

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 519.62/.64  
№ госрегистрации 01201268796  
Инв. №

УТВЕРЖДЕН  
Протоколом заседания  
Ученого совета  
от 17.02.2015 № 3/2015

Председатель Ученого совета  
член-корреспондент РАН  
\_\_\_\_\_ В. В. Шайдуров  
" \_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г.

ОТЧЕТ О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

ПРОЕКТ № 18.2. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ И ГИДРОДИНАМИКИ НА  
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ПРОГРАММЫ  
ПРЕЗИДИУМА РАН № 18 «АЛГОРИТМЫ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ  
ДЛЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ СВЕРХВЫСОКОЙ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ».  
№ ГОС. РЕГИСТРАЦИИ 01201268796. СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ РАСКРЫТО В  
ДОПОЛНЕНИИ К ПЛАНУ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ РАБОТ ФГБУН  
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК НА 2014 ГОД (РАЗДЕЛ IV «ИНФОРМАТИКА И  
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ», ПОДРАЗДЕЛ 36. «СИСТЕМЫ  
АВТОМАТИЗАЦИИ, CALS-ТЕХНОЛОГИИ, МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И  
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СЛОЖНЫХ УПРАВЛЯЮЩИХ СИСТЕМ И  
ПРОЦЕССОВ» ПРОГРАММЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫХ АКАДЕМИЙ НАУК НА 2013-2020 ГОДЫ).

(итоговый)

Руководитель темы  
член-корреспондент РАН

\_\_\_\_\_ В. В. Шайдуров  
" \_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2015 г.

Красноярск 2015

## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководители темы: член-корреспондент РАН	_____	В.В. Шайдуров
	(подпись, дата)	
д.ф.-м.н.	_____	В.М. Садовский
	(подпись, дата)	
Исполнители: н.с., к.ф.-м.н.	_____	М.П. Варьгина
	(подпись, дата)	
ученый секретарь, к.ф.-м.н.	_____	А.В. Вяткин
	(подпись, дата)	
н. с., к.ф.-м.н.	_____	Л.В. Гилева
	(подпись, дата)	
н. с., к.ф.-м.н.	_____	Е.В. Дементьева
	(подпись, дата)	
зав. отделом, к.ф.-м.н.	_____	Е.Д. Каропова
	(подпись, дата)	
аспирант ИВМ СО РАН	_____	М.А. Похабова
	(подпись, дата)	
с. н. с., д.ф.-м.н.	_____	О.В. Садовская
	(подпись, дата)	
аспирант ИВМ СО РАН	_____	К.С. Свободина
	(подпись, дата)	
с. н. с., к.ф.-м.н.	_____	Г.И. Щепановская
	(подпись, дата)	
м.н.с.	_____	М.В. Якубович
	(подпись, дата)	
Нормоконтролер	_____	А.В. Вяткин
	(подпись, дата)	

## РЕФЕРАТ

Отчёт 25 с., 11 рис., 1 прил.

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, УРАВНЕНИЯ НАВЬЕ-СТОКСА, УПРУГОСТЬ, ПЛАСТИЧНОСТЬ, СЫПУЧАЯ СРЕДА, ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ, ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Проект направлен на разработку схем, использующих комбинацию метода траекторий и метода конечных элементов, что позволит уменьшить сложность построения дискретных аналогов на каждом временном слое. Разрабатываемые подходы к построению численных методов направлены на существенное улучшение свойств получаемых систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), допуская эффективные методы их решения.

Большое внимание в проекте уделено эффективной параллельной реализации получаемых алгоритмов с учетом современной гибридной архитектуры высокопроизводительных вычислительных систем. В частности, проект направлен на выработку эффективных решений с помощью технологий MPI, OpenMP и CUDA при их совместном использовании.

В результате выполнения НИР получены следующие результаты.

1. Разработан и реализован для вычислительных систем современной архитектуры параллельный алгоритм полу-лагранжевой аппроксимации по времени в задаче переноса субстанции.

2. Созданы эффективные вычислительные алгоритмы для решения уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа.

3. В среде Matlab разработана компьютерная программа, реализующая метод характеристик численного решения задачи Коши для гиперболической системы уравнений первого порядка общего вида относительно двух независимых переменных.

4. Разработаны вычислительные алгоритмы, моделирующие динамическое взаимодействие упругих блоков через тонкие податливые прослойки.

5. На основе метода Иванова конструирования разностных схем с заданными диссипативными свойствами построен алгоритм численного решения одномерных динамических задач для вязкоупругой среды Кельвина-Фойхта.

6. С помощью метода Иванова построена разностная схема типа предиктор–корректор для численного решения динамических задач в рамках теории упруго сжимаемой вязкопластической среды Шведова–Бингама.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
1 Разработан и реализован для вычислительных систем современной архитектуры параллельный алгоритм полу-лагранжевой аппроксимации по времени в задаче переноса субстанции.....	7
2 Созданы эффективные вычислительные алгоритмы для решения уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа.....	10
3 В среде Matlab разработана компьютерная программа, реализующая метод характеристик численного решения задачи Коши для гиперболической системы уравнений первого порядка общего вида относительно двух независимых переменных...	14
4 Разработаны вычислительные алгоритмы, моделирующие динамическое взаимодействие упругих блоков через тонкие податливые прослойки.....	15
5 На основе метода Иванова конструирования разностных схем с заданными диссипативными свойствами построен алгоритм численного решения одномерных динамических задач для вязкоупругой среды Кельвина-Фойхта.....	17
6 С помощью метода Иванова построена разностная схема типа предиктор–корректор для численного решения динамических задач в рамках теории упруго сжимаемой вязкопластической среды Шведова-Бингама.....	19
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	21
ПРИЛОЖЕНИЕ А.....	22

## ВВЕДЕНИЕ

Численное решение трехмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса для вязкого теплопроводного газа при различных скоростях является весьма актуальной задачей. В настоящее время существует большое число индустриальных пакетов прикладных программ, претендующих на решение задачи в общей постановке или некоторых частных задач. Однако используемые в таких пакетах численные методы зачастую не позволяют достигнуть требуемой точности. Например, практически все существующие пакеты используют схемы первого, реже второго порядка сходимости.

Проект направлен на разработку схем, использующих комбинацию метода траекторий и метода конечных элементов, что позволит в десятки раз уменьшить сложность построения дискретных аналогов на каждом временном слое. Разрабатываемые подходы к построению численных методов направлены на существенное улучшение свойств получаемых систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), допуская эффективные методы их решения.

Большое внимание в проекте уделено эффективной параллельной реализации получаемых алгоритмов с учетом современной гибридной архитектуры высокопроизводительных вычислительных систем. В частности, проект направлен на выработку эффективных решений для метода конечных элементов на неструктурированных сетках с помощью технологий MPI, OpenMP и CUDA при их совместном использовании.

В результате выполнения НИР получены следующие результаты.

1. Разработан и реализован для параллельных вычислительных систем современной архитектуры параллельный алгоритм полу-лагранжевой аппроксимации по времени в задаче переноса субстанции.

2. Созданы эффективные вычислительные алгоритмы для решения уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа.

3. В среде Matlab разработана компьютерная программа, реализующая метод характеристик численного решения задачи Коши для гиперболической системы уравнений первого порядка общего вида относительно двух независимых переменных.

4. Разработаны вычислительные алгоритмы, моделирующие динамическое взаимодействие упругих блоков через тонкие податливые прослойки.

5. На основе метода Иванова конструирования разностных схем с заданными диссипативными свойствами построен алгоритм численного решения одномерных динамических задач для вязкоупругой среды Кельвина-Фойхта.

