе единиц измерения (например, СИ) и размерности разностных сеток в блоках по трем пространственным координатам. Каждый материал характеризуется плотностью, двумя упругими постоянными – скоростями продольных и поперечных упругих волн, пределом текучести и коэффициентом внутреннего трения. Некоторые из материалов могут оказаться идеально упругими или упругопластическими. В этом случае соответствующая часть параметров не задается.

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

*© О.В.Садовская, В.М.Садовский, Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2006. E-mail: o_sadov@icm.krasn.ru; sadov@icm.krasn.ru

С помощью координат вершин и параметров материалов специальная программа–препроцессор осуществляет построение независимых (несогласованных) криволинейных разностных сеток в блоках и вычисляет предельно допустимый по условию Куранта–Фридрихса–Леви шаг интегрирования системы уравнений на основе явных разностных схем. Кроме того, программа распределяет расчетную область между параллельными вычислительными узлами, задает начальные данные (однородные в случае, если исходное состояние массива является естественным) и упаковывает координаты узлов сетки и начальные значения решения в двоичный файл данных, который служит отправной точкой для основной вычислительной программы.

Программирование выполнено по технологии *SPMD* (Single Program – Multiple Data) на алгоритмическом языке *Fortran-90*. Используется библиотека функций обмена сообщениями *MPI* (Message Passing Interface). Универсальность программы достигается за счет специальной упаковки переменных, используемых на каждом из вычислительных узлов кластера, в одномерные массивы большой размерности.

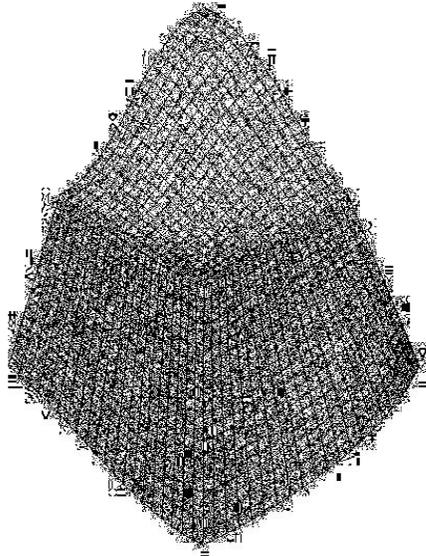


Рис. 1. Разностная сетка

Криволинейные сетки строятся вычислительными узлами автономно с помощью алгебраического подхода, который заключается в построении взаимнооднозначных отображений единичного куба с равномерной сеткой в пространстве параметров ξ_1, ξ_2, ξ_3 на физическую область блоков. Выбор данного подхода, в основном, связан с относительной простотой реализации алгоритмов склейки решений на поверхностях раздела блоков, поскольку такие отображения на общих границах совпадают. Функция $x = x(\xi)$, осуществляющая отображение, ищется в виде многомерного кубического сплайна

$$x = \sum_{i,j,k=0}^3 c_{ijk} \xi_1^i \xi_2^j \xi_3^k,$$

векторные коэффициенты которого находятся в явном виде из условий сопряжения в вершинах блоков: положения вершин заданы, а направления выхода координатных линий в вершинах определяются из соображений ортогональности. На рис. 1 приведен пример построенной таким способом сетки в криволинейном блоке, на рис. 2 – примеры *1D* и *3D* разбиений блока при распараллеливании на 8 процессов.

