

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»

Институт вычислительного моделирования
СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

ГРНТИ 27.35.31

№ АААА-А18-118011890022-1

УТВЕРЖДАЮ

Врио директора ФИЦ КНЦ СО РАН

_____ А.А. Шпедт
«__» _____ 2020 г.

ОТЧЕТ

О ВЫПОЛНЕНИИ ПРОЕКТА

«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ
И ПРОЦЕССОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ НОВЫХ ПОКОЛЕНИЙ»

(промежуточный)

Номер проекта в плане НИР: 0356-2019-0015

Приоритетное направление: Информационно-телекоммуникационные системы

Программа ФНИ (номер и наименование): IV.36 Системы автоматизации, CALS-технологии, математические модели и методы исследования сложных управляющих систем и процессов

Протокол Ученого совета _____

№ _____ от «__» _____ 2020 г.

Руководитель проекта

_____ В.М. Садовский

д.ф.-м.н. профессор

"__" _____ 2020 г.

Красноярск, 2020

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы д.ф.-м.н., профессор	_____ (подпись, дата)	В.М. Садовский
Исполнители: г.н.с., д.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	Е.А. Новиков
в.н.с., д.т.н.	_____ (подпись, дата)	В.А. Кочнев
в.н.с., д.т.н.	_____ (подпись, дата)	К.В. Симонов
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	И.В. Киреев
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	Е.С. Кирик
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	А.А. Лукьянов
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	А.Д. Матвеев
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	А.Н. Рогалев
с.н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	О.В. Садовская
н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	М.П. Варыгина
м.н.с., к.т.н.	_____ (подпись, дата)	Т.Б. Витова
м.н.с., к.ф.-м.н.	_____ (подпись, дата)	Е.П. Ченцов
м.н.с.	_____ (подпись, дата)	И.В. Смолехо
программист	_____ (подпись, дата)	И.А. Ларионова
программист	_____ (подпись, дата)	А.В. Малышев
инженер	_____ (подпись, дата)	А.Е. Королева
инженер	_____ (подпись, дата)	И.Е. Петраков
Нормоконтролер	_____ (подпись, дата)	А.В. Вяткин

РЕФЕРАТ

Отчет 35 с., 12 рис., 2 прил.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ДЕФОРМИРУЕМАЯ СРЕДА, КОМПОЗИТНЫЙ МАТЕРИАЛ, ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ, ГЕОМОНИТОРИНГ, ПРОБЛЕМЫ БЕЗОПАСНОСТИ

Основная цель работы по проекту состоит в создании эффективных методов численной реализации сложных математических моделей природных и технологических процессов на высокопроизводительных ЭВМ.

В результате проведенных исследований в отчетном году предложен и апробирован метод построения определяющих соотношений для описания деформирования многослойных анизотропных оболочек вращения из композитов при наличии неидеального контакта между слоями. Для этого построены специальные многосеточные конечные элементы, позволяющие на дискретном уровне проектировать микроструктуру материала. Разработаны численно-аналитические методы расчета замкнутых оболочек вращения из композиционных материалов под действием квазистатических нагрузок.

Для описания динамики микрополярных тонких пластин и оболочек построены математические модели, основанные на линейной по толщине пластины или оболочки аппроксимации линейных и угловых скоростей. Системы уравнений моделей приведены к термодинамически самосогласованным системам законов сохранения. К численному решению этих систем применены параллельные вычислительные алгоритмы, основанные на методе двуциклического расщепления по пространственным переменным. Реализация алгоритмов выполнена в виде программных комплексов для суперкомпьютеров гибридной архитектуры. Проведена серия расчетов задач о распространении упругих волн в микрополярных прямоугольных пластинах и цилиндрических оболочках, вызванных воздействием на среду различных внешних нагрузок. Показано качественное отличие волновой картины для микрополярных сред в зависимости от формы частиц.

Термомеханические процессы в жидких кристаллах исследованы на основе математической модели, в рамках которой жидкокристаллическая среда рассматривается как мелкодисперсная сплошная среда с вращающимися частицами, обладающая упругим сопротивлением деформации объема и вязкоупругим сопротивлением относительно поворота частиц. Учтены моментные взаимодействия, вызванные механическими и температурными возмущениями, а также воздействием электрических полей. Разработан

вычислительный алгоритм для решения краевых задач с начальными данными и граничными условиями общего вида. Алгоритм реализован в виде параллельной программы с применением технологии CUDA для вычислительных систем с графическими ускорителями. Проведены расчеты, демонстрирующие изменение ориентации молекул жидкого кристалла под внешними воздействиями.

Для выявления особенностей вариаций параметра эквивалентного уровня воды EWH (Equivalent Water Height) над контуром геоида по спутниковым измерениям космической системы GRACE в сейсмоактивных районах выполнен статистический анализ глобальных и локальных аномалий на основе усовершенствования вычислительной технологии анализа данных геомониторинга о предвестниках сильных землетрясений. Решение этой задачи основано на построении и анализе частотных распределений аномалий в виде гистограмм «помесечных» данных, а также полных частотных распределений гравитационных аномалий за период с 2003 по 2016 гг. Детальный анализ расчетных гистограмм показал, что среднее частотное распределение гравитационных аномалий имеет экспоненциальный характер. Предложен способ вычисления средней информационной энтропии отдельных месячных данных в глобальном масштабе, а также на локальном уровне применительно для очаговых зон сильнейших землетрясений. Статистическая обработка глобальной изменчивости гравитационного поля Земли свидетельствует о том, что эта изменчивость имеет случайный характер с дифференциальным распределением вероятности близким к форме Коши (Лоренца). Корреляция между глобальной изменчивостью гравитационного поля и глобальной сейсмичностью Земли в масштабе 10-летнего периода наблюдений не выявлена, следовательно, сильнейшие землетрясения возникают в результате квазилокальных геодинамических процессов.

Решена и программно реализована задача крупноблочного распараллеливания на этапе построения полей расстояний для компьютерного моделирования эвакуации людей из зданий и сооружений. Процедура построения полей расстояний является одной из трудоемких вычислительных процедур при моделировании пешеходного движения, и, в то же время, она служит необходимым средством при оценке планировочных решений. Наиболее трудоемким этот этап оказывается при решении крупномасштабных задач для таких объектов как большие спортивные арены и прилегающие к ним территории. Для реализации расчетных сценариев приходится строить до сотни полей на один этаж. При этом существенного ускорения расчетов можно добиться за счет использования суперкомпьютерных систем кластерной архитектуры.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
1. Построение определяющих соотношений разного уровня сложности для описания деформирования многослойных анизотропных оболочек вращения из композитов при наличии неидеального контакта между слоями. Развитие численно-аналитических методов расчета замкнутых оболочек вращения из композиционных материалов под действием квазистатических нагрузок	7
2. Разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и компьютерных программ для расчета динамики упругих микрополярных пластин и оболочек на многопроцессорных ЭВМ гибридной архитектуры	13
3. Разработка вычислительной технологии для анализа нестационарных процессов в жидких кристаллах с учетом моментных взаимодействий на высокопроизводительных системах с графическими ускорителями.....	17
4. Развитие вычислительных технологий моделирования катастрофических геодинамических природных процессов: анализ данных геомониторинга о предвестниках.....	23
5. Развитие дискретно-непрерывной модели движения людей: разработка эффективных алгоритмов расчета поля расстояний и их адаптация к современным высокопроизводительным программным архитектурам.....	27
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	31
ПРИЛОЖЕНИЕ А	32
ПРИЛОЖЕНИЕ Б	34

ВВЕДЕНИЕ

Проблема разработки вычислительных технологий для решения ресурсоемких научно-исследовательских и прикладных задач на суперкомпьютерах высокой производительности имеет большое научное и практическое значение. Это связано с постоянным совершенствованием применяемых математических моделей и определяется возрастающими требованиями к точности результатов моделирования. В Институте вычислительного моделирования СО РАН – обособленном подразделении ФИЦ КНЦ СО РАН сложились коллективы специалистов в области математического моделирования и разработчиков параллельных вычислительных алгоритмов и программ. Имеется необходимая техническая база – собственные многопроцессорные ЭВМ средней производительности, которые используются для отладки, тестирования программ и для проведения расчетов относительно небольших задач, и высокоскоростные сетевые средства доступа к удаленным Российским суперкомпьютерам. Таким образом, в ИВМ СО РАН имеются все необходимые предпосылки для успешного выполнения фундаментальных научных исследований, соответствующих мировому уровню в научном направлении данного проекта.

Настоящий отчет является промежуточным отчетом 2019 года по теме «Математическое моделирование сложных систем и процессов с применением высокопроизводительных вычислительных комплексов новых поколений». Отчет содержит пять разделов, соответствующих содержанию плана НИР по данной теме.

Запланированные работы по реконструкции единой гетерогенной вычислительной среды коллективного доступа на базе суперкомпьютерных ресурсов ИВМ СО РАН с централизованным динамическим управлением и распределением, а также автоматизацией важнейших функций контроля и управления выполнены в рамках других институтских проектов. В течение 2019 года за счет программы развития ФИЦ КНЦ СО РАН были приобретены вычислительные узлы для универсального кластера (10 модулей 2 x 20-ти ядерных процессоров с 256 Гб оперативной памяти). Пиковая производительность кластера возросла до 14 Тфлопс с двойной точностью. Проведена соответствующая оптимизация системного и прикладного программного обеспечения вычислительных комплексов для повышения эффективности их использования.

1. Построение определяющих соотношений разного уровня сложности для описания деформирования многослойных анизотропных оболочек вращения из композитов при наличии неидеального контакта между слоями. Развитие численно-аналитических методов расчета замкнутых оболочек вращения из композиционных материалов под действием квазистатических нагрузок

Цилиндрические оболочки с неоднородной и микронеоднородной структурой широко используются в авиационной и ракетно-космической технике. Расчет на статическую прочность таких оболочечных композитных конструкций по методу конечных элементов требует больших ресурсов ЭВМ. При работе над проектом разработаны однородные и композитные многосеточные конечные элементы для расчета цилиндрических оболочек сложной формы с переменным радиусом кривизны. Основные результаты опубликованы в работах: [Матвеев А.Д. Построение многосеточных конечных элементов для расчета оболочек, пластин и балок на основе образующих конечных элементов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета: Механика. 2019. № 3. С. 48-57. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.3.05], [Matveev A.D. Generating finite element method in constructing complex-shaped multigrid finite elements // EPJ Web of Conferences. 2019. V. 221. P. 01029-1–01029-11. DOI: 10.1051/epjconf/ 201922101029] и [Matveev A.D. Simulation of composite shells based on the generating finite elements // Journal of Physics: Conference Series (MPCM 2019). 2019. P. 1268. DOI: 10.1088/ 1742-6596/1268/1/012047].