6. С помощью метода Иванова построена разностная схема типа предиктор–корректор для численного решения динамических задач в рамках теории упруго сжимаемой вязкопластической среды Шведова–Бингама.

**1. Разработан и реализован для вычислительных систем современной архитектуры параллельный алгоритм полу-лагранжевой аппроксимации по времени в задаче переноса субстанции (А.В. Вяткин, А.А. Ефремов, Е.Д. Каропова).**

Для детального исследования возможностей эффективной параллельной реализации полу-лагранжевого подхода для современных высокопроизводительных архитектур разработанный алгоритм был применен для численного решения двумерного уравнения переноса. Проведено исследование и сравнение различных вариантов параллельных реализаций алгоритма для многоядерных вычислительных систем (на основе технологии OpenMP) и архитектур, включающих графические процессоры (GPU) NVIDIA TESLA (на основе технологии CUDA).

В результате применения к аппроксимации субстанциональных производных предлагаемого полу-лагранжевого подхода получаются алгоритмы, не зависящие по данным и, следовательно, обладающие хорошим потенциальным параллелизмом: а) алгоритм является явным по времени; б) большинство вычислений по пространству можно проводить независимо для каждого узла сетки или каждого элемента триангуляции. Основным узким местом рассмотренных алгоритмов является необходимость вычисления интеграла по многоугольнику, произвольно расположенному относительно сетки предыдущего слоя по времени. Разбиение многоугольника на треугольники и анализ взаимного расположения треугольных элементов относительно вычислительной сетки содержит большое количество ветвлений и глубокую вложенность функций. Это не является принципиальным при проведении расчетов на CPU, однако становится существенным аппаратным ограничением при расчетах на GPU.

Для OpenMP-версии алгоритма проведено исследование влияния технологии HyperThreading, зависимости ускорения от размерности задачи и количества используемых потоков (рис. 1). Анализ результатов показал следующие особенности: а) невелики накладные расходы, связанные с синхронизацией в OpenMP-версии; б) для получения максимального ускорения OpenMP-версии выгодно использовать технологию HyperThreading (HT) с загрузкой максимально возможного количества логических ядер; в) использование оптимизации компилятора существенно (больше, чем в 2 раза) уменьшает время работы последовательной программы.

При применении технологии CUDA следует обратить внимание на аппаратные ограничения по памяти, а также на влияние архитектуры GPU на точность вычислений.

*Ограничение объема доступной вычислителю памяти, с одной стороны, является просто ограничением на размер решаемой задачи. А с другой стороны, может приводить к*

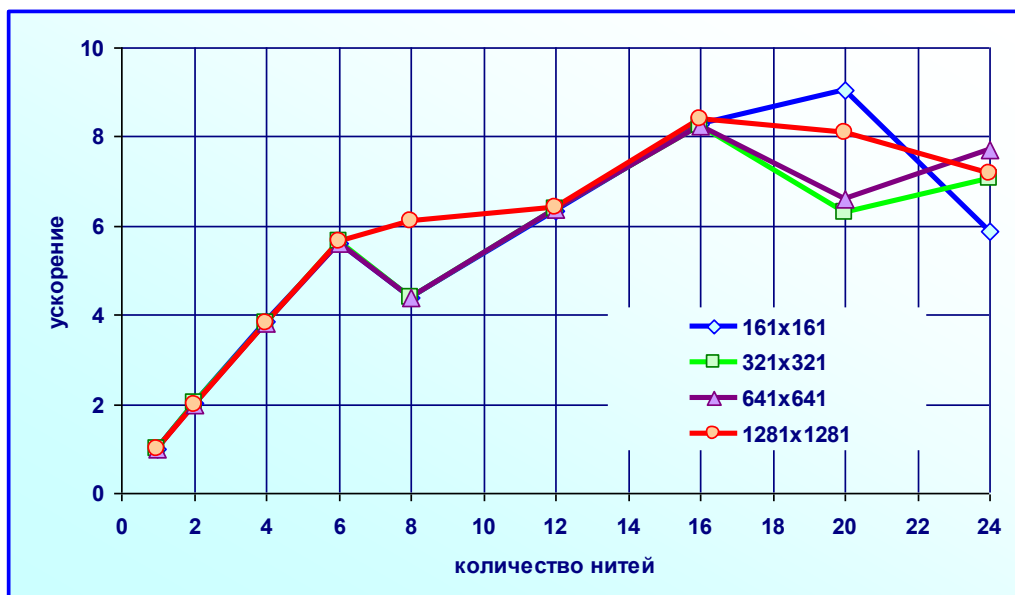


Рис. 1. Ускорение OpenMP-версии

в зависимости от количества нитей для различных размерностей сетки по пространству.

Компилятор Intel C++. Технология HyperThreading включена.

значительному обвалу производительности параллельной программы и даже к невозможности ее выполнения.

1. В нашем случае на CPU доступно 48 Гб оперативной памяти, тогда как на GPU – только 3 Гб. Следовательно, максимальная размерность задачи, которую мы можем решать с использованием GPU, в 16 раз меньше чем для CPU. Одним из способов борьбы с ограничением по памяти является замена хранения всех вычисляемых данных их непосредственным (возможно многократным) расчетом по требованию (in-place computation).

2. Потребность в большом объеме регистровой памяти резко уменьшает производительность программы, поскольку в качестве регистров GPU начинает использовать медленную глобальную память (spilling). В этой ситуации можно использовать опции компилятора nvcc для задания оптимального числа регистров, доступных каждой нити. Понятно, что необоснованное увеличение размера регистровой памяти нити приведет к уменьшению количества одновременно исполняемых нитей, что, в свою очередь, отрицательно повлияет на производительность.

3. Проблемой при использовании GPU также является вложенность функций. Глубина вложенности функций ограничивается доступным программе размером стека. Для архитектуры CPU это практически не является ограничением. Например, для ОС Ubuntu по умолчанию доступно 8192 КБ памяти для размещения данных стека, а верхний предел равен объему доступной оперативной памяти CPU. Стек программы при ее запуске



на GPU сильно ограничен. Причем из-за сложной иерархии памяти ограничения связаны с регистровой, константной и глобальной памятью GPU. При запуске вычислительного ядра CUDA на вычислительной сетке большой размерности и при наличии глубокой вложенности функций возникает исключение типа «OutOfResources».

Принимая во внимание возникающие проблемы, с целью оптимизации параллельного алгоритма выделены отдельные этапы последовательного алгоритма, которые можно считать в двух независимых ядрах CUDA: 1) расчет координат области интегрирования на предыдущем временном слое; 2) интегрирование по найденной области (многоугольнику). В ходе вычислительного эксперимента в первом ядре CUDA на вычислительной сетке с числом элементов порядка  $26 \times 10^6$  было достигнуто ускорение в 61 раз. Более того, после оптимизации размеров регистровой памяти нити ускорение первого ядра CUDA по сравнению с последовательной версией выросло в 80 раз. Однако от этой версии программы пришлось отказаться. При предварительном вычислении координат необходимо хранить значения искомым функций в узлах сеток на предыдущем и текущем слоях по времени, что значительно увеличивает объем необходимой памяти при выполнении второго ядра CUDA. В результате происходит спиллинг регистров в глобальную память, что значительно увеличивает время выполнения второго ядра CUDA и сводит к минимуму ускорение, полученное на первом ядре CUDA.

На рис. 2 представлено ускорение лучших OpenMP- и CUDA-версий по сравнению с лучшей последовательной версией программы.