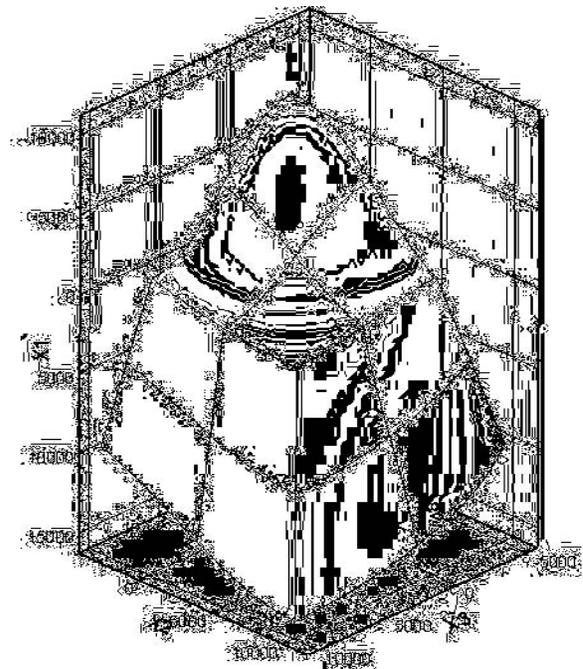
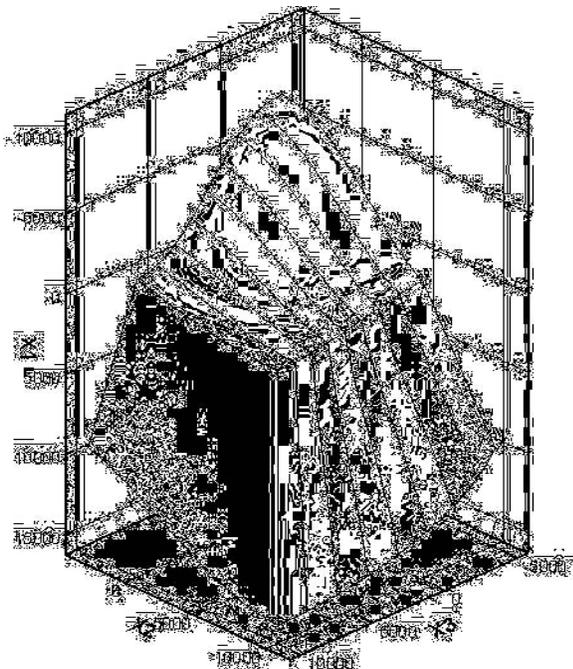


Рис. 2. 1D и 3D разбиения блока

Балансировка вычислительной нагрузки в программе–препроцессоре достигается за счет равномерного распределения сеточной области между вычислительными узлами. Применяется простейший алгоритм

разбиения. Если размерность сетки в блоке больше средней размерности в расчете на один узел кластера, то этот блок обслуживается несколькими узлами, и наоборот, один и тот же узел обслуживает несколько следующих друг за другом блоков, если их суммарная размерность не превосходит средней. Принята естественная нумерация блоков, соответствующая вложенным циклам в порядке нумерации координатных осей. Разбиение между вычислительными узлами согласовано с границами раздела, что в дальнейшем существенно упрощает алгоритм склейки решений.

Сопоставление различных способов распределения задачи между узлами показывает, что $3D$ разбиение области имеет явные преимущества перед $1D$ разбиением: число поверхностей, через которые при расчете будет происходить обмен данными, минимально (см. рис. 2: три поверхности примерно одинаковой размерности сетки по сравнению с семью). Однако ситуация может кардинально измениться, например, если один размер блока существенно отличается от двух других. Поэтому в комплекс программ включены все упомянутые выше варианты разбиения.

Метод сквозного счета. Алгоритм расчетной программы основан на математической модели динамического деформирования разнопрочной среды, которая формулируется в виде вариационного неравенства [3]

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

Здесь $V(t, x)$ и $U(t, x)$ – m -мерные вектор-функции, первая из которых составлена из отличных от нуля компонент вектора скорости частиц среды и тензора действительных напряжений, а во вторую вместо тензора напряжений входит тензор условных напряжений. Симметричные матрицы-коэффициенты A и B^i размерности $m \times m$ (матрица A положительно определена) содержат параметры упругости среды, Q и G – заданные матрица и вектор, \tilde{V} – варьируемый вектор, n – пространственная размерность задачи. Входящее в (1) множество допустимых вариаций F определяется критерием пластичности Мизеса. Вектор-функции U и V связаны между собой нелинейным соотношением. Для идеально сыпучей среды V представляет собой проекцию U по евклидовой норме $|U| = \sqrt{U^T A U}$ на конус K с вершиной в нуле, который строится в соответствии с критерием прочности Мизеса–Шлейхера и зависит от коэффициента внутреннего трения. В модели связанной сыпучей среды

$$V = \lambda U + (1 - \lambda) U^\pi, \quad U = \frac{1}{\lambda} V - \frac{1 - \lambda}{\lambda} V^\pi, \quad (2)$$

где индекс π означает проекцию на K , $\lambda \in (0, 1]$ – параметр, характеризующий отношение модулей упругости материала при растяжении и сжатии. Эквивалентность соотношений (2) вытекает из общих свойств проекции на выпуклый конус.

В пространственных задачах $n = 3$, $m = 9$. При учете плоской или осевой симметрии $n = 2$ и $m = 6$. В случае декартовой системы координат матрица Q равна нулю. Вектор G также равен нулю, если пренебречь массовыми силами.