Достоинства многосеточных конечных элементов состоят в том, что они учитывают в рамках микроподхода неоднородную структуру и сложную форму оболочек, описывают трехмерное напряженное состояние в оболочках, образуют дискретные модели малой размерности и порождают решения с малой погрешностью.

Основные конструкции предлагаемых конечных элементов рассмотрим на примере построения двухсеточного конечного элемента (2сКЭ) V_d^a с отверстием. Сечение отверстия закрашено на рис. 1. Конечный элемент армирован волокнами, параллельными оси Oy . Между разномодульными однородными телами связи идеальны. Область V_d^a получается путем параллельного перемещения плоского образующего односеточного конечного элемента (1сКЭ) V_a сложной формы вдоль оси Oy (см. рис. 2). Базовое разбиение R_d 2сКЭ V_d^a состоит из однородных 1сКЭ V_e 1-го порядка формы куба со стороной h , $e = 1, \dots, M$, где M – общее число 1сКЭ V_e . Разбиение R_d учитывает

неоднородную микроструктуру, форму 2сКЭ V_d^a и порождает мелкую сетку h_d . Узлы 1сКЭ V_a (12 узлов, на рис. 2 отмечены точками) при его движении совпадают с узлами крупной сетки H_d 2сКЭ V_d^a . Узлы H_d отмечены точками (рис. 1), 60 узлов. Узлы 1сКЭ V_a образуют сетку H_d , $H_d \subset h_d$.

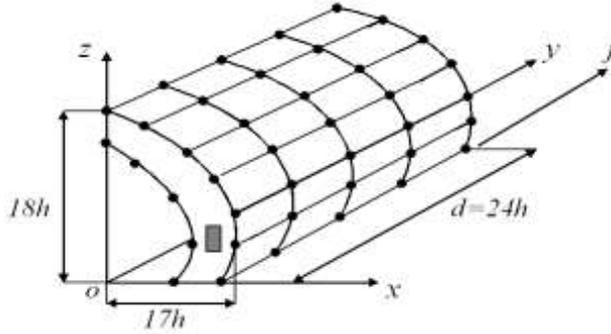


Рисунок 1 – Двухсеточный КЭ V_d^a

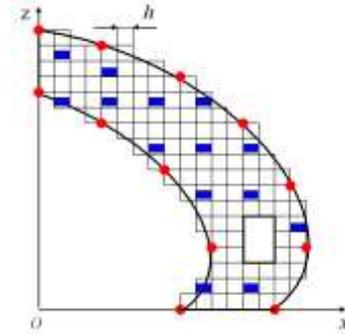


Рисунок 2 – Образующий 1сКЭ V_a

На рис. 2 показано сечение сетки h_d , сечения волокон закрасены. В 1сКЭ V_a реализуется трехмерное напряженно-деформированное состояние (НДС), поэтому в 2сКЭ V_d^a также реализуется трехмерное НДС. Паре чисел i, j , где $i=1, \dots, 12$, $j=1, \dots, 5$, соответствует целый индекс β , $\beta=1, \dots, 60$. Базисная функция $\psi_\beta(x, y, z)$ для β -го узла сетки H_d задается в виде

$$\psi_\beta(x, y, z) = N_i(x, z)L_j(y), \quad (1)$$

где $\beta = \overline{1, 60}$, $N_i(x, z)$ – функция формы i -го узла 1сКЭ V_a , $i = \overline{1, 12}$, отвечающая полиному $P(x, z)$ 3-го порядка, $L_j(y)$ – полином Лагранжа 4-го порядка, $j = 1, \dots, 5$.

В (1) базисные функции ψ_β 2сКЭ V_d^a представляются функциями формы $N_i(x, z)$ 1сКЭ V_a и в направлении движения образующего 1сКЭ – полиномами Лагранжа $L_j(y)$.

Полная потенциальная энергия Π_d разбиения R_d записывается в виде

$$\Pi_d = \sum_{e=1}^M \left(\frac{1}{2} \delta_e^T [K_e] \delta_e - \delta_e^T \mathbf{P}_e \right), \quad (2)$$

где $[K_e]$ – матрица жесткости, \mathbf{P}_e и δ_e – векторы узловых сил и перемещений 1сКЭ V_e , отвечающие локальной декартовой системе координат $Oxyz$ 2сКЭ V_d^a (рис. 1).

С помощью (1) вектор узловых перемещений δ_e 1сКЭ V_e выражается через вектор узловых перемещений δ_d размерности n_d крупной сетки H_d

$$\delta_e = [A_e^d] \delta_d, \quad (3)$$

где $[A_e^d]$ – прямоугольная матрица, $e = 1, \dots, M$.

Подстановка (3) в (2) дает $\Pi_d = \Pi_d(\delta_d)$. Из условия $\partial \Pi_d(\delta_d) / \partial \delta_d = 0$ вытекает система уравнений $[K_d] \delta_d = \mathbf{F}_d$, где $[K_d] = \sum_{e=1}^M [A_e^d]^T [K_e] [A_e^d]$, $\mathbf{F}_d = \sum_{e=1}^M [A_e^d]^T \mathbf{P}_e$, $[K_d]$ – матрица жесткости, \mathbf{F}_d – вектор узловых сил 2сКЭ V_d^a . Решение на сетке H_d с помощью (3) рассматривается на сетке h_d , что дает возможность вычислять напряжения в 1сКЭ V_e базового разбиения R_d . Трехсеточные КЭ (3сКЭ) проектируются на основе 2сКЭ, представляющих область 3сКЭ, с помощью вышеописанных процедур. Аналогично проектируются однородные МКЭ.

Анализ результатов расчетов на основе разработанного подхода показывает, что максимальные перемещения и эквивалентные напряжения, определяемые по 4-ой теории прочности, базовой \mathbf{R}_0 и двухсеточной \mathbf{R}_h моделей отличаются на 1,24% и на 0,11%, соответственно. Реализация МКЭ для двухсеточной дискретной модели \mathbf{R}_h требует в 244,75 раза меньше ресурсов ЭВМ, чем для базовой \mathbf{R}_0 .

При расчете НДС композитных конструкций регулярной структуры активно используются основные положения макроподхода. Согласно макроподходу композиты рассматриваются как однородные тела с эффективными модулями упругости. Это существенно упрощает применение МКЭ для расчета композитных конструкций. Однако, проблема нахождения эффективных модулей упругости связана с большими трудностями, особенно для трехмерных композитных тел с малым коэффициентом наполнения. В результате проведенных исследований разработаны процедуры построения R соотношений, которые используются для определения эффективных модулей для двух-трехмерных композитных тел регулярной структуры с произвольным коэффициентом объемного наполнения. Основные результаты получены в работе [Matveev A.D. Theorems

of relations between elastic modulus and the stiffness matrix coefficients of isotropic homogeneous finite elements // EPJ Web of Conferences. 2019. V. 221. P. 01030-1–01030-10. DOI: 10.1051/epjconf/201922101030].

Процедуры построения R соотношений отражены в следующих двух теоремах.

Теорема 1. Из матрицы жесткости упругого изотропного однородного конечного элемента 1-го порядка формы квадрата плоской задачи теории упругости всегда можно выбрать таких 6 коэффициентов, с помощью которых однозначно определяются 5 модулей упругости $C_{11}, C_{13}, C_{22}, C_{23}, C_{33}$ данного конечного элемента. Модуль упругости C_{12} определяется с помощью найденных пяти модулей упругости.

Теорема 2. Из матрицы жесткости линейно-упругого изотропного однородного конечного элемента 1-го порядка формы куба трехмерной задачи теории упругости всегда можно выбрать таких 18 коэффициентов, с помощью которых однозначно определяются 15 модулей упругости $C_{11}, C_{15}, C_{16}, C_{22}, C_{24}, C_{26}, C_{33}, C_{34}, C_{35}, C_{44}, C_{45}, C_{46}, C_{55}, C_{56}, C_{66}$ данного конечного элемента. Оставшиеся 6 модулей упругости конечного элемента однозначно определяются через найденные модули упругости.

Альтернативный методу конечных элементов подход к решению задач прочности тонких многослойных анизотропных тел традиционно связывают с теориями оболочек, позволяющих перейти от пространственных задач к двумерным. Пусть решение пространственной задачи существует и единственно. Обозначим через $\overset{\mathbf{u}}{U}(x_1, x_2, x_3)$ поле перемещений многослойной оболочки в криволинейных координатах x_1, x_2, x_3 , где координатные линии x_3 ортогональны поверхностям раздела, на которых x_1, x_2 образуют координатную систему. Рассмотрим один из слоев оболочки, ограниченный поверхностями $x_3 = h_0(x_1, x_2) \pm h(x_1, x_2)$, здесь $2h(x_1, x_2) > 0$ – толщина слоя. Тогда контактные перемещения $\overset{\mathbf{u}}{U}(x_1, x_2, x_3)|_{x_3=h_0 \pm h} = \overset{\mathbf{r}}{u}^{\pm}(x_1, x_2)$ должны быть связаны с аналогичными векторами из соседних слоев условиями контакта – идеальным, с проскальзыванием и т.п. Кроме этого тензоры напряжений σ в слоях должны быть согласованы на ограничивающих их поверхностях: $(\sigma|_{x_3=h_0 \pm h})_o \overset{\mathbf{r}}{n}^{\pm} = \overset{\mathbf{r}}{p}^{\pm}$; здесь $\overset{\mathbf{r}}{n}^{\pm}(x_1, x_2)$ – вектор внешней к рассматриваемому слою нормали, а $\overset{\mathbf{r}}{p}^{\pm}(x_1, x_2)$ – вектор плотности поверхностных сил на границе контакта $x_3 = h_0(x_1, x_2) \pm h(x_1, x_2)$. Отсюда, в силу положительной определенности тензора жесткости материала упругого слоя, нормальные составляющие тензора деформаций на поверхности раздела линейно выражаются через

поверхностные силы и частные производные первого порядка по координатам x_1, x_2 от контактных перемещений. Иными словами, для рассматриваемого слоя в каждой точке поверхности $x_3 = h_0(x_1, x_2) \pm h(x_1, x_2)$ имеет место представление

$$\left. \frac{\mathbf{u}}{\partial x_3} U(x_1, x_2, x_3) \right|_{x_3=h_0 \pm h} = \mathbf{u}_{x_3}^{\pm} \left(\mathbf{u}^{\pm}, \mathbf{u}_{x_1}^{\pm}, \mathbf{u}_{x_2}^{\pm}, \mathbf{p}^{\pm} \right),$$

где $\mathbf{u}_{x_3}^{\pm}$ есть линейная комбинация векторов $\mathbf{u}^{\pm}, \mathbf{u}_{x_1}^{\pm}, \mathbf{u}_{x_2}^{\pm}, \mathbf{p}^{\pm}$, коэффициенты которой определяются внутренней геометрией слоя $|x_3 - h_0(x_1, x_2)| \leq h(x_1, x_2)$ и его упругими характеристиками.