*Влияние аппаратной архитектуры GPU на точность вычислений.* Следует отметить еще одну проблему, связанную с верификацией параллельной программы, использующей технологию CUDA. Несмотря на то, что CPU и GPU поддерживают стандарт IEEE754 вычислений с двойной точностью, непосредственное сравнение поточечных результатов расчетов на CPU и GPU показало несовпадение соответствующих значений в 12-ом знаке после запятой. Разница значений, рассчитанных в последовательной и параллельной программах, не связана с принципами распараллеливания или ошибками реализации. Основная проблема состоит в том, что NVIDIA TESLA поддерживает операции FMA (Fused Multiply-Add). Совмещение умножения и сложения в одной операции дает только одно округление на две операции, тогда как CPU, не поддерживающее FMA, в аналогичных случаях округляет два раза. Следует отметить и другие возможные пути появления разницы в расчетах с плавающей запятой: 1) изменение порядка выполнения некоммутативных операций при параллельном выполнении; 2) неодинаковое округление в библиотечных трансцендентных математических функциях (например, при использовании функции  $\cos(x)$  стандартной

библиотеки `glibc math` при компиляции компилятором `gcc` с ключами `-m32` и `-m64` даст разные значения).

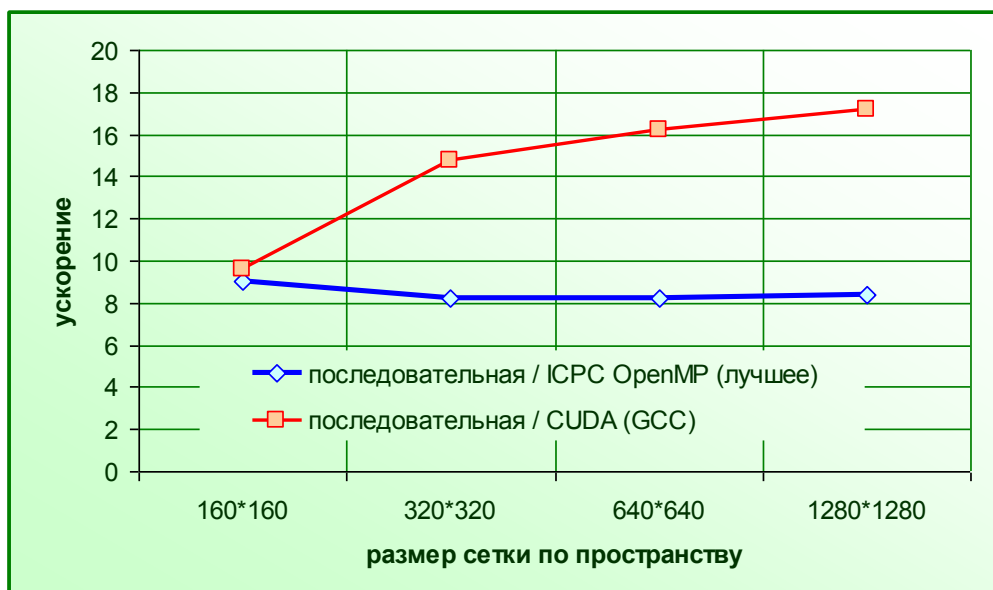


Рис. 2. Ускорение параллельных версий программ в зависимости от размерности сетки по пространству.

Теоретически использование графических ускорителей общего назначения для ускорения расчетов позволяет достичь значительного прироста производительности вычислений. Тем не менее, особенности аппаратной архитектуры GPU нередко служат причиной обратного явления. При попытке использования GPU для научных и практических расчетов вычислитель может столкнуться с минимальным или даже отрицательным ускорением. Более того, при детальном сравнении наблюдаются расхождения полученных результатов расчетов на GPU и CPU, не связанные с принципами распараллеливания или ошибками реализации. В результате требуется тщательный анализ потенциального параллелизма алгоритма и кропотливое сравнение результатов вычислений последовательной и параллельной программы для подтверждения корректности и эффективности распараллеливания.

**2. Созданы эффективные вычислительные алгоритмы для решения уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа (В.В. Шайдуров, А.В. Вяткин, Г.И. Щепановская, М.В. Якубович).**

Использование для расчетов высокопроизводительных вычислительных систем и более эффективных численных алгоритмов позволяет осуществить расчеты обтекания тел на основе полных уравнений Навье-Стокса. Численное решение уравнений Навье-Стокса и сегодня представляет большие трудности, что обусловлено нелинейностью исходных

уравнений, наличием областей больших градиентов и других особенностей, возникающих при определённых параметрах и режимах газодинамических течений, что вызывает необходимость разработки и создания специальных численных методов решения этих уравнений. Хотя к настоящему времени разработано много численных алгоритмов и специальных комплексов программ, проблема создания и применения эффективных численных методов и алгоритмов остается актуальной.

Предлагается численный алгоритм решения начально-краевой задачи для уравнений Навье-Стокса. Для аппроксимации субстанциональной производной по времени в каждом уравнении системы используется полу-лагранжевый метод (метод траекторий), который заключается в аппроксимации этой производной с помощью разностной производной назад по времени вдоль траектории движения частицы. Дискретизация по пространству остальных слагаемых уравнений Навье-Стокса на каждом временном слое осуществляется методом конечных элементов с кусочно-билинейными базисными функциями и применением простых квадратурных формул. Для решения систем алгебраических уравнений используется метод Якоби с улучшенным начальным приближением внутри внешних итераций по нелинейности.

В результате созданы и реализованы вычислительные алгоритмы для решения двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа на высокопроизводительных вычислительных комплексах.

*Реализованы вычислительные алгоритмы для решения задачи течения газа в канале с уступом.* Проведены вычислительные эксперименты, подтвердившие теоретические выводы и оценки. Полученная схема численного решения действительно пригодна для широкой области чисел Маха и Рейнольдса без традиционных ограничений на шаг сетки по времени, а получаемые вычислительные результаты хорошо соответствуют экспериментальным представлениям.

Численная реализация построенных алгоритмов осуществлена для высокопроизводительных вычислительных кластеров. На рис. 3 приведены траектории частиц газа в сверхзвуковом течении вязкого теплопроводного газа в плоском канале с прямоугольным уступом для различных моментов времени.

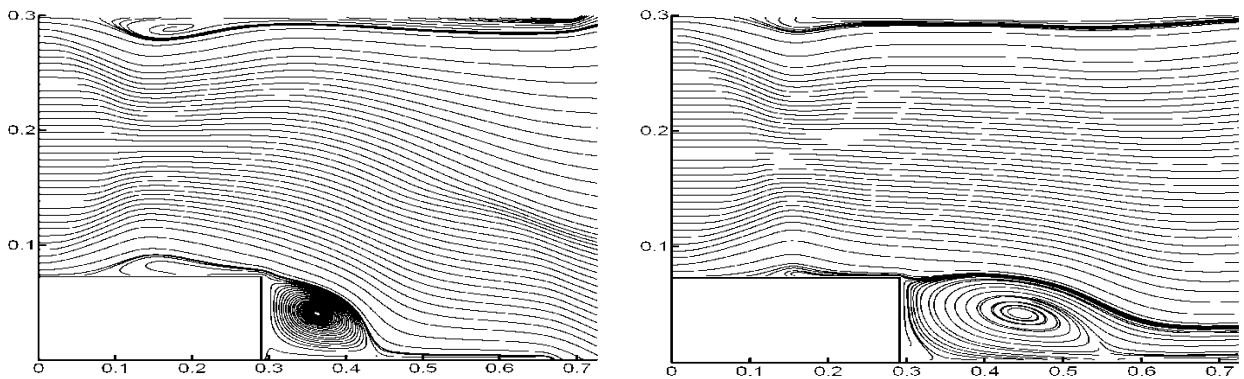


Рис. 3. Траектории частиц газа для параметров  $M = 2$ ,  $Re = 2000$   
в моменты времени  $t = 0.9$  (слева) и  $t = 1.5$  (справа)

*Сверхзвуковое обтекание клина в двумерном канале вязким теплопроводным газом.*  
Для численного моделирования течения газа использовалась система уравнений Навье-Стокса для вязкого теплопроводного газа. Для аппроксимации уравнений вновь применена комбинация полу-лагранжевой аппроксимации слагаемых движения и метода конечных элементов для слагаемых энергетического обмена. Это дало возможность реализовать стандартный конформный метод конечных элементов без искусственных приемов, нарушающих его обоснование или физические свойства его аппроксимации. В итоге разработан эффективный устойчивый численный метод с улучшенными свойствами участвующих матриц и без традиционного ограничения Куранта на шаг по времени.