Если конус K совпадает с пространством R^m или параметр λ равен единице, то система (1), (2) описывает упругопластический материал Прандтля–Рейсса, диаграмма деформирования которого симметрична по отношению к растяжению и сжатию:

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

Если $F = R^m$, то неравенство (1) превращается в систему уравнений

$$A \frac{\partial U}{\partial t} = \sum_{i=1}^n B^i \frac{\partial V}{\partial x_i} + QV + G, \quad (3)$$

описывающих совместно с (2) деформирование разномодульной упругой среды. Если, кроме того, $K = R^m$ или $\lambda = 1$, то последняя система преобразуется к системе линейных уравнений динамической теории упругости.

Численная реализация модели (1), (2) при заданных начальных данных и граничных условиях задачи осуществляется на основе метода расщепления по физическим процессам, на первом этапе которого по заданному в момент времени t_0 векторному полю $U(t_0, x)$ с помощью системы уравнений (2), (3) вычисляется $U(t_0 + \Delta t, x)$, а на втором этапе на интервале $(t_0, t_0 + \Delta t)$ при условии $\bar{U}(t_0, x) = U(t_0 + \Delta t, x)$ решается вариационное неравенство

$$(\tilde{V} - \bar{V}) A \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} \geq 0, \quad \tilde{V}, \bar{V} = \lambda \bar{U} + (1 - \lambda) \bar{U}^\pi \in F. \quad (4)$$

В качестве искомого решения, отвечающего моменту времени $t_0 + \Delta t$, принимается $\bar{U}(t_0 + \Delta t, x)$. Тем самым процесс деформирования среды на малом временном интервале представляется в виде суперпозиции упругого и пластического процессов.

После аппроксимации входящей в (4) производной по времени в каждой ячейке пространственной сетки возникает неравенство

$$(\tilde{V} - V)A(V - (1 - \lambda)V^\pi - \lambda\bar{U}) \geq 0, \quad \tilde{V}, V \in F,$$

в котором \bar{U} является решением на один шаг по времени краевой задачи для системы уравнений разномодульной упругой среды. Отсюда

$$V = [(1 - \lambda)V^\pi + \lambda\bar{U}]^\Pi, \quad (5)$$

где индекс Π служит для обозначения проекции на множество F по введенной выше евклидовой норме. Доказывается [3], что отображение, определяемое правой частью уравнения (5), сжимающее. Таким образом, для учета пластичности среды в соответствии с методом расщепления применяется корректировка упругого решения, полученного на первом этапе, которая сводится к определению неподвижной точки сжимающего отображения и может быть реализована методом последовательных приближений.

Метод расщепления по пространственным переменным [4] применяется не в физическом, а в параметрическом пространстве. При этом система уравнений (3) преобразуется к виду

$$A \frac{\partial U}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \bar{B}^i \frac{\partial V}{\partial \xi_i} + QV + G, \quad \bar{B}^i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} B^j.$$

В соответствии с этим методом на каждом временном шаге последовательно решается серия из семи одномерных задач:

$$\begin{aligned} A \frac{\partial U^1}{\partial t} &= \bar{B}^1 \frac{\partial V^1}{\partial \xi_1}, & U^1(t_0, \xi) &= U(t_0, \xi), \\ A \frac{\partial U^2}{\partial t} &= \bar{B}^2 \frac{\partial V^2}{\partial \xi_2}, & U^2(t_0, \xi) &= U^1(t_0 + \Delta t/2, \xi), \\ A \frac{\partial U^3}{\partial t} &= \bar{B}^3 \frac{\partial V^3}{\partial \xi_3}, & U^3(t_0, \xi) &= U^2(t_0 + \Delta t/2, \xi), \\ A \frac{\partial U^4}{\partial t} &= QV^4 + G, & U^4(t_0, \xi) &= U^3(t_0 + \Delta t/2, \xi), \\ A \frac{\partial U^5}{\partial t} &= \bar{B}^3 \frac{\partial V^5}{\partial \xi_3}, & U^5(t_0 + \Delta t/2, \xi) &= U^4(t_0 + \Delta t, \xi), \\ A \frac{\partial U^6}{\partial t} &= \bar{B}^2 \frac{\partial V^6}{\partial \xi_2}, & U^6(t_0 + \Delta t/2, \xi) &= U^5(t_0 + \Delta t, \xi), \\ A \frac{\partial U^7}{\partial t} &= \bar{B}^1 \frac{\partial V^7}{\partial \xi_1}, & U^7(t_0 + \Delta t/2, \xi) &= U^6(t_0 + \Delta t, \xi). \end{aligned} \quad (6)$$