Введем интерполяционные базисные на отрезке $[-1, 1]$ многочлены Эрмита:

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}_0^+(z) &= \frac{1}{4}(2 + 3z - z^3), \quad \mathfrak{h}_0^-(z) = \frac{1}{4}(2 - 3z + z^3); \quad \mathfrak{h}_0^{\pm}(\pm 1) = 1, \quad \mathfrak{h}_0^{\pm}(\mathbf{ml}) = 0. \\ \mathfrak{h}_1^+(z) &= \frac{1}{4}(z-1)(z+1)^2, \quad \mathfrak{h}_1^-(z) = \frac{1}{4}(z+1)(z-1)^2; \quad \mathfrak{h}_1^{\pm}(\pm 1) = \mathfrak{h}_1^{\pm}(\mathbf{ml}) = 0, \quad \frac{d\mathfrak{h}_1^{\pm}(\pm 1)}{dz} = 1, \quad \frac{d\mathfrak{h}_1^{\pm}(\mathbf{ml})}{dz} = 0. \end{aligned}$$

Тогда имеет место представление

$$\begin{aligned} \mathbf{u} U(x_1, x_2, x_3) &= \mathbf{u}^+(x_1, x_2) \cdot \mathfrak{h}_0^+ \left(\frac{x_3 - h_0(x_1, x_2)}{h(x_1, x_2)} \right) + \mathbf{u}^-(x_1, x_2) \cdot \mathfrak{h}_0^- \left(\frac{x_3 - h_0(x_1, x_2)}{h(x_1, x_2)} \right) + \\ &+ \mathbf{u}_{x_3}^+(x_1, x_2) \cdot \mathfrak{h}_1^+ \left(\frac{x_3 - h_0(x_1, x_2)}{h(x_1, x_2)} \right) + \mathbf{u}_{x_3}^-(x_1, x_2) \cdot \mathfrak{h}_1^- \left(\frac{x_3 - h_0(x_1, x_2)}{h(x_1, x_2)} \right) + \mathbf{u} \mathfrak{U}(x_1, x_2, x_3); \\ \mathbf{u} \mathfrak{U}(x_1, x_2, x_3) \Big|_{x_3=h_0(x_1, x_2) \pm h(x_1, x_2)} &= \left. \frac{\partial \mathfrak{U}(x_1, x_2, x_3)}{\partial x_3} \right|_{x_3=h_0(x_1, x_2) \pm h(x_1, x_2)} = \mathbf{r} = \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Если решение исходной задачи не содержит функций типа погранслоя по x_3 , то последним слагаемым можно пренебречь и приходим к кубической по нормальной координате аппроксимации вектор-функции $\mathbf{U}(x_1, x_2, x_3)$. Из принципа возможных перемещений получаем систему линейных дифференциальных уравнений относительно контактных смещений и усилий, содержащую частные производные до четвертого порядка от \mathbf{u}^{\pm} и до второго от \mathbf{p}^{\pm} включительно. Применяя подобные технологии к

функции $\mathfrak{A}^u(x_1, x_2, x_3)$, можно получить уточненные оболочечные модели любого порядка точности.

Поскольку валидация численного решения задач с неидеальным межслойным контактом очень сложна, было решено ограничиться пока лишь осесимметричными задачами для замкнутой многослойной оболочки вращения, находящейся под действием квазистатического внутреннего давления. За отчетный период были получены разрешающие соотношения для контактной задачи при наличии проскальзывания и межслойного трения между двумя из слоев. Отправляясь от одномерной эрмитовой конечно-элементной аппроксимации искомых функций, сформулирована вариационная задача минимизации конечномерного квадратичного функционала при ограничениях типа неравенств. На языке C++ написан программный комплекс, проведены тестовые расчеты.

2. Разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и компьютерных программ для расчета динамики упругих микрополярных пластин и оболочек на многопроцессорных ЭВМ гибридной архитектуры

Тонкостенные конструкции, такие как стержни, пластины и оболочки, повсеместно используются в гражданском строительстве, авиакосмическом проектировании, медицинских и биологических отраслях в качестве основных структурных элементов. Классическая теория сплошных сред не учитывает внутреннюю микроструктуру материала, для ее описания применяются модели микрополярных (моментных) сред [Cosserat E., Cosserat F. *Théorie des corps Déformables*. Herman et Fils, Paris, 1909]. В этих моделях кроме поступательного движения рассматриваются независимые малые повороты частиц, а наряду с несимметричным тензором напряжений вводится несимметричный тензор моментных напряжений. Влияние различных типов частиц среды и характерного размера микроструктуры описывается с помощью тензора инерции.

Особую актуальность математические модели микрополярных сред получили в связи с развитием нанотехнологий. Материалы с микро- и наноструктурой проявляют целый комплекс характерных свойств, связанных с вращательными степенями свободы частиц. К таким материалам можно отнести композиты, наноструктуры, гранулированные, порошкообразные, сыпучие, пористые и микроразрушенные среды, искусственные материалы на основе пен, поликристаллы и жидкие кристаллы, биологические мембраны и костные ткани. В последнее десятилетие микрополярный континуум ассоциируется с метаматериалами, т. е. функциональными материалами с проектируемыми специальными свойствами [Del Vescovo D., Giorgio I. *Dynamic problems for metamaterials: Review of existing models and ideas for further research // Int. J. Eng. Sci.* 2014. V. 80. P. 153-172], [Madeo A., Neff P., Ghiba I.D., Placidi L., Rosi G. *Wave propagation in relaxed micromorphic continuum // Contin. Mech. Thermodyn.* 2015. V. 27, Iss. 5. P. 551-570].

Начиная с работы [Erickson J.L., Truesdell C. *Exact theory of stress and strain in rods and shells // Arch. Ration. Mech. Anal.* 1958. V. 1, Iss. 1. P. 295-323], модель микрополярных сред применяется для построения неклассических обобщенных моделей тонкостенных конструкций. Развиваются несколько подходов. Аксиоматический метод (прямой подход) рассматривает оболочку как материальную поверхность и описывает ее деформирование под действием обобщенных внешних и внутренних сил, наделяя каждую материальную частицу свойствами твердого тела, дополнительно учитывая вращательные степени свободы. Аппроксимационный метод заключается в приближении объемного поля

перемещений и усреднении динамических уравнений по «тонким» направлениям. Переход от трехмерных уравнений микрополярной среды к двумерным уравнениям микрополярных пластин и оболочек основан на линейной по толщине пластины или оболочки аппроксимации линейных и угловых скоростей. После интегрирования системы трехмерных уравнений среды по толщине пластины (оболочки), системы двумерных уравнений для пластин (оболочек) записываются в терминах усредненных по толщине усилий и моментов.

При выполнении базового проекта системы уравнений микрополярных пластин и оболочек в рамках аппроксимационного подхода приведены к термодинамически самосогласованным системам законов сохранения, записанных в симметрической гиперболической форме, из которой следует корректность постановки задачи Коши и краевых задач с диссипативными граничными условиями.

Для численного моделирования применяется метод двуциклического расщепления по пространственным переменным. Процедура расщепления состоит из пяти этапов. На этапах расщепления решаются одномерные задачи с помощью монотонной ENO-схемы с предельной реконструкцией решения и конечно-разностной схемы Кранка–Николсон. Применяемый метод сохраняет порядок аппроксимации одномерных схем и обеспечивает устойчивость численного решения при выполнении условия устойчивости Куранта–Фридрихса–Леви для одномерных систем.

Реализация алгоритмов выполнена в виде программных комплексов, предназначенных для численного решения динамических задач о распространении упругих волн в микрополярных пластинах и оболочках. Программный комплекс включает в себя последовательные и параллельные версии программ для гибридных суперкомпьютеров. Последовательная версия реализована на языке C++. Распараллеливание выполнено по технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture), позволяющей запускать задачу на множестве ядер графического устройства. Реализуются различные варианты распараллеливания: технология CUDA для использования одного или нескольких графических устройств (Single-GPU, Multi-GPU), сочетание технологий MPI (Message Passing Interface) + CUDA. Программы зарегистрированы в Роспатенте [Варыгина М.П. Программный комплекс для численного моделирования микрополярных прямоугольных пластин на графических ускорителях (2Dyn_Plates_CUDA). Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2019610038 от 09.01.2019 // RU ОБПБТ. № 01-2019. М.: ФИПС, 2019], [Варыгина М.П. Программный комплекс для численного моделирования микрополярных цилиндрических оболочек на графических ускорителях (2Dyn_Shells_CUDA).

Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2019610039 от 09.01.2019 // RU ОБПБТ. № 01-2019. М.: ФИПС, 2019]. Для верификации работы алгоритма использовалось аналитическое решение задачи о распространении монохроматической волны.

Для демонстрации работы программного комплекса выполнена серия расчетов задач о распространении упругих волн в микрополярных тонких пластинах и оболочках на вычислительном сервере Flagman с графическими вычислителями Tesla C2050 Института вычислительного моделирования СО РАН. Предполагается, что в начальный момент времени среда находится в естественном (ненапряженном) состоянии. На одной из границ действует нагрузка в нормальном или касательном направлении. Граница, противоположная границе с заданными напряжениями, жестко закреплена. Остальные границы свободны от напряжений. Реализованы различные варианты задания внешней нагрузки: сосредоточенная в системе точек или распределенная по участку границы, мгновенная, периодическая или в виде последовательности импульсов.