В качестве тестовой задачи рассмотрено сверхзвуковое обтекание клина в двумерном канале вязким теплопроводным газом. Применение нового метода не требует согласования триангуляций на соседних временных слоях. Это значительно облегчает динамическое разрежение или сгущение триангуляций по пространству для оптимизации вычислительной работы или улучшения аппроксимации в пограничных слоях и ударных волнах. Для решения систем алгебраических уравнений ввиду значительного диагонального преобладания использовался метод Якоби в комбинации с внешними итерациями по нелинейности. Созданный метод реализован для высокопроизводительных вычислительных систем. Полученный пакет программ позволяет проводить численные эксперименты в широком диапазоне чисел Маха и Рейнольдса.

На рис. 4 показано распределение плотности газа в канале. Числа Маха и Рейнольдса равны соответственно  $M = 4$  и  $Re = 400$ . (В.В. Шайдуров, Г.И. Щепановская, М.В. Якубович).

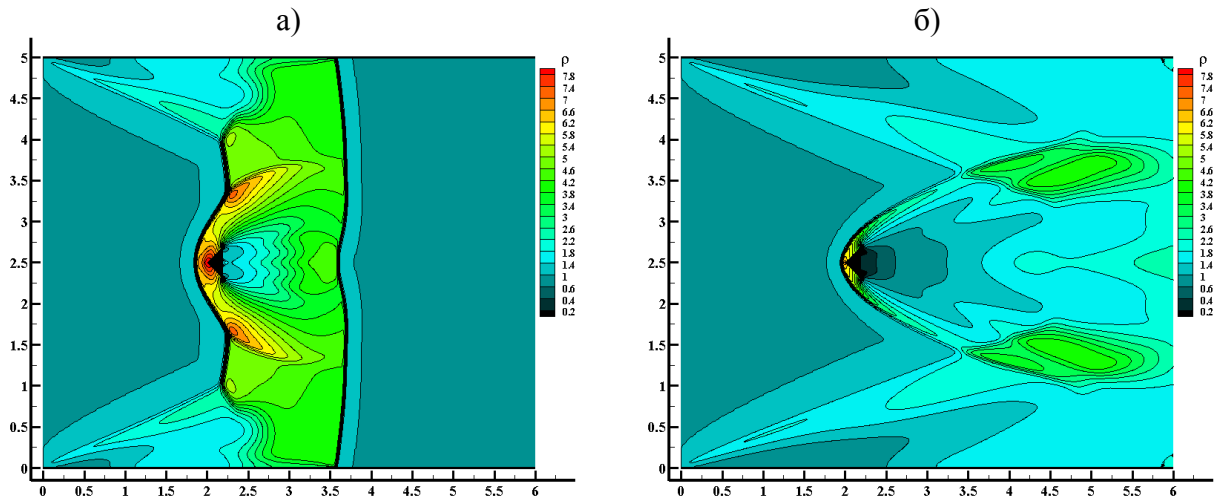


Рис. 4. Распределение плотности газа при сверхзвуковом обтекании клина в плоском канале.

а) соответствует времени  $t = 6.0$ , а б)  $t = 20.0$ .

*Свободное сверхзвуковое обтекание клиновидного профиля.* Созданный комплекс программ позволяет реализовать задачу сверхзвукового обтекания клиновидного профиля вязким теплопроводным газом на высокопроизводительных вычислительных системах. Расчеты выполнялись на прямоугольной сетке, содержащей  $301 \times 401$  узлов, шаги по пространству  $h_x = 0.01$ ,  $h_y = 0.005$  шаг по времени  $\tau = 0.0005$ . Угол раствора клина  $\beta \approx 53,1^\circ$ .

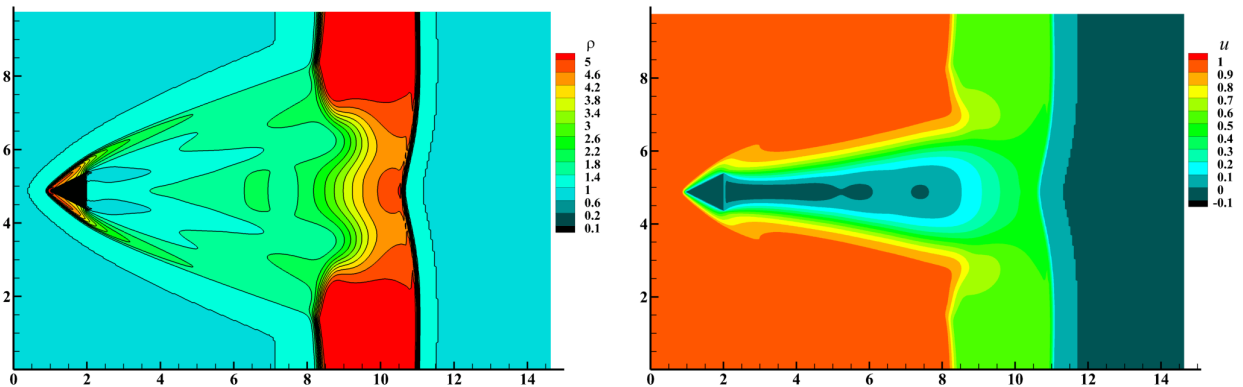


Рис. 5. Распределение плотности и горизонтальной скорости.

На рис. 5 приведены расчеты для случая сверхзвукового обтекания клиновидного профиля под нулевым углом атаки, когда вектор скорости набегающего потока направлен вдоль оси клина. В данном случае число Маха  $M = 4$  и число Рейнольдса  $Re = 2 \times 10^3$ . Распределения плотности и продольной скорости нанесены для момента времени  $t = 4.25$ . Картина течения в рассматриваемой области соответствует имеющимся

экспериментальным представлениям. На рисунках для распределения плотности и продольной скорости справа видим характерные пульсации донного течения за клиновидным профилем.

Как следует из тестовых расчетов, применение комбинации полу-лагранжевой аппроксимации и метода конечных элементов позволяет построить алгоритм, довольно эффективный с вычислительной точки зрения. С помощью комплекса программ определяется полная картина течения во всей исследуемой области около клиновидного профиля для широкого диапазона чисел Маха и Рейнольдса.