Искомое значение $U(t_0 + \Delta t, \xi)$ равно $U^7(t_0 + \Delta t, \xi)$. К каждой из одномерных задач применяется явная монотонная разностная *ENO* (Essentially Non-Oscillatory) – схема предиктор-корректор с предельной реконструкцией решения (см. [5]), которая представляет собой обобщение схемы Годунова с кусочно-линейными распределениями скоростей и напряжений по ячейкам, является вариантом сеточно-характеристической схемы и имеет второй порядок точности. На четвертом этапе метода для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений используется неявная схема Кранка–Николсона второго порядка. Следует заметить, что рассматриваемый метод двуциклического расщепления сохраняет второй порядок точности при использовании на его этапах любой одномерной схемы второго порядка и гарантирует устойчивость счета при выполнении одномерного условия Куранта–Фридрихса–Леви.

Для сохранения консервативности схемы на криволинейных сетках, когда матрицы-коэффициенты \bar{B}^i , вообще говоря, зависят от координат, аппроксимация одномерных систем уравнений на шаге “корректор” производится с помощью интегро-интерполяционного метода. В результате интегрирования системы (3) по криволинейной ячейке в физической области с последующим применением формулы Грина получается следующее равенство:

$$A \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = \frac{1}{\omega} \sum_{k=1}^6 \gamma^k (n_1^k B^1 + n_2^k B^2 + n_3^k B^3) V^k + Q\bar{V} + \bar{G}, \quad (7)$$

в котором n_i – направляющие косинусы вектора внешней нормали, ω – объем ячейки, верхняя черта означает среднее интегральное значение по ячейке, а индекс k относится к граням ячейки, в частности, γ_k – площадь соответствующей грани. Далее сумма в правой части (7) разбивается на три пары слагаемых

по противоположным граням, каждая из которых отвечает аппроксимации производных по пространственным переменным в одномерных системах (6). Например, слагаемые, относящиеся к координатным поверхностям ξ_2, ξ_3 , дают аппроксимацию выражения $\bar{B}^1 \partial V / \partial \xi_1$.

Условия сопряжения (склейки) решения на поверхностях раздела, представляющие собой граничные условия для систем уравнений (6), формулируются как условия непрерывности вектора скорости и вектора напряжений на площадках – гранях ячеек, дополненные уравнениями на приходящих характеристиках. При реализации этих условий в подпрограммах склейки производится переход к более мелкой сетке, полученной пересечением сеток на сторонах поверхности раздела. После вычисления искомого значения решения на гранях мелкой сетки обратный переход к исходным сеткам осуществляется по методу осреднения.

На каждом узле кластера основной программой выполняются в принципе одни и те же вычисления, которые сводятся к взаимно согласованной поэтапной реализации метода расщепления по пространственным переменным с последующей корректировкой решения. Исключение составляют процессы, производящие, кроме того, склейку решений на внутренних границах. Условия склейки реализуются на каждом шаге по времени по следующему принципу. Процессы, обслуживающие соседние блоки, передают необходимую информацию одному из таких процессов, имеющему наименьший номер. Последний производит автономный расчет всей границы в целом и рассылает результаты в обратном направлении. Это происходит практически параллельно по всем блокам массива, незначительная задержка может возникать только из-за необходимости передачи данных исполняющим процессом для склейки решений на противоположной границе своего блока. Однако при этом все процессы, кроме исполняющих, находятся в состоянии ожидания.

Постпроцессор. Программа–постпроцессор выполняет прореживание файлов, содержащих результаты счета в контрольных точках, пробегая ячейки сетки в каждом блоке с заданным шагом. Такое прореживание необходимо, поскольку размер файлов может быть очень большим и для их транспортировки потребуется значительное время сетевого трафика. Графический вывод результатов осуществляется с помощью специальных программ, предназначенных для обычного персонального компьютера.