На рис. 3 – 4 представлены результаты численного моделирования микрополярных пластин и оболочек. Решается задача Лэмба о мгновенном действии сосредоточенной нагрузки моментного напряжения в центре верхней грани пластины и оболочки в касательном направлении. Толщина пластины и оболочки – 2,5 мм. Размер пластины и оболочки – $0,1 \times 0,05 \text{ м}^2$. Радиус срединной поверхности оболочки – 0,1 м. Расчеты

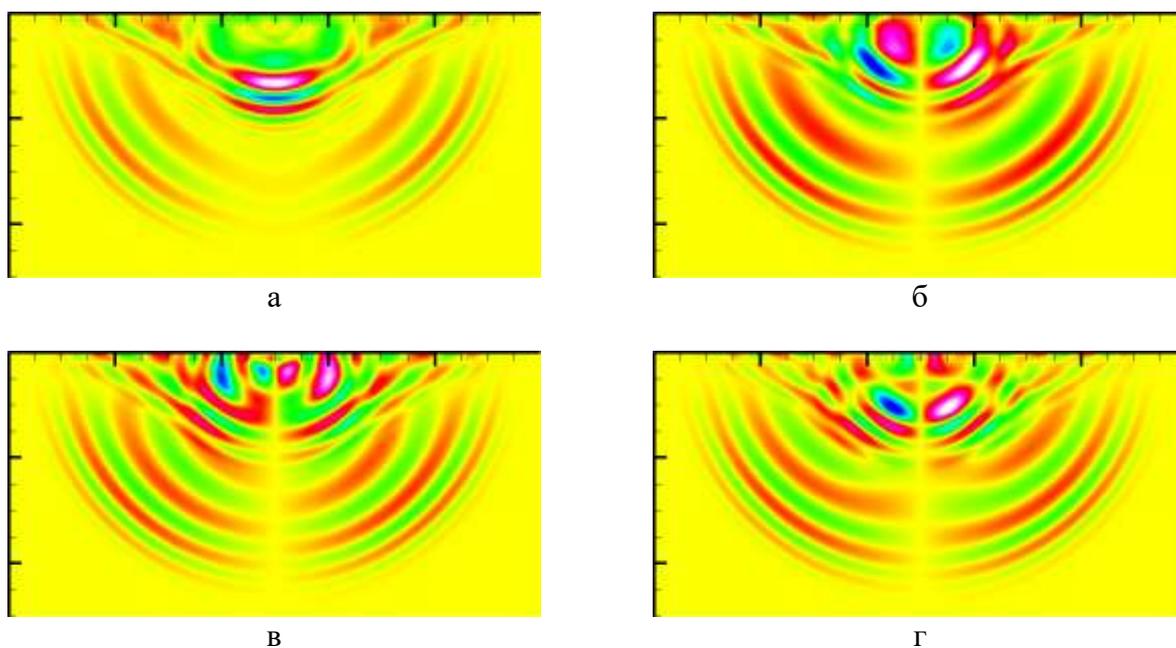


Рисунок 3 – Задача Лэмба для микрополярных прямоугольных пластин. Линии уровня вращательного момента (а), угловой скорости (б) – (г) для среды со сферическими частицами (а) – (б) и цилиндрическими частицами с осью вдоль оси x_1 (в), оси x_2 (г)

проведены для круглых и цилиндрических частиц среды. Радиус частицы – 0,15 мм. Высота цилиндрической частицы – 1,5 мм. Размерность конечно-разностной сетки – 1000×500 ячеек. Шаг сетки – 0,1 мм, что согласуется с размером частиц среды. На линиях и поверхностях уровня усредненной по толщине угловой скорости видны характерные для задачи Лэмба волны: падающая продольная и поперечная волны с круговыми фронтами, две поперечные волны в виде симметричных отрезков прямых, касающихся полуокружности меньшего радиуса. Отличие от классической теории упругости состоит в колебательном характере решения. Наблюдается качественное отличие волновой картины для микрополярных сред с различным типом частиц.

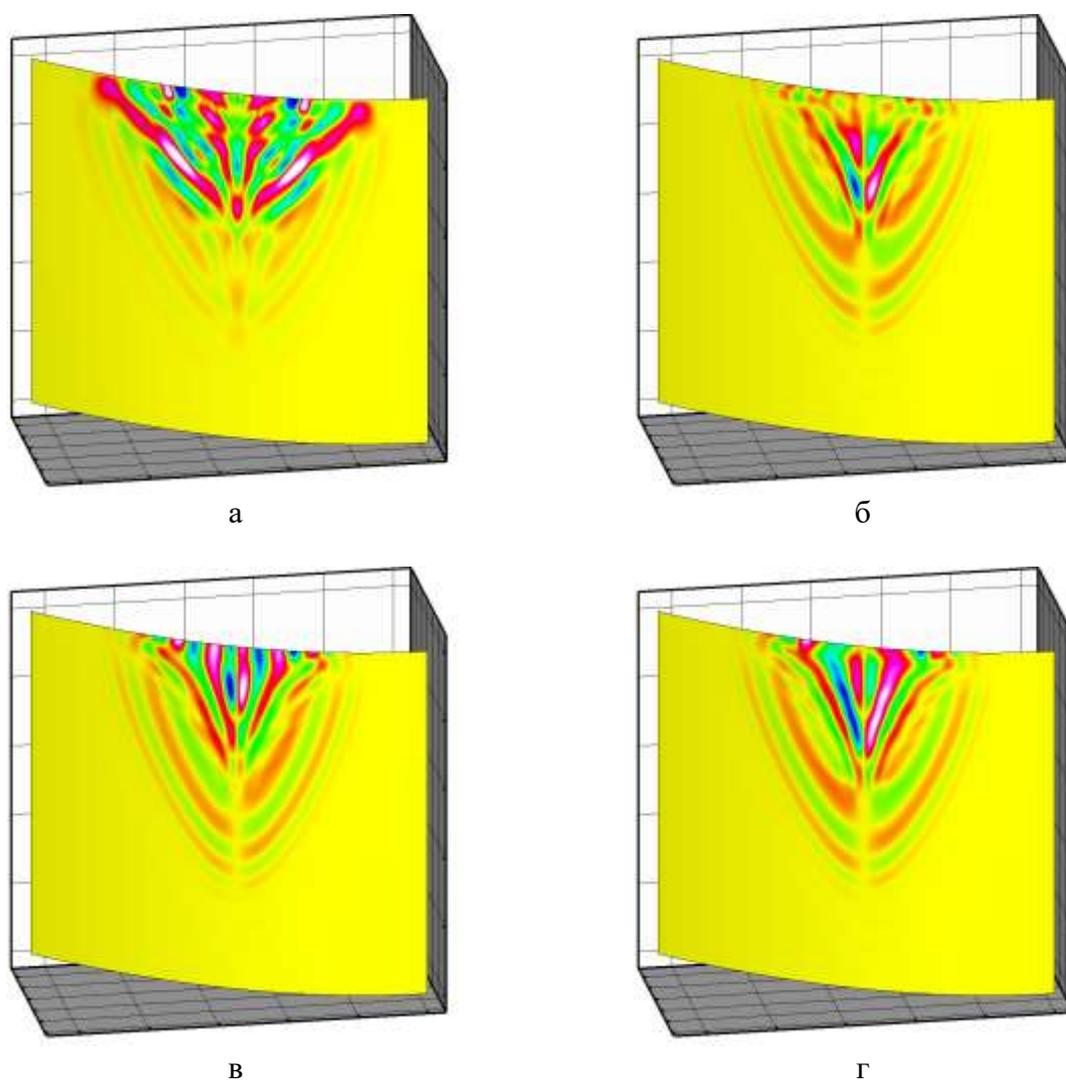


Рисунок 4 – Задача Лэмба для микрополярных цилиндрических оболочек. Линии уровня вращательного момента (а), угловой скорости (б) – (г) для среды со сферическими частицами (а) – (б) и цилиндрическими частицами с осью вдоль оси x_1 (в), оси x_2 (г)

3. Разработка вычислительной технологии для анализа нестационарных процессов в жидких кристаллах с учетом моментных взаимодействий на высокопроизводительных системах с графическими ускорителями

Жидкие кристаллы представляют собой промежуточное агрегатное состояние вещества между анизотропными твердыми телами и изотропными жидкостями, в котором проявляются одновременно свойства упругости и текучести. Жидкокристаллическая фаза существует в интервале от температуры плавления до некоторой более высокой температуры, при нагреве до которой вещество переходит в обычную жидкость. Ниже этого интервала вещество является твердым кристаллом. Подвижность молекул жидких кристаллов позволяет слабым воздействием внешних сил изменять их ориентацию и таким образом управлять их свойствами.

Физические свойства жидких кристаллов описаны во многих монографиях, среди которых [Blinov L.M. Structure and Properties of Liquid Crystals. Heidelberg – New York – Dordrecht – London: Springer, 2011. 439 p.]. Впервые математическая модель жидкого кристалла как микрополярной среды с вращательными степенями свободы была предложена в работе [Ericksen J.L. Conservation laws for liquid crystals // Transactions of the Society of Rheology. 1961. V. 5, Iss. 1. P. 23-34]. Аналогичные модели изучались в [Leslie F.M. Some constitutive equations for liquid crystals // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1968. V. 28, Iss. 4. P. 265-283], [Аэро Э.Л., Булыгин А.Н. Уравнения движения нематических жидких кристаллов // Прикладная математика и механика. 1971. Т. 35, вып. 5. С. 879-891] и других работах. Построенная в них полная модель исключительно сложна для численной реализации. Проблема еще в том, что в эту модель наряду с параметрами состояния входят функции состояния, трудноопределимые в эксперименте.

В работе [Садовский В.М., Садовская О.В. Об акустическом приближении термомеханической модели жидкого кристалла // Физическая мезомеханика. 2013. Т. 16, № 3. С. 55-62] построена упрощенная модель нематического жидкого кристалла как акустической микронеоднородной среды с вращающимися частицами без учета моментных напряжений. Параллельный вычислительный алгоритм для решения дифференциальных уравнений второго порядка для касательного напряжения и угловой скорости приведен в [Смолехо И.В., Садовская О.В., Садовский В.М. Численное моделирование акустических волн в жидком кристалле с использованием технологии CUDA // Вычислительные технологии. 2017. Т. 22, Спец. вып. 1. С. 87-98]. В наиболее общем виде упрощенная модель жидкого кристалла с учетом моментных взаимодействий частиц и воздействия электрического поля, а также алгоритм численной реализации

модели представлены в [Sadovskii V., Sadovskaya O. Acoustic Approximation of the Governing Equations of Liquid Crystals under Weak Thermomechanical and Electrostatic Perturbations. In: Advances in Mechanics of Microstructured Media and Structures. Chapt. 17. P. 297-341. Ser.: Advanced Structured Materials, vol. 87. Cham: Springer, 2018].

Основная система уравнений упрощенной модели в двумерном случае имеет по сравнению с полной моделью жидкого кристалла гораздо более простой вид. В систему входят уравнения поступательного и вращательного движения, кинематическое уравнение для угла поворота, определяющие уравнения для давления, касательного напряжения и моментных напряжений и уравнение анизотропной теплопроводности, в котором учитывается разница между коэффициентами теплопроводности в направлении ориентации молекул жидкого кристалла и в поперечном направлении.

Правые части уравнений движения обусловлены механическими и температурными возмущениями, а также воздействием электрического поля. Неоднородное распределение ориентации молекул по объему задается с помощью начального условия. В начальный момент времени в области, занятой жидким кристаллом, задаются также распределения скоростей (линейной и угловой), давления, касательного напряжения и температуры. На границе области могут быть заданы внешнее нормальное напряжение, касательное напряжение или моментное напряжение. Часть границы может быть свободной от напряжений. Альтернативный вариант – кинематические граничные условия для скоростей. Допускаются также смешанные граничные условия, когда одно или несколько из условий в напряжениях заменяются соответствующими условиями в скоростях. Кроме того, на границе области задается температура или тепловой поток.