**3. В среде Matlab разработана компьютерная программа, реализующая метод характеристик численного решения задачи Коши для гиперболической системы уравнений первого порядка общего вида относительно двух независимых переменных (М.М. Клунникова, О.В. Садовская, В.М. Садовский).**

Для систем с двумя характеристиками используется разностная схема прямого характеристического метода, в которой сетка узлов на новом слое в направлении гиперболичности строится пересечением характеристик, выпущенных из узлов предыдущего слоя. В случае трех и более характеристик применяется гибридная схема прямого и обратного характеристического метода. С помощью разработанной программы проведены методические расчеты плоской задачи теории идеальной пластичности (задачи Генки), задачи статики сыпучей среды (задачи Соколовского) и осесимметричной задачи полной пластичности (задачи Ишлинского, рис. 7).

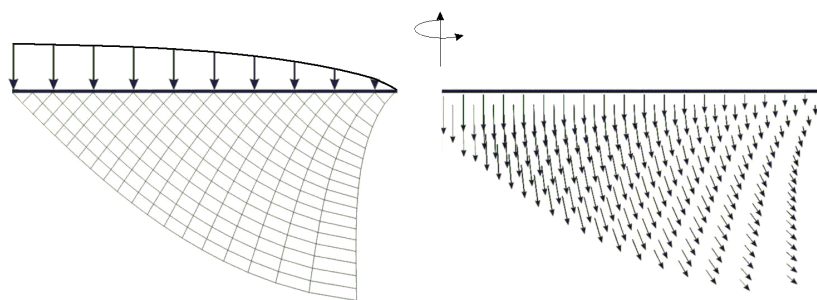


Рис. 7. Сетка линий скольжения и поле скоростей в задаче Ишлинского о действии вращающегося штампа на жесткопластическое полупространство (осевая симметрия)

Компьютерная программа ориентирована на применение при решении широкого спектра задач механики и физики, в частности, задач моделирования деформации и разрушения горных пород вблизи естественных геологических разломов и техногенных выработок.

#### **4. Разработаны вычислительные алгоритмы, моделирующие динамическое взаимодействие упругих блоков через тонкие податливые прослойки (М.П. Варыгина, М.А. Похабова, О.В. Садовская, В.М. Садовский).**

Численное решение задачи в одномерной постановке строится на основе схемы распада разрыва Годунова на равномерной сетке с выбором предельно допустимого по условию Куранта–Фридрихса–Леви шага по времени. При меньших значениях шага используется кусочно-линейная ENO–реконструкция второго порядка точности. Граничные условия контактного взаимодействия блоков через прослойки, которые формулируются в виде систем обыкновенных дифференциальных уравнений, реализованы на основе разностной схемы Иванова с контролируемой искусственной (схемной) диссипацией энергии. Для решения двумерных задач применяется метод двуциклического расщепления, приводящий к решению серии одномерных задач. Выполнено распараллеливание алгоритмов для вычислительных систем на графических ускорителях по технологии CUDA и для кластерных систем на основе MPI–технологии.

Модель блочной среды с податливыми прослойками может служить для расчета деформационных и прочностных характеристик кирпичной кладки. С ее помощью моделируются волновые процессы в грунтах и горных породах, имеющих слоистое или блочное строение. К исследованию таких процессов применяются разные приближения модели, в частности, приближение абсолютно жестких блоков и упругих прослоек. В более простом варианте блочная среда заменяется дискретной решеткой, в которой размеры блоков не играют роли. Рассматриваемая модель в точной постановке учитывает упругие свойства блоков и прослоек, поэтому она более адекватно описывает реальные процессы, но из-за большой размерности требует применения высокопроизводительных вычислений. За счет распараллеливания алгоритма и многократного расширения оперативной памяти компьютера появляется возможность решения задач сверхвысокой размерности, возникающих при анализе динамики блочных сред. Исследование эффективности параллельной реализации алгоритма для систем на графических ускорителях показало ускорение работы программы до 50 раз по сравнению с однопроцессорной версией, для кластерных систем ускорение достигает 90 %.

С помощью созданных программ решались одномерные и двумерные задачи о распространении волн, вызванных кратковременными и длительными импульсными воздействиями на границе блочной среды. В двумерной постановке к описанию процессов распространения волн напряжений и деформаций в многоблочной среде применена математическая модель моментного континуума Коссера, в которой наряду с поступательными степенями свободы учитываются независимые вращения блоков, но

блочная структура среды описывается на осредненном уровне. Из сопоставления скоростей распространения упругих волн и коэффициентов упругого сопротивления среды вращению и кручению блоков получены формулы для пересчета феноменологических параметров моментного континуума по заданным характеристикам материалов блоков и межблочных прослоек. Разработаны специальные алгоритмы и компьютерные программы, реализующие модель Коссера на многопроцессорных вычислительных системах кластерного типа.

Для задачи Лэмба о мгновенном действии сосредоточенной силы на поверхности массива блочной среды с упругими прослойками проводилось сравнение численных решений, полученных на основе осредненных уравнений в межблочных прослойках и в рамках полной постановки, в которой прослойки моделировались с помощью уравнений плоской теории упругости с условиями склейки на границах раздела. Расчеты показали (рис. 8), что из-за наличия податливых прослоек кроме падающих волн (продольных и поперечных), конических поперечных волн и поверхностных волн, распространяющихся со временем по всей области, возникает серия волн, отраженных от границ раздела, и серия поверхностных волн, образующихся при выходе отраженных волн на границу полуплоскости.

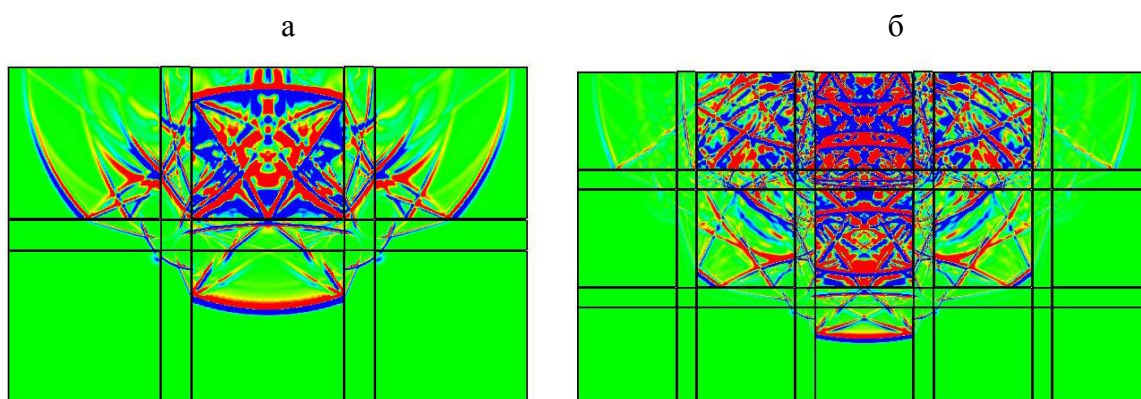


Рис. 8. Волновые картины в задаче Лэмба для блочной среды с упругими прослойками: линии уровня нормального напряжения; а – массив из 6 блоков, б – массив из 15 блоков

Расчеты в полной постановке были выполнены по программе 2Dyn\_Granular на многопроцессорном кластере МВС–100К Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН. Сравнение показало хорошее соответствие результатов, но при этом расчеты на кластере с применением MPI из-за большой размерности разностной сетки в прослойках потребовали на порядок большего времени, чем расчеты по упрощенной модели на GPU с применением технологии CUDA.



Задача об импульсном воздействии на блочную упругую среду решалась на основе двумерных и пространственных уравнений моментного континуума Коссера с помощью программ 2Dyn\_Cosserat и 3Dyn\_Cosserat, зарегистрированных в Роспатенте. Были обнаружены специфические низкочастотные маятниковые волны, вызванные не поступательным перемещением, а вращением блоков. Установлено, что осредненная модель и модель моментного континуума Коссера дают качественно близкие волновые картины, если толщина прослоек много меньше характерного размера блоков.