Результаты расчетов. С помощью описанного комплекса программ на кластере МВС–1000 ИВМ СО РАН в трехмерной постановке проведены расчеты взаимодействия ударных волн уплотнения (сигнотонов) в неоднородно разрыхленной сыпучей среде. Показано, что, распространяясь в рыхлой среде, плоские фронты сигнотонов (ударно–волновых переходов, меняющих знак деформации), вызванных действием периодической 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 головных сигнотонов в результате взаимодействия искривленных фронтов зарождается кумулятивный выплеск (характерная зона сжимающих напряжений), который со временем перемещается в поперечном направлении в сторону разрыхления.

Численное решение задачи кумулятивного взаимодействия сигнотонов в плоской геометрии приведено в [3]. Результаты трехмерных расчетов представлены на рис. 3. Изображена четверть прямоугольного блока, рассеченного двумя плоскостями симметрии вдоль вертикальной оси. Верхняя граница блока свободна от напряжений, нижняя является неотражающей поверхностью раздела. На боковых гранях действует равномерно распределенная импульсная нагрузка. Начальная деформация разрыхления среды вдоль горизонтальных осей считается линейной функцией относительно вертикальной координаты, возрастающей по направлению к верхней границе от нуля до 7%. Расчеты выполнены для плотного грунта, скорости продольных и поперечных волн в котором равны 1500 и 160 м/с, плотность – 1990 кг/м³, предел текучести – 15 МПа, угол внутреннего трения – 27°.

Время счета 75 шагов по времени на разностной сетке 50 × 50 × 50 ячеек при загрузке программы на 8 процессоров равно 12 минутам. Эффективность распараллеливания – отношение времени счета программы на одном узле кластера ко времени счета на n узлах, деленное на n , – равна примерно 90%.

На рис. 4 показаны результаты численного исследования волн напряжений, генерируемых периодическим источником возмущений на поверхности массива. Верхняя грань, за исключением зоны приложения импульсной нагрузки, считается свободной от напряжений. На нижней и боковых гранях поставлены неотражающие условия, которые соответствуют бесконечной протяженности массива и формулируются для одномерных систем (6). Массив составлен из двух слоев, разделенных выпуклой поверхностью. Верхний слой – плотный грунт, нижний – прочная порода со скоростями упругих волн 3500 и 1950 м/с, плотностью 2620 кг/м³, пределом текучести 150 МПа и углом внутреннего трения 60°. В расчетах область решения разбита на восемь криволинейных блоков. Вертикальные границы раздела введены фиктивно для упрощения анализа результатов с помощью графических программ. Из-за выпуклости разделяющей поверхности происходит фокусировка волн в нижнем слое, и напротив, отраженные волны в верхнем слое расфокусируются.