Численное решение краевых задач для системы уравнений осуществляется с помощью метода двуциклического расщепления по пространственным переменным. Искомыми величинами являются скорости, давление и касательное напряжение, угловая скорость, моментные напряжения и температура внутри расчетной области. Используемая конструкция метода расщепления обеспечивает устойчивость численного решения краевых задач при выполнении условия Куранта–Фридрихса–Леви.

Учет воздействия электрического поля производится в следующей постановке. Рассматривается протяженный в горизонтальном направлении слой жидкого кристалла толщины b под действием периодического электрического поля, создаваемого зарядами на пластинах–обкладках конденсатора. Периодичность поля обусловлена периодичностью расположения пластин на одном и том же расстоянии l друг от друга как на верхней, так и

на нижней сторонах жидкого кристалла (рис. 5). Предполагается, что горизонтальные размеры пластин конденсатора l^\pm меньше, чем l .

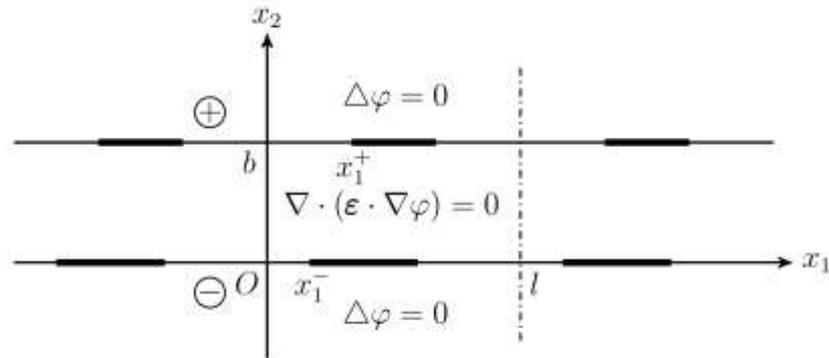


Рисунок 5 – Схема возмущения жидкокристаллического слоя электрическим полем

Во внешней части слоя потенциал φ электрического поля $E = -\nabla\varphi$ удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\varphi = 0$ при $x_2 < 0$ и при $x_2 > b$. Внутри слоя выполняется уравнение, учитывающее анизотропию среды: $\nabla \cdot (\varepsilon \cdot \nabla\varphi) = 0$, где ε – тензор диэлектрической проницаемости жидкого кристалла, зависящий от ориентации молекул.

С учетом периодичности можно рассматривать лишь часть слоя длиной l . На пластинах–обкладках электрический потенциал распределен равномерно:

$$\varphi^+ = \varphi = \varphi_0^+ \text{ при } x_2 = b, \quad x_1^+ \leq x_1 < x_1^+ + l^+, \quad \varphi = \varphi^- = \varphi_0^- \text{ при } x_2 = 0, \quad x_1^- \leq x_1 < x_1^- + l^-.$$

Здесь φ^\pm – значения потенциала на границах жидкого кристалла извне (сверху и снизу относительно слоя), φ_0^\pm – заданные константы, x_1^\pm – координаты левых концов верхней и нижней обкладок конденсатора, расположенных несимметрично в пределах выделенной части слоя. На остальных частях границы, где жидкий кристалл граничит с воздухом, выполняются условия непрерывности электрического потенциала и нормальной составляющей вектора электрической индукции $\varepsilon \cdot \nabla\varphi$.

При наличии электрического поля молекулы жидкого кристалла испытывают действие объемных сил $f = (P \cdot \nabla) E$ и моментов $m = P \times E$, где $P = \varepsilon_0 \chi E$ – вектор электрической поляризации, $\chi = \varepsilon - I$ – тензор диэлектрической восприимчивости, I – единичный тензор. Силы и моменты используются в качестве правых частей при решении системы уравнений акустического приближения.

Решение уравнения Лапласа во внешности слоя строится по методу прямых. Уравнение внутри слоя решается итерационным методом с помощью рекуррентного

пересчета по уравнению: $\varepsilon^0 \Delta \varphi^* = \varepsilon^0 \Delta \varphi - \nabla \cdot (\varepsilon \cdot \nabla \varphi)$. В соответствии с этим уравнением анизотропная среда на каждом шаге заменяется однородной и изотропной средой с диэлектрической проницаемостью ε^0 , с распределенными внутри нее зарядами. Правая часть вычисляется на предыдущем приближении электрического потенциала, величина ε^0 выбирается из соображений наискорейшей сходимости итераций. Условие окончания итерационного процесса: $\|\varphi^* - \varphi\| \leq \delta \|\varphi\|$ с заданной погрешностью δ . Решение соответствующего дискретного уравнения Лапласа относительно нового приближения потенциала φ^* строится с помощью разложения Фурье. При нахождении коэффициентов разложения используется метод трехточечной прогонки. Сначала строится базис пространства решений – вычисляется частное решение неоднородной системы уравнений с однородными граничными условиями, а потом – два линейно-независимых решения однородной системы. Общее решение исходной задачи является линейной комбинацией этих решений. Необходимые коэффициенты, через которые электрический потенциал определяется во внешности слоя, находятся из граничных условий на обкладках конденсатора и условий склейки решений на свободной границе жидкого кристалла. В итоге получается замкнутая система уравнений для определения коэффициентов, которая решается методом LU -разложения. При численной реализации алгоритма, учитывая линейность задачи относительно потенциала электрического поля, и то, что электрический потенциал определяется с точностью до аддитивной постоянной, в качестве значений φ^\pm берутся $\varphi_0^+ = 1$ и $\varphi_0^- = 0$. Затем полученное решение умножается на размерный коэффициент, отвечающий заданной разности потенциалов на обкладках конденсатора.

Алгоритм реализован с помощью параллельной программы, написанной на языке Си с применением технологии CUDA, которая позволяет существенно увеличить вычислительную производительность благодаря использованию видеокарт. Этапы алгоритма выполняются последовательно, распараллеливание вычислений производится внутри каждого из этапов. При расщеплении по пространственным переменным нити графического устройства в параллельном режиме выполняют однотипные операции в ячейках разностной сетки по расчету решения на шагах “предиктор” и “корректор” схемы. В программе содержатся процедуры, реализующие метод прямых с применением трехточечной прогонки и итерационный метод решения уравнения для потенциала с помощью рекуррентного соотношения. С помощью функций библиотеки *cuSolver* осуществляется метод LU -разложения для решения СЛАУ. Для параллельной реализации прямого и обратного преобразований Фурье применяется библиотека *cuFFT*. Программа

зарегистрирована в Роспатенте [Садовский В.М., Садовская О.В., Смолехо И.В. Программный комплекс для численного моделирования динамических процессов в жидкокристаллической среде с помощью технологии CUDA (2Dyn_Crystals_CUDA). Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2018666773 от 20.12.2018 // RU ОБПБТ. № 12-2018. М.: ФИПС, 2018].

Для демонстрации работы программы проведена серия расчетов на высокопроизводительном вычислительном сервере Flagman с графическими вычислителями Tesla C2050 Института вычислительного моделирования СО РАН. На рис. 6 и 7 приведены результаты расчетов, выполненных для жидкого кристалла 5СБ размером 20 мкм × 5 мкм. Пластины конденсатора расположены несимметрично, их длины – 7 мкм. Горизонтальными линиями на рис. 6 а и 7 а показаны границы жидкокристаллического слоя. Белый цвет соответствует максимальным положительным значениям, а синий цвет – минимальным отрицательным значениям соответствующих величин. Размерность конечно-разностной сетки внутри слоя – 2048 × 512 ячеек, вне слоя – по 2048 × 256 ячеек сверху и снизу. Диэлектрические проницаемости в направлении ориентации молекул и в поперечном направлении отличаются в 5 раз. Начальный угол поворота молекул – $\pi/4$ (см. рис. 6). Со временем молекулы жидкого кристалла поворачиваются и переориентируются в направлении действия электрического поля, в данном случае – до угла $2\pi/3$ (рис. 7). Наблюдается эффект Фредерикса.

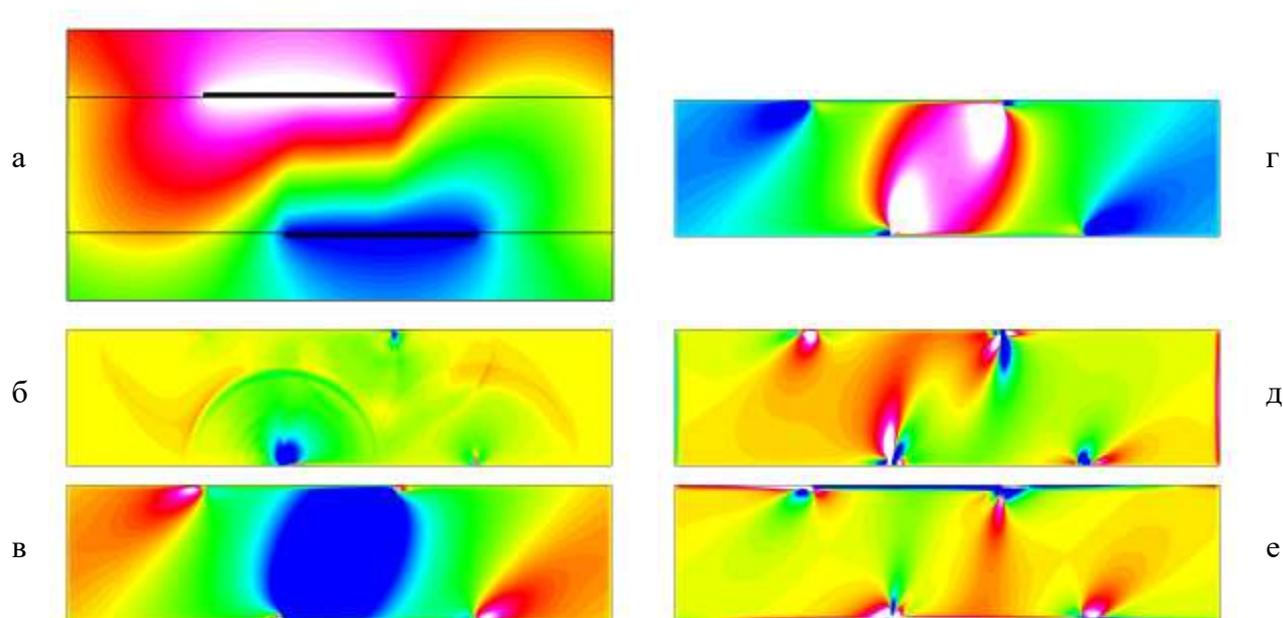


Рисунок 6 – Линии уровня потенциала электрического поля φ (а), давления p (б), касательного напряжения q (в), угла поворота ϕ (г), моментных напряжений μ_1 (д) и μ_2 (е) в начале воздействия на жидкокристаллический слой