Получено пространственно одномерное точное решение задачи о сдвиговом деформировании слоя вязкоупругой моментной среды под действием периодического изменения скорости на границе. Анализ амплитудно-частотных характеристик выявил наличие резонансного пика касательного напряжения на частоте собственных колебаний вращательного движения блоков, не зависящей от толщины слоя. В серии расчетов трехмерной задачи для массива моментной среды показано, что при периодическом изменении локализованного вращательного момента на границе на частоте собственных колебаний происходит резонансное возбуждение среды, которое проявляется в увеличении амплитуды угловой скорости и меньшем ослаблении волны по мере ее распространения вглубь массива по сравнению с нерезонансными частотами (рис. 9).

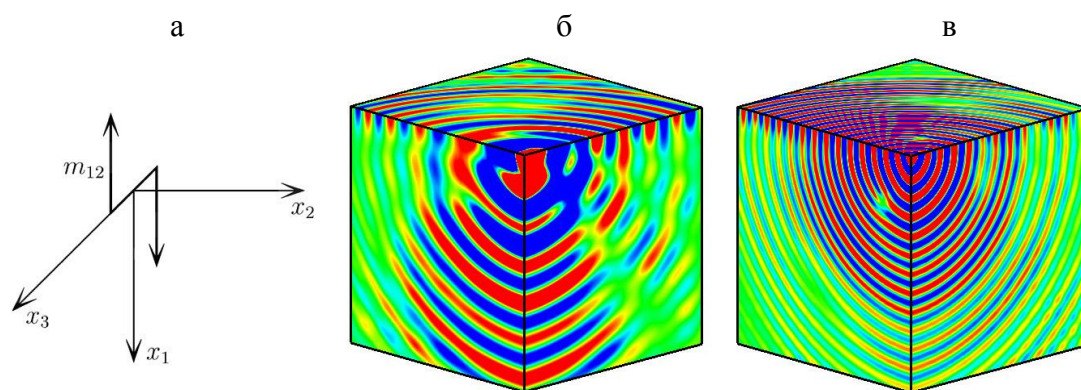


Рис. 9. Пространственная задача о периодическом действии сосредоточенного вращательного момента: схема нагружения (а) и поверхности уровня угловой скорости для резонансной (б) и нерезонансной (в) частот

**5. На основе метода Иванова конструирования разностных схем с заданными диссипативными свойствами построен алгоритм численного решения одномерных динамических задач для вязкоупругой среды Кельвина-Фойхта. При решении двумерных задач применен метод суммарной аппроксимации с расщеплением системы по пространственным переменным (О.В. Садовская, В.М. Садовский).**

Математическая модель Кельвина–Фойхта представляет собой систему дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. Она описывает гели – пористые упругие скелеты, заполненные вязкой жидкостью, и применяется к анализу напряженно-деформированного состояния геоматериалов (влагонасыщенных грунтов, трещиноватых горных пород).

На основе одномерной модели проведены методические расчеты распространения волн сильного разрыва в вязкоупругом полупространстве, на границе которого действует внешняя нагрузка в виде короткого импульса. Для сравнения выполнены расчеты с помощью немонотонной схемы второго порядка точности, которая строится на разнесенных сетках по принципу схемы Неймана–Рихтмайера. Сравнение показало, что схема с контролируемой диссипацией монотонна – не дает паразитных осцилляций за фронтом падающей волны и волны разгрузки, характерных для схемы на разнесенных сетках. Результаты расчетов в сопоставлении с точным решением, описывающим одномерные движения с плоскими монохроматическими волнами, показали высокую точность и эффективность метода. Тестирование алгоритма решения двумерных задач выполнено на точном решении задачи о бегущих поверхностных волнах (рис. 10).

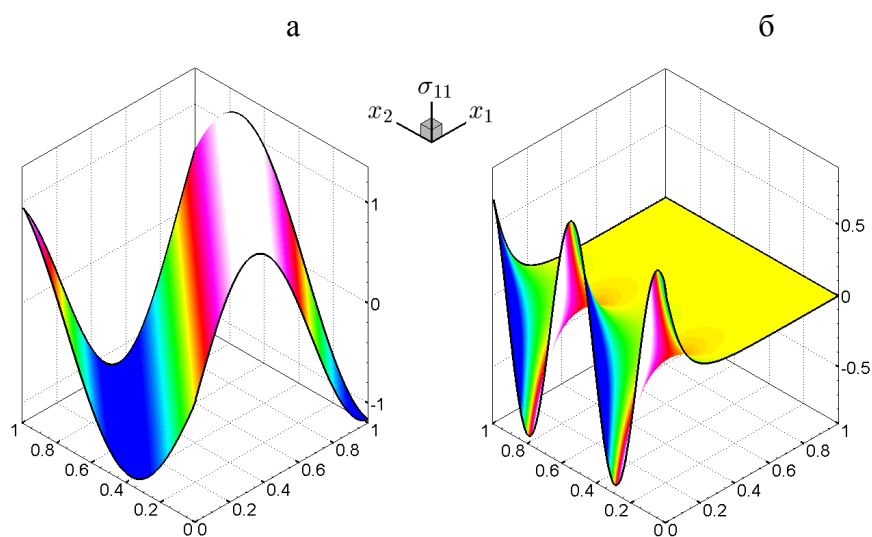


Рис. 10. Поверхность нормального напряжения  $\sigma_{11}$  в задаче о бегущей поверхностной волне: сверхзвуковая волна со скоростью  $c = 1.5c_1$  (а), дозвуковая волна со скоростью  $c = c_1/2$  (б)

Для иллюстрации работоспособности метода, алгоритма и программы на рис. 11 представлено численное решение задачи Лэмба о мгновенном действии сосредоточенной силы на границе полуплоскости в вязкоупругой постановке. Расчеты показали, что используемая разностная схема хорошо приспособлена к расчету решений с ударными

волнами, вызванными импульсными и сосредоточенными воздействиями. Развиваемый метод конкурентоспособен в сравнении с широко распространенными при решении задач вязкоупругости методами, основанными на интегральных преобразованиях по времени, и, в отличие от этих методов, допускает обобщение на физически и геометрически нелинейные задачи.

**6. С помощью метода Иванова построена разностная схема типа предиктор–корректор для численного решения динамических задач в рамках теории упруго сжимаемой вязкопластической среды Шведова-Бингама (О.В. Садовская, В.М. Садовский, К.С. Свободина).**

Такая теория применима к анализу интенсивного пластического течения и высокоскоростного деформирования среды под действием импульсных нагрузок при малом уровне упругого формоизменения. Она приводит к термодинамически корректной системе определяющих уравнений, более обоснованной по сравнению с используемой в инженерных расчетах, связанных с проектированием элементов защиты, широко известной системой Уилкинса.