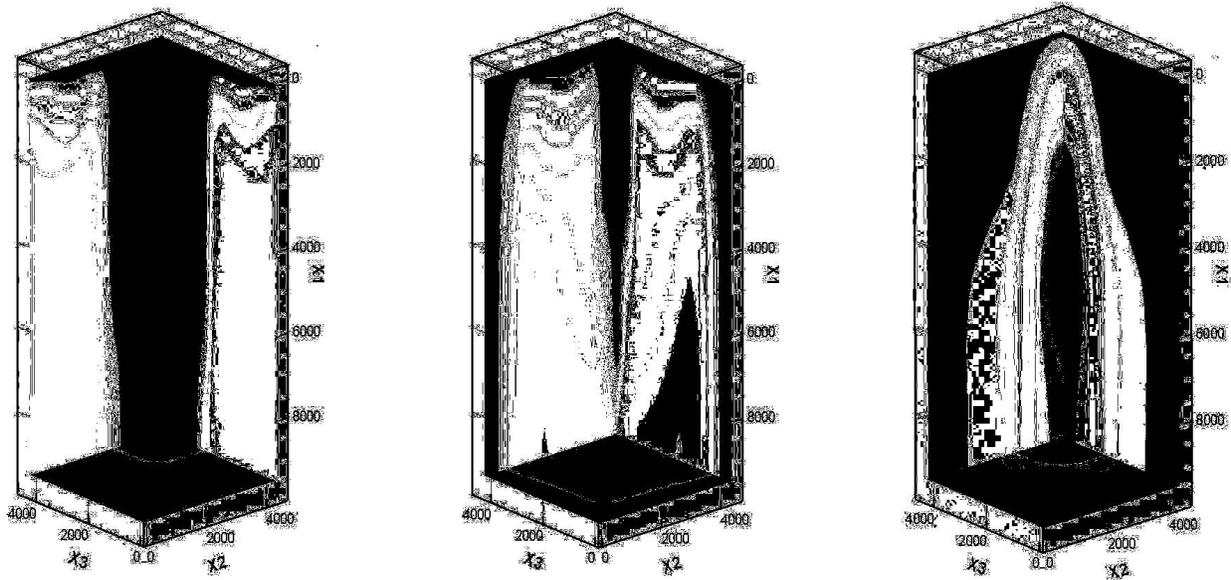


Рис. 3. Кумулятивное взаимодействие сигнотонов

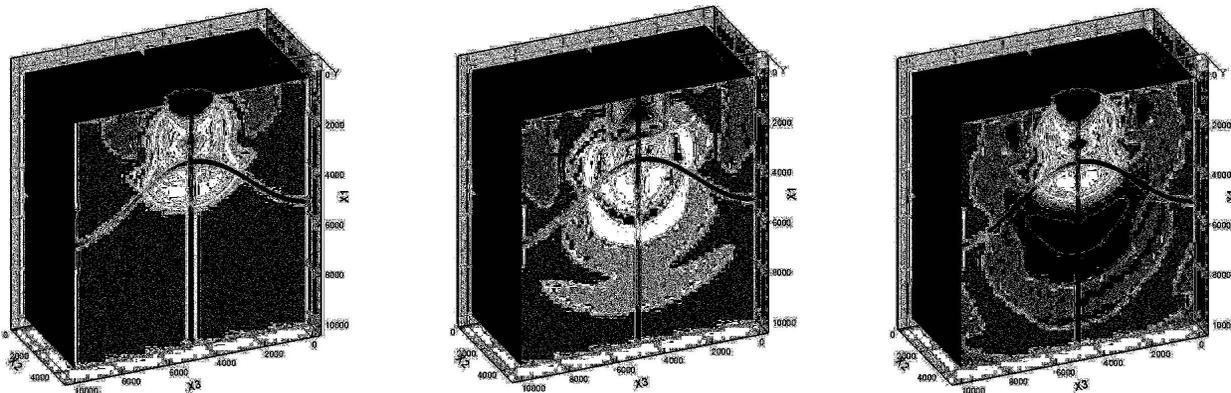


Рис. 4. Прохождение волн через выпуклую границу раздела разнородных слоев

Судя по проведенным расчетам, параллельные вычислительные системы обладают существенными преимуществами по сравнению с персональными компьютерами, если количество процессоров при загрузке задачи выбирается в разумном соответствии с размерностью пространственной сетки.

Список литературы

- [1] САДОВСКИЙ В.М. *К теории распространения упругопластических волн в сыпучих средах* / В.М. САДОВСКИЙ // Докл. АН. – 2002. – Т. 386, № 4. – С. 487-489.
- [2] САДОВСКАЯ О.В. *К исследованию упругопластических волн в сыпучей среде* / О.В.САДОВСКАЯ, В.М.САДОВСКИЙ // ПМТФ. – 2003. – Т. 44, № 5. – С. 168-176.
- [3] САДОВСКАЯ О.В. *Метод сквозного счета для исследования упругопластических волн в сыпучей среде* / О.В.САДОВСКАЯ // Ж. вычисл. математики и матем. физики. – 2004. – Т. 44, № 10. – С. 1909-1920.
- [4] МАРЧУК Г.И. *Методы расщепления* / Г.И. МАРЧУК. – М.: Наука, 1988. – 246 с.
- [5] КУЛИКОВСКИЙ А.Г. *Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений* / А.Г. КУЛИКОВСКИЙ, Н.В. ПОГОРЕЛОВ, А.Ю. СЕМЕНОВ. – М.: Физматлит, 2001. – 608 с.

**PARALLEL COMPUTATIONS IN SPATIAL PROBLEMS OF THE
DYNAMICS OF GRANULAR MATERIAL**

O.V. Sadovskaya, V.M. Sadovskii

Numerical algorithms and computing programs are worked out for the solution of spatial dynamic problems in the framework of nonlinear models of elastic-plastic material and granular material having different resistances to tension and compression. The method of decomposition onto physical processes which leads to the realization of the problem of elasticity theory on each time-step and the following stage of solution correction is applied. Verification of the programs is fulfilled with the help of one-dimensional tests – exact solutions of the problems of plane elastic-plastic waves propagation. On the basis of multiple-processor system MVS-1000 in spatial setting the computations of the interaction of packing shock waves in heterogeneously loosened granular material are carried out.