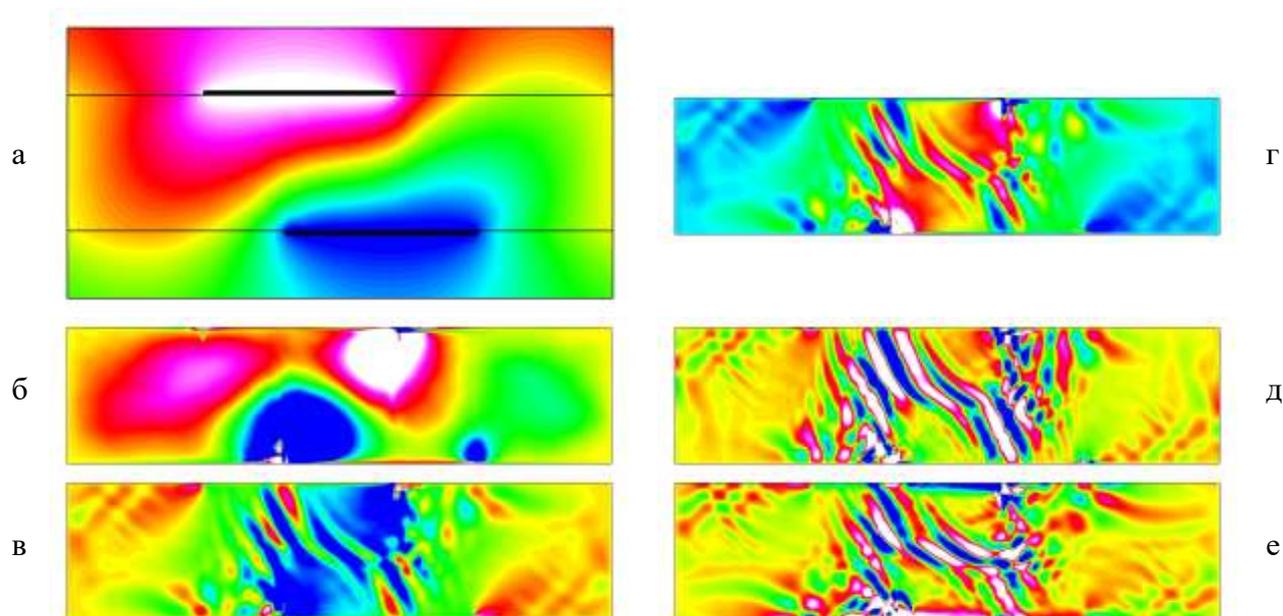


Рисунок 7 – Линии уровня потенциала электрического поля φ (а), давления p (б), касательного напряжения q (в), угла поворота ϕ (г), моментных напряжений μ_1 (д) и μ_2 (е) после переориентации молекул

При расчетах большой серии задач был выявлен основной недостаток разработанного численного алгоритма, состоящий в том, что он не учитывает особенностей электрического поля в концевых точках пластинок–обкладок конденсатора. Было показано, что порядок особенностей близок к $1/2$, но, строго говоря, зависит от ориентации молекул жидкого кристалла в окрестности этих точек, и для его определения необходимо решить линейное обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка с переменными коэффициентами. Для учета особенностей построен специальный вычислительный алгоритм, над программной реализацией которого работа не окончена и продолжается в настоящее время.

4. Развитие вычислительных технологий моделирования катастрофических геодинамических природных процессов: анализ данных геомониторинга о предвестниках

В отчетный период выполнены работы по усовершенствованию вычислительной технологии анализа данных геомониторинга о предвестниках сильных землетрясений. В частности, продолжено изучение особенностей вариаций параметра эквивалентного уровня воды EWH (Equivalent Water Height) над контуром геоида по спутниковым измерениям космической системы GRACE в сейсмоактивных районах для выявления связи напряженно-деформированного состояния геосреды и процессов подготовки ожидаемого сильнейшего землетрясения. Орбитальные характеристики GRACE – полярная орбита, расстояние между парой спутников (порядка 200 км), период обращения около полутора часов [Flechtner F., Sneeuw N., Schuh W-D. (Eds.). Observation of the System Earth from Space – CHAMP, GRACE, GOCE and Future Missions. GEOTECHNOLOGIEN. Science Report. 2014. № 20].

Важно подчеркнуть, что, применительно к решению задачи выделения предвестников сильных землетрясений и их интерпретации, гравитационные аномалии Земли в системе GRACE измеряются в сантиметрах эквивалентной высоты водяного столба [Wahr J., Molenaar M., Bryan F. Time variability of the Earth's gravity field: Hydrological and oceanic effects and their possible detection using GRACE // Journal of Geophysical Research: Solid Earth. 1998. V. 103, Iss. B 12. P. 30205-30229]. Величина гравитационной аномалии определена через параметр расчетной модели – высоту эквивалентного водяного столба. Полученные измеренные параметры сравниваются со значениями гравитационного потенциала модели EIGEN-6C, привязанной к поверхности геоида. Применительно к океану это дополнительный тонкий слой воды в несколько сантиметров (примерно от -10 до +10 см).

В обзорной работе [Wouters B., Bonin J.A., Chambers D.P., Riva R.E.M., Sasgen I., Wahr J. GRACE, time-varying gravity, Earth system dynamics and climate change // Review Article Rep. Prog. Phys. 2014. V. 77. 41 p.] приводятся результаты исследований геофизических процессов, вносящих существенный вклад в гравитационные аномалии, которые регистрируются аппаратурой системы спутников GRACE. Тектонические, сейсмические и вулканические процессы или движение магмы внутри Земли приводят к перераспределению масс. Тектонические процессы достаточно медленные (это годы, десятилетия и больше), а сейсмические и вулканические – более быстрые, но их последствия регистрируются длительные периоды времени. Очевидно, что и глобальные движения земной атмосферы также могут вносить вклад в наблюдаемые гравитационные

аномалии. Таким образом, исследуемые природные процессы существенным образом отражаются в измеряемых гравитационных аномалиях.

Идея нашего исследования – это предложить характеристики, по которым можно разделить геофизические процессы на локальные и глобальные по степени влияния на гравитационное поле. Полагаем, что при решении этой задачи ключевым моментом является построение и анализ частотных распределений аномалий в виде гистограмм «помесячных» данных, а также полное частотное распределение гравитационных аномалий за период с 2003 по 2016 гг. [NASA. Available at: ftp://podaac-ftp.jpl.nasa.gov/allData/tellus/L3/ocean_mass/RL05/ascii/].

В результате комплексной обработки, на основе вычислительной технологии, большого объема данных наблюдений показано, что отдельные «месячные» гистограммы отличаются большим разнообразием, что видно из рис. 8. Более детальный анализ отдельных расчетных гистограмм свидетельствует, что среднее частотное распределение гравитационных аномалий имеет экспоненциальный характер.

Как отмечено выше «эквивалентная высота водяного столба» (EWH) является характеристикой вычислительной модели, т.е. не является физической величиной в полном смысле. Однако, опираясь на построенные гистограммы, можно определить такой параметр как информационная энтропия. Для этого отождествим частотные распределения за весь период наблюдения с распределением вероятностей величины

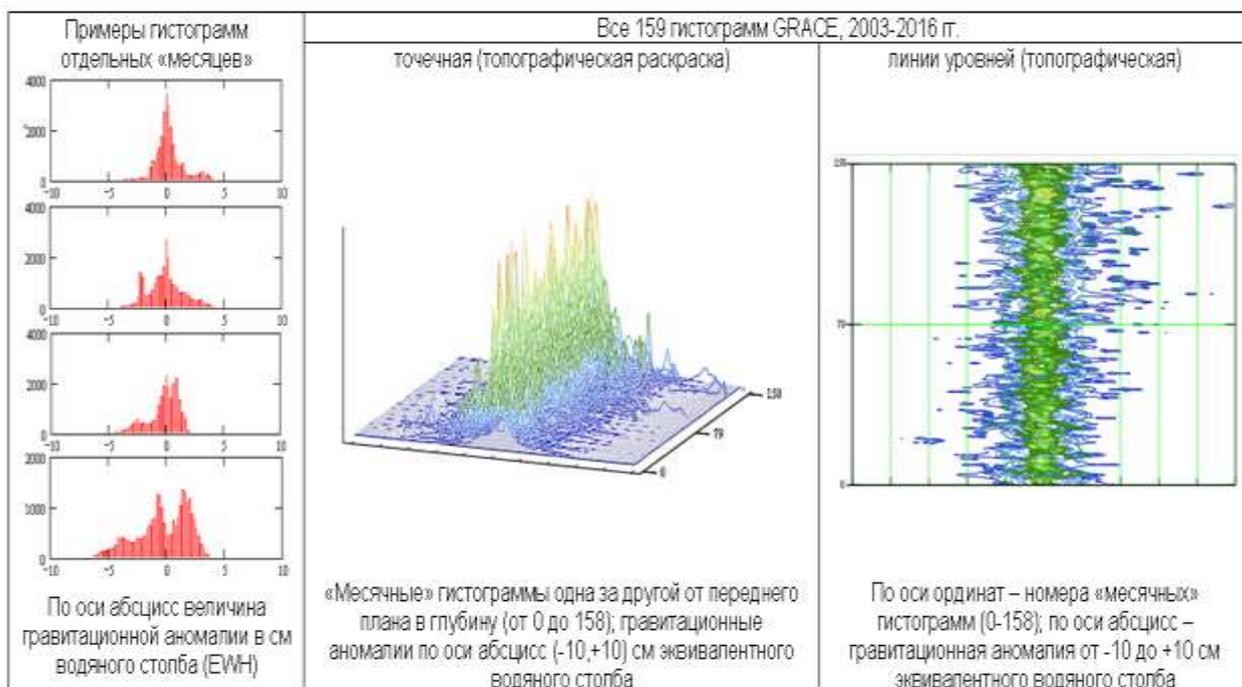


Рисунок 8 – Гистограммы отдельных файлов данных GRACE (OCEAN) и их совокупность за период 2003 – 2016 гг.

гравитационных аномалий. Это позволит предложить способ вычисления средней информационной энтропии отдельных месячных данных в глобальном масштабе и на локальном уровне, например, в очаговых зонах сильнейших землетрясений.