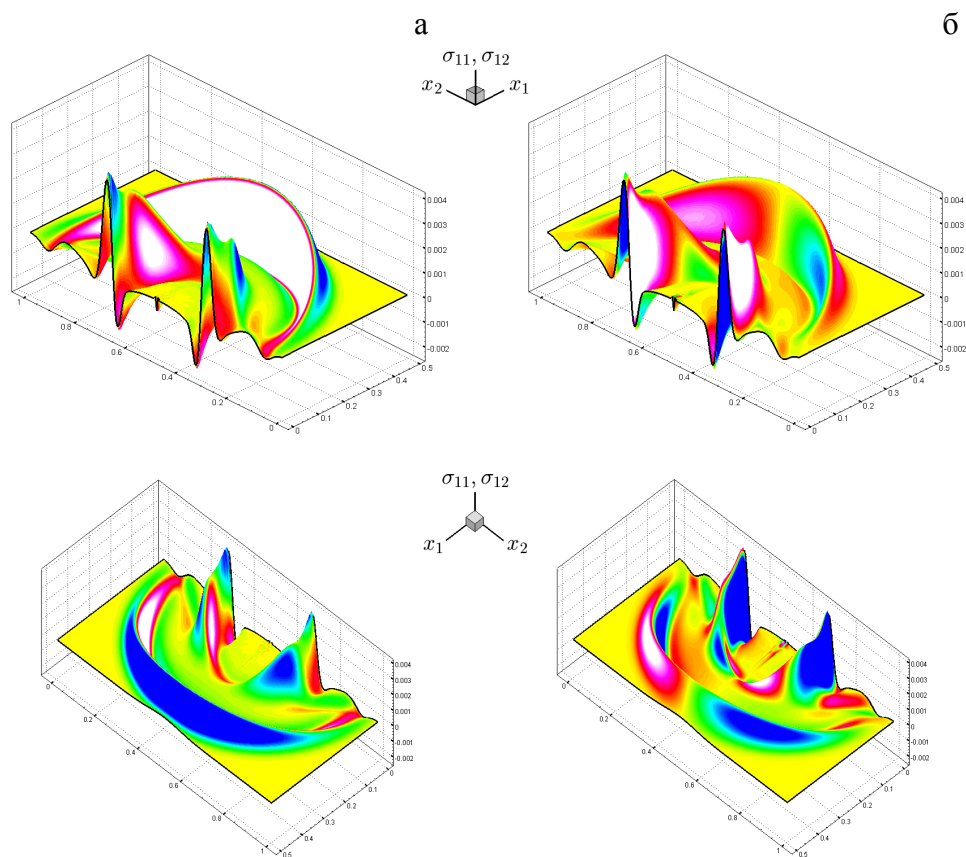


Рис. 11. Поверхности нормального напряжения  $\sigma_{11}$  (а) и касательного напряжения  $\sigma_{12}$  (б) в задаче Лэмба

Разработан экономичный алгоритм численной реализации геометрически линейного приближения модели, который может быть обобщен на нелинейный случай. На шаге предиктор этот алгоритм реализуется на основе неявной схемы. На шаге корректор он явный, что позволяет обоснованно применять не требующие итерационного пересчета процедуры корректировки решения для учета необратимых пластических деформаций среды, разного сопротивления материала растяжению и сжатию, и других нелинейных эффектов деформирования и разрушения. При решении двумерных и трехмерных задач применяется метод расщепления по пространственным переменным. Полученные в результате расщепления одномерные системы уравнений решаются методом расщепления по физическим процессам.

В плоской постановке решалась задача о прохождении пластической ударной волны, имеющая точное решение. Анализ результатов расчетов показал, что полученная численная схема обладает сглаживающими свойствами, характерными для схем первого порядка точности, и дает хорошее приближение точному решению по скорости и амплитуде волны.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения проекта получены следующие результаты.

1. Разработан и реализован для вычислительных систем современной архитектуры параллельный алгоритм полу-лагранжевой аппроксимации по времени в задаче переноса субстанции. Проведен анализ производительности, ускорения и эффективности параллельных реализаций алгоритма для технологий OpenMP и CUDA.

2. Созданы эффективные вычислительные алгоритмы для решения уравнений Навье-Стокса вязкого теплопроводного газа на базе комбинации метода траекторий и метода конечных элементов. Построенные алгоритмы не требуют согласования триангуляций на соседних временных слоях. Это значительно облегчает динамическое разрежение или сгущение триангуляции по времени для оптимизации вычислительной работы или улучшения аппроксимации в пограничных слоях и ударных волнах. Особое внимание в проекте уделено выводу соотношений на границе расчетной области, что является важной составляющей в реализации метода конечных элементов. На примере задачи обтекания клиновидного профиля сверхзвуковым потоком вязкого теплопроводного газа исследованы «неотражающие» условия на границе расчетной области, что позволяет осуществлять расчеты до установления течения в режиме реального времени. Все перечисленное позволило создать вычислительно устойчивый и экономичный алгоритм, реализованный в виде комплекса программ на высокопроизводительных вычислительных системах.

3. В среде Matlab разработана компьютерная программа, реализующая метод характеристик численного решения задачи Коши для гиперболической системы уравнений первого порядка общего вида относительно двух независимых переменных.

4. Разработаны вычислительные алгоритмы, моделирующие динамическое взаимодействие упругих блоков через тонкие податливые прослойки.

5. На основе метода Иванова конструирования разностных схем с заданными диссипативными свойствами построен алгоритм численного решения одномерных динамических задач для вязкоупругой среды Кельвина-Фойхта.

6. С помощью метода Иванова построена разностная схема типа предиктор–корректор для численного решения динамических задач в рамках теории упруго сжимаемой вязкопластической среды Шведова–Бингама.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### Публикации

1. Sadovskaya O., Sadovskii V. *Mathematical Modeling in Mechanics of Granular Materials*. Series: *Advanced Structured Materials*. V. 21. Springer: Heidelberg - New York - Dordrecht - London, 2012. 390 p.
2. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V. Modeling of elastic waves in a blocky medium based on equations of the Cosserat continuum // *Wave Motion*. 2014. 13p. (in press, available online). <http://dx.doi.org/10.1016/j.wavemoti.2014.09.008>
3. Annin B.D., Klunnikova M.M., Sadovskaya O.V., Sadovskii V.M. The method of characteristics in ideal plasticity problems // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 2012. V. 76, Iss. 5. P. 497-505.
4. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V. Parallel Program Systems for Modeling Elastic-Plastic Waves in Structurally Inhomogeneous Materials // *Numerical Analysis and Applied Mathematics*. Series: *AIP Conference Proceedings*. 2012. V. 1479. P. 1611-1614.
5. Sadovskaya O. Parallel Program Systems for Problems of the Dynamics of Elastic-Plastic and Granular Media // *Lecture Notes in Computer Science*. V. 8236. Springer: Berlin - Heidelberg, 2013. P. 471-478.
6. Sadovskii V. On Thermodynamically Consistent Formulations of Dynamic Models of Deformable Media and Their Numerical Implementation // *Lecture Notes in Computer Science*. V. 8236. Springer: Berlin - Heidelberg, 2013. P. 479-486.
7. Varygina M. Numerical Solution of Dynamic Problems in Block Media with Thin Interlayers on Supercomputers with GPUs // *Lecture Notes in Computer Science*. V. 8236. Springer: Berlin - Heidelberg, 2013. P. 517-523.
8. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V. Phenomenological modeling of deformation of porous and cellular materials taking into account the increase in stiffness because of the collapse of pores // *COMPADYN 2013: 4th International Conference on Computational Methods in Structural Dynamics and Earthquake Engineering, Proceedings* (Eds.: M. Papadrakakis, V. Papadopoulos, V. Plevris, Date: 12 - 14 June 2013, Location: Kos Island, Greece). National Technical University of Athens, 2013. P. 4277-4286.
9. Sadovskaya O.V., Sadovskii V.M., Varygina M.P. Computational modeling of the waves propagation in a block medium with viscoelastic interlayers // *COMPADYN 2013: 4th International Conference on Computational Methods in Structural Dynamics and Earthquake Engineering, Proceedings* (Eds.: M. Papadrakakis, V. Papadopoulos, V. Plevris, Date: 12 - 14

June 2013, Location: Kos Island, Greece). National Technical University of Athens, 2013. P. 4578-4592.