На рис. 9 представлены графики средней информационной энтропии в зависимости от размера очаговой области сильнейших землетрясений (магнитуды $M > 8$) за период с 2003 по 2016 гг. Анализ полученных графиков показывает, что с увеличением размеров очаговой области значение энтропии возрастает, а вблизи эпицентра данный параметр имеет минимальную величину. Таким образом, выполняется термодинамическое правило максимальной энтропии для системы в равновесии.

Изучались средние значения энтропии для сейсмоактивных районов Дальнего Востока (Курильские острова), Японии, Суматры (Индонезия) и Южной Америки (Перу, Чили) в зависимости от размеров соответствующей очаговой области. На рис. 9 можно видеть, что эти распределения имеют свои особенности для различных геофизических событий, например, для Суматры в 2004 и 2012 гг., а также для Чили в 2014 г. Эти исключения показывают, что прямая статистическая связь между гравитационными аномалиями, наблюдаемыми космической системой GRACE, и геодинамическими эффектами в процессе подготовки сильных землетрясений не так очевидна, как при сопоставлении с геодинамическими характеристиками. Роль отдельных геофизических факторов, которые вносят вклад в наблюдаемые гравитационные аномалии в процессе подготовки сильных землетрясений, еще предстоит выяснить.

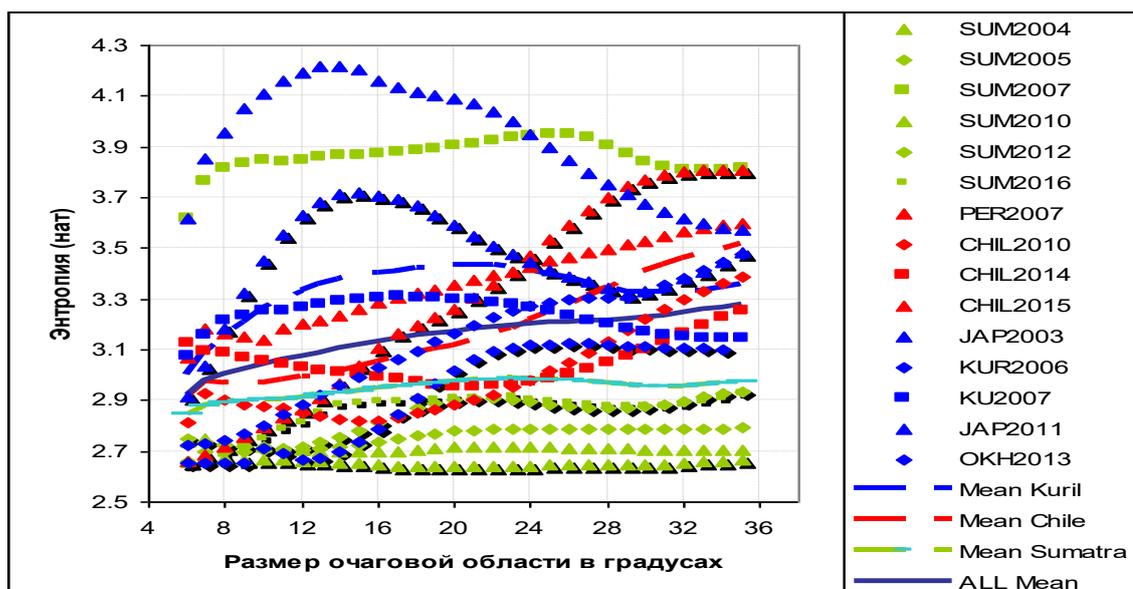


Рисунок 9 – Зависимость информационной энтропии от размера очаговой области в градусах (широты/долготы) и от эпицентра сильнейших землетрясений ($M > 8$) за 2003 – 2016 гг.

Статистическая обработка глобальной изменчивости гравитационного поля Земли за 2003 – 2016 гг. по данным GRACE показывает, что эта изменчивость имеет случайный характер с дифференциальным распределением вероятности, близким к форме Коши (Лоренца). Это означает, что в спутниковых данных отсутствует значимая систематическая ошибка. Источники изменчивости гравитационного поля над океанами на масштабе 10-летия имеют термодинамический, основанный на случайности, характер. При исследовании доминирующих природных процессов не наблюдается устойчивого тренда. В нашем исследовании не выявлена корреляция между глобальной изменчивостью гравитационного поля и глобальной сейсмичностью Земли в масштабе 10-летнего периода наблюдений. Это означает, что сильнейшие землетрясения случаются в результате квазилокальных геодинамических процессов.

5. Развитие дискретно-непрерывной модели движения людей: разработка эффективных алгоритмов расчета поля расстояний и их адаптация к современным высокопроизводительным программным архитектурам

В моделях индивидуально-поточного типа на каждом расчетном шаге для каждого человека определяется новая координата его положения на плоскости. Моделируется перемещение человека из начального положения до цели. При этом может быть задана последовательность целей. Когда достигнута последняя цель, человек изымается из расчета. Перемещение человека моделируется в плоскости, поэтому при решении практических задач сначала происходит распределение всех поверхностей, входящих в область моделирования и расположенных на разных уровнях по вертикали, на непересекающиеся в горизонтальной проекции условные этажи-плоскости. Целью/подцелью движения является заданная область, граница двух смежных областей или часть границы расчетной области, имеющая специальные условия мягкой стенки (в практических задачах это, как правило, выход из здания). В зависимости от набора целей, на этапе подготовки данных для последующего использования при определении положения каждого человека на новом расчетном шаге формируются, так называемые, поля расстояний. Поле расстояний определяется для каждого уникального маршрута найденного в процессе анализа исходных данных. Пример такого поля приведен на рис. 10. В текущей постановке задачи поля расстояний являются статическими. Фактически это означает некоторые ограничения в возможностях моделирования сценариев – заранее определенные маршруты не могут быть изменены в процессе

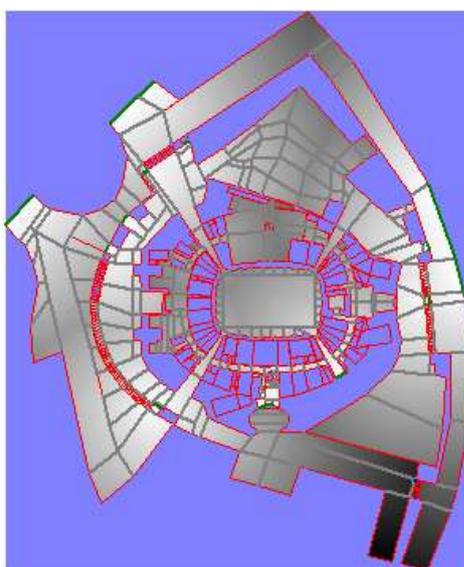


Рисунок 10 – Поле расстояний для стадиона Фишт
(1 этаж стадиона и прилегающая территория в пределах периметра безопасности)

моделирования. Поля расстояний считаются в узлах сетки, наложенной на расчетную область (см. рис. 11).

На каждом расчетном шаге положение каждого человека определяется на основе дискретизированного выражения для скорости как производной пути по времени. Сдвиг определяется как произведение оценки мгновенной скорости (скаляр) и определенного направления движения (вектор) на этом расчетном шаге. Для определения направления движения разработана специальная процедура, одним из параметров которой является расстояние до выхода, для определения которого используется соответствующее поле расстояний.

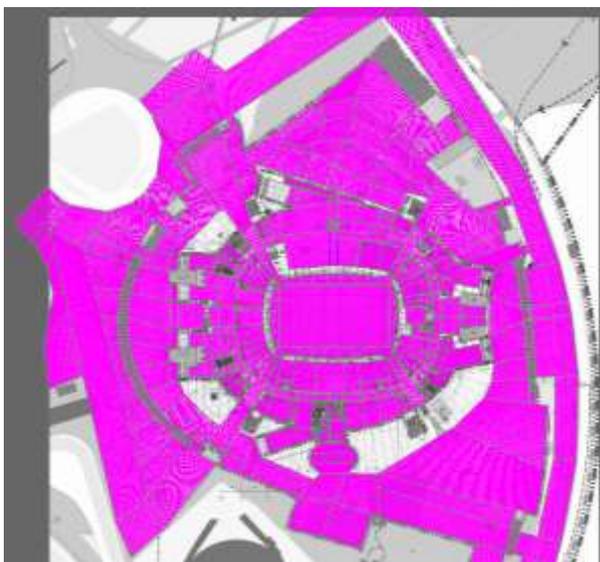


Рисунок 11 – Сетка для расчета поля расстояний для стадиона Фишт
(1 этаж стадиона и прилегающая территория в пределах периметра безопасности,
4 000 000 узлов, линейный размеры области 860 x 670 м²)

Вычислительная сложность задачи моделирования пешеходного движения для реальных объектов в основном обусловлена двумя обстоятельствами. Первое – это большое количество людей (до нескольких десятков тысяч на этаж), каждый из которых на каждом временном шаге расчета согласно модели взаимодействует как с ближайшими к нему людьми, так и с окружающими его элементами здания: стенами, проемами, лестницами, мебелью, выходами, вместе зачастую образующими достаточно сложную комбинацию проходов и препятствий. Второе – это большой объем данных, порождаемый при расчете полей расстояний, которых на каждый этаж может достигать до сотни сценариев в случае крупных стадионов; при этом общий объем этих полей в многоэтажном здании может превышать лимит памяти в 4Gb, которым ограничен любой процесс с 32-разрядной адресацией. Таким образом, параллельная реализация расчета

(особенно если иметь в виду в качестве цели расчет в режиме реального времени) является естественным и необходимым выбором, позволяющим в полной мере использовать ресурсы современных компьютеров и операционных систем. Моделирование движения людей в многоэтажном здании естественным образом разбивается на движение большого количества людей по этажу и сравнительно небольшого (в силу малой пропускной способности) количества людей по межэтажным лестницам. Таким образом, разнесение расчета по этажам на разные процессы с передачей между ними людей, перемещающихся с этажа на этаж, как решает проблему возможной нехватки памяти за счет распределения полей расстояний между несколькими процессами, так и позволяет более полно загрузить ядра процессора и тем самым ускорить счет. Фактически это функциональная декомпозиция по числу этажей. Для реализации здесь оптимально подходит парадигма MPI; она позволяет легко оперировать богатым набором функций обмена сообщениями, и, при должной настройке окружения, запускать расчет различных этажей не только в разных процессах, но и на разных компьютерах. В нашей системе была использована свободно распространяемая реализация MPICH2 [MPICH | High-Performance Portable MPI. URL: <http://www.mpich.org/>], существующая для платформы Windows.

Важное достоинство этой реализации состоит в том, что при ее использовании не требуется установки каких-либо дополнительных пакетов и нет необходимости в предварительной настройке программ. Все, что требуется, можно хранить в рабочем каталоге своей программы. Для версии MPICH2-1.4.1p1 это следующие файлы: mpich2.dll, mpich2mpi.dll, mpich2nemesis.dll, mpiexec.exe, smpd.exe, MPICH2-COPYRIGHT.rtf. Кроме того, ее легко использовать для разработки в среде Delphi, так как существует Delphi-версия заголовочного файла mpi.h, содержащая все необходимые константы и объявления функций. Схема MPI-запуска модуля расчета представлена на рис. 12.

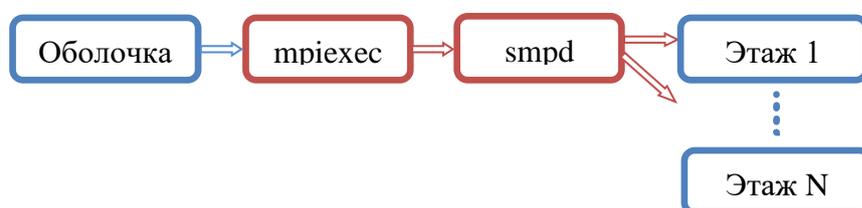


Рисунок 12 – Схема крупноблочного распараллеливания

Запуск происходит следующим образом: пользователь с помощью оболочки (wgrapp.exe) настраивает параметры расчета, выбирает входные файлы и формирует файл настроек, содержащий всю необходимую информацию. По команде пользователя

оболочка запускает программу `mpiexec.exe` с расчетными параметрами. Например, команда `mpiexec.exe -localonly -n 6 "D:\Projects\Fire\evacalc.exe" "D:\Projects\Fire\obj\G6\eva \mchs.ini"` MPI обеспечивает запуск расчета эвакуации на локальном компьютере шестью MPI-процессами `evacalc.exe` (по одному на этаж здания, описанного в файле `mchs.ini`).

Автоматически запускается программа `smpd.exe`, обеспечивающая межпроцессное взаимодействие, запускает собственно процессы `evacalc.exe` и начинается расчет.

При расчете процессы используют коллективные взаимодействия и коммуникации «точка-точка» для обмена между собой положениями людей и другими данными. Передача положений производится один раз на каждом временном шаге. После этого результаты расчета (траектории движения людей и статистические данные) собираются на нулевом процессе, объединяются и сохраняются на диск для работы других модулей системы. По окончании расчета программы `mpiexec.exe` и `smpd.exe` автоматически прекращают работу, оболочка получает статус завершения и информирует пользователя о результатах. Еще одно важное достоинство этой реализации состоит в том, что при запуске всех процессов на том же компьютере, что и оболочка, все процессы могут показывать свои окна, и, таким образом, появляется возможность визуального контроля хода расчета. При запуске на другом компьютере/компьютерах MPICH2-процессы в норме запускаются без своего окна, скрыто; но есть возможность настроить там запуск `smpd.exe` с ключом `-d`, чтобы увидеть окна процессов.

Сочетание описанных выше подходов позволяет полностью использовать ресурсы компьютера с многоядерным процессором (процессорами). Так, при расчете эвакуации из многоэтажных зданий в основном работает крупноблочное распараллеливание, а количество нитей ограничено одной-двумя на процесс из-за нехватки ядер; при расчете одного этажа, напротив, количество нитей будет соответствовать количеству процессорных ядер.

Перед началом моделирования процессами полностью независимо друг от друга производится построение полей расстояний. Параллельная эффективность при выполнении этой существенной вычислительноемкой операции практически равна единице (если количество физических ядер там, где производится расчет, не меньше количества этажей).

Учитывая, что без декомпозиции по пространству некоторые расчетные конфигурации просто не поместились бы в память одного 32-разрядного процесса, можно считать эффективность крупноблочного распараллеливания высокой, а использование развиваемого подхода полностью оправданным.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

За период 2019 г. выполнен полный цикл исследований, запланированных по данному проекту. В ходе его выполнения получены результаты, приоритет которых подтверждается рейтинговыми публикациями коллектива исполнителей проекта в ведущих Российских и зарубежных научных журналах. Разработанные программные коды для решения прикладных задач на высокопроизводительных вычислительных системах (кластерах, графических сопроцессорах и суперкомпьютерах гибридной архитектуры) прошли государственную регистрацию в Роспатенте, получив соответствующие сертификаты.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Научные публикации в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования

1. Садовский В.М., Гузев М.А., Садовская О.В., Qi Ch. Моделирование пластической деформации на основе теории ортотропного континуума Коссера // Физическая мезомеханика. – 2019. – Т. 22, № 2. – С. 59-66. DOI: 10.24411/1683-805X-2019-12005
2. Annin B.D., Sadovskii V.M., Petrakov I.E., Vlasov A.Yu. Strong Bending of a Beam from a Fibrous Composite, Differently Resistant to Tension and Compression // Journal of Siberian Federal University: Mathematics & Physics. – 2019. – V. 12, Iss. 5. – P. 533-542. DOI: 10.17516/1997-1397-2019-12-5-533-542
3. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V. Supercomputing analysis of fan-shaped waves in the Earth's crust at the depths of seismic activity // Materials Physics and Mechanics. – 2019. – V. 42, No. 3. – P. 330-339. DOI: 10.18720/MPM.4232019_8
4. Simonov K.V., Kashkin V.B., Rubleva T.V., Krasnoshekov K.V. Analysis of GRACE satellite measurements over seismically active areas of the strongest earthquakes // E3S Web of Conferences (Regional Problems of Earth Remote Sensing – RPERS 2018). – 2019. – V. 75. – P. 02007-1–02007-5. DOI: 10.1051/e3sconf/20197502007
5. Pustovoi N.V., Grishanov A.N., Matveev A.D. Multi-grid finite elements in calculations of multilayer oval cylindrical shells // Siberian Journal of Science and Technology. – 2019. – V. 20, No. 2. – P. 174-182. DOI: 10.31772/2587-6066-2019-20-2-174-182
6. Матвеев А.Д. Построение многосеточных конечных элементов для расчета оболочек, пластин и балок на основе образующих конечных элементов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета: Механика. – 2019. – № 3. – С. 48-57. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.3.05
7. Миронов В.А., Перетокин С.А., Симонов К.В. Развитие и использование методов анализа сейсмической опасности // Информатизация и Связь. – 2019. – № 2. – С. 27-35. DOI: 10.34219/2078-8320-2019-10-2-27-35
8. Мацулев А.Н., Симонов К.В. Выделение закономерностей в данных о предвестниках сильных землетрясений на основе метода «SSA» // Информатизация и Связь. – 2019. – № 2. – С. 45-49. DOI: 10.34219/2078-8320-2019-10-2-45-49
9. Литвинцев К.Ю., Кирик Е.С., Ягодка Е.А. Проблемы применения численного моделирования при определении расчетных величин пожарного риска // Вычислительные технологии. – 2019. – Т. 24, № 4. – С. 56-69.

DOI: 10.25743/ICT.2019.24.4.005

10. Kirik E., Vitova T., Malyshev A. Turns of different angles and discrete-continuous pedestrian dynamics model // *Natural Computing*. – 2019. – V. 18, Iss. 4. – P. 875-884.
DOI: 10.1007/s11047-019-09764-4
11. Zotin A., Simonov K., Matsulev A., Kurako M. Evaluation of gravitational anomalies in the areas of strongest earthquakes by satellite measurements GRACE // *Procedia Computer Science*. – 2019. – V. 159. – P. 1642-1651. DOI: 10.1016/j.procs.2019.09.334
12. Sadovskaya O.V., Sadovskii V.M. Supercomputing analysis of seismic efficiency of the electromagnetic pulse source “Yenisei” // *AIP Conference Proceedings*. – 2019. – V. 2164. – P. 110011-1–110011-9. DOI: 10.1063/1.5130856
13. Varygina M.P., Chentsov E.P. Modeling of seismic wave propagation in block medium with fractured interlayers // *AIP Conference Proceedings*. – 2019. – V. 2164. – P. 110013-1–110013-8. DOI: 10.1063/1.5130858
14. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V., Smolekho I.V. Numerical modeling of the dynamic processes in liquid crystals under the action of thermomechanical and electrostatic perturbations // *AIP Conference Proceedings*. – 2019. – V. 2164. – P. 090006-1–090006-8.
DOI: 10.1063/1.5130836

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Выписка из плана научно-исследовательской работы на 2019 год

Содержание работы	Планируемый результат выполнения работы
<p>1. Построение определяющих соотношений разного уровня сложности для описания деформирования многослойных анизотропных оболочек вращения из композитов при наличии неидеального контакта между слоями. Развитие численно-аналитических методов расчета замкнутых оболочек вращения из композиционных материалов под действием квазистатических нагрузок.</p> <p>2. Разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и компьютерных программ для расчета динамики упругих микрополярных пластин и оболочек на многопроцессорных ЭВМ гибридной архитектуры.</p> <p>3. Разработка вычислительной технологии для анализа нестационарных процессов в жидких кристаллах с учетом моментных взаимодействий на высокопроизводительных системах с графическими ускорителями.</p> <p>4. Развитие вычислительных технологий моделирования катастрофических геодинамических природных процессов: анализ данных геомониторинга о предвестниках</p>	<p>Проект направлен на развитие приоритетных исследований, связанных с применением высокопроизводительных вычислительных систем при реализации сложных математических моделей. Цель проекта состоит в разработке эффективных методов математического моделирования природных и техногенных процессов и систем на основе применения высокопроизводительных вычислений на суперкомпьютерах новых поколений. В результате выполнения проекта будут развиты методы исследования задач моделирования свойств вещества из основополагающих принципов <i>Ab initio</i>; пространственных задач механики материалов с микро- и наноструктурой и задач гидродинамики, решаемых на рекордно мелких сетках; задач обработки больших массивов геодинамических данных о природных волновых процессах, происходящих в земной коре, с выработкой прогнозных решений. Для успешного выполнения научной части проекта предполагается провести работы по реконструкции единой гетерогенной вычислительной среды коллективного доступа на базе суперкомпьютерных ресурсов ИВМ СО РАН с централизованным динамическим управлением и распределением, а также автоматизацией важнейших функций контроля и управления. Планируется провести оптимизацию состава системного и прикладного программного обеспечения вычислительных комплексов для повышения</p>

<p>сильных землетрясений, исследование распространения веерных волн на суперкомпьютерах кластерной архитектуры.</p> <p>5. Развитие дискретно-непрерывной модели движения людей: разработка эффективных алгоритмов расчета поля расстояний и их адаптация к современным высокопроизводительным программным архитектурам.</p>	<p>эффективности их использования.</p>
---	--