10. Садовский В.М., Садовская О.В., Похабова М.А. Моделирование упругих волн в блочной среде на основе уравнений континуума Коссера // Вычислительная механика сплошных сред. 2014. Т. 7, № 1. С. 52-60.

11. Садовский В.М., Садовская О.В. Вычислительный алгоритм для расчета вязкоупругих волн в среде Кельвина-Фойхта // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2014. Т. 15, № 1. С. 98-108.

12. Садовский В.М., Садовская О.В., Варыгина М.П. Анализ резонансного возбуждения блочной среды на основе уравнений моментного континуума Коссера // РЭНСИТ: Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии. 2013. Т. 5, № 1. С. 111-118.

13. Аннин Б.Д., Клунникова М.М., Садовская О.В., Садовский В.М. Метод характеристик в задачах идеальной пластичности // Прикладная математика и механика. 2012. Т. 76, вып. 5. С. 867-877.

14. Садовский В.М., Свободина К.С. О численной реализации термомеханической модели динамики упругопластической среды // Известия Алтайского государственного университета. Раздел: Управление, вычислительная техника и информатика. 2014. Т. 81, № 1-1. С. 179-181.

15. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V., Svobodina K.S. Analysis of the Dispersion of Hydroacoustic Waves on the Basis of Viscoelastic Model // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. 2013. V. 6, No. 3. P. 342-348.

16. Садовская О.В., Садовский В.М. Алгоритмы корректировки решения в задачах динамики линейно упрочняющихся упругопластических сред // Моделирование и механика: Сборник научных статей. Красноярск: СибГАУ. 2012. С. 76-83.

17. Садовский В.М., Садовская О.В., Варыгина М.П. Математическое моделирование волн маятникового типа с применением высокопроизводительных вычислений // Сборник трудов 2-й Российско-Китайской научной конференции "Нелинейные геомеханико-геодинамические процессы при отработке полезных ископаемых на больших глубинах". Новосибирск: ИГД СО РАН, 2012. С. 138-144.

18. Varygina M.P. High-performance computations in numerical modeling of wave propagation in block media with thin interlayers // APM 2013: Proceedings of the XLI Summer School - Conference "Advanced Problems in Mechanics" (July 2013; St. Petersburg, Repino). Institute for Problems in Mechanical Engineering of RAS, St. Petersburg, 2013. P. 106-112.

19. Sadovskaya O.V., Sadovskii V.M., Pokhabova M.A. Numerical Modeling of a Block Medium as an Orthotropic Cosserat Continuum // Lecture Notes in Computer Science, 2014, 8 p. (in print). FDM'14: 6th Conf. on Finite Difference Methods: Theory and Applications (Ed.: L. Vulkov, Date: 18 - 23 June 2014, Location: Lozenetz, Bulgaria).
20. Sadovskii V.M. Computational Algorithm for Modeling Viscoelastic Waves in the Kelvin-Voigt Medium // Lecture Notes in Computer Science, 2014, 8 p. (in print). FDM'14: 6th Conf. on Finite Difference Methods: Theory and Applications (Ed.: L. Vulkov, Date: 18 - 23 June 2014, Location: Lozenetz, Bulgaria).
21. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V. Mathematical Modeling of a Metal Foam as an Elastic-Plastic Continuum with Changing Resistance // AIP Conference Proceedings, 2014, 4 p. (in print). ICNAAM 2014: 12th Intern. Conf. of Numerical Analysis and Applied Mathematics (Ed.: T.E. Simos, Date: 22 - 28 September 2014, Location: Rhodes Island, Greece).
22. Sadovskaya O.V., Sadovskii V.M. Analysis of Elastic Waves in Blocky Media Using the Equations of Cosserat Continuum // AIP Conf. Proc., 2014, 4 p. (in print). ICNAAM 2014: 12th Intern. Conf. of Numerical Analysis and Applied Mathematics (Ed.: T.E. Simos, Date: 22 - 28 September 2014, Location: Rhodes Island, Greece).
23. Shaidurov V.V., Shchepanovskaya G.I., Yakubovich M.V. Numerical modelling of supersonic flows in channel // Russian J. of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 2012. V. 27. № 6. P. 585-601.
24. Щепановская Г.И. Математическое и численное моделирование течений вязкого теплопроводного газа // Вестник СибГАУ. 2011. Т. 5. № 38. С. 101-106.
25. Шайдуров В.В., Щепановская Г.И., Якубович М.В. Численное моделирование течений вязкого теплопроводного газа в канале // Вычислительные технологии. 2013. Т.18. №4. С. 77-90.
26. Shaidurov V.V., Shchepanovskaya G.I., Yakubovich M.V. Some new approaches to solving Navier-Stokes equations for viscous heat-conductive gas // Lecture Notes in Computer Science. - I. Dimov, I. Farag'о, and L. Vulkov (Eds.): NAA-2012 - Springer-Verlag; Berlin Heidelberg. 2013. Vol. 8236. P. 122-131.
27. Шайдуров В.В., Щепановская Г.И., Якубович М.В. О граничных условиях в методе конечных элементов // Вестник Восточно-Казахстанского государственного технического университета им. Д. Серикбаева. 2013. Т.1. С. 275-283.
34. E. Dementyeva and E. Karepova, SMP parallel realization of finite element method for elliptic-type problem // 5th Conference on Numerical Analysis and Applications. - Bulgaria, Rouse: University of Rouse Publ., 2012. - P.10.



35. Вяткин А.В., Ефремов А.А., Карепова Е.Д., Шайдуров В.В. Использование гибридных вычислительных систем для решения уравнения переноса модифицированным методом траекторий // Пятая Международная конференция "Системный анализ и информационные техноло-гии" САИТ - 2013 (19 - 25 августа 2013 г., г. Красноярск, Россия): Труды конференции. В 2-х т. - Т. 1. - Красноярск: ИВМ СО РАН, 2013. - С. 45-55.
36. Вяткин А.В., Ефремов А.А., Карепова Е.Д., Шайдуров В.В. Параллельная реализация модифицированного метода траекторий // Седьмая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям: Программа и тезисы докладов (12 - 14 ноября 2013 года). - Томск: Изд-во Том. ун-та, 2013. - С. 13-14.
38. Вяткин А.В., Ефремов А.А., Карепова Е.Д., Шайдуров В.В. Параллельная реализация модифицированного метода траекторий для уравнения неразрывности // Седьмая Сибирская конференция по параллельным и высокопроизводительным вычислениям. Материалы конференции / Под ред. проф. А.В. Старченко. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 2014. - ISBN 978-5-7511-2063-4. - С. 5-13.
39. Efremov A.A., Karepova E.D., Shaydurov V.V., Vyatkin A.V. Parallel implementation of Semi-Lagrangian method for advection equation // Sixth Conference on Finite Difference Methods: Theory and Applications - FDM<sup>14</sup>. Abstracts. - Bulgaria, University of Rousse, 2014. - P. 21.
40. E.D. Karepova, A.A. Efremov, A.V. Vyatkin. The parallel implementation of semi-lagrangian method of continuity equation // Abstracts. The International conference "Advanced mathematics, computations and applications-2014". - Novosibirsk: Academizdat, 2014. - P. 95.
41. Ефремов А.А., Карепова Е.Д., Вяткин А.В. Проблемы использования технологии NVIDIA CUDA при реализации вычислительных алгоритмов // XV Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. - Тюмень, 2014. - P. 32-33.