

МОДЕЛИ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

УДК 539.4, 519.6

О РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИИ ВЫЧИСЛЕНИЙ В АЛГОРИТМЕ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНЫХ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ¹

Левин В.А.*, Зингерман К.М.**, Прокопенко А.С.*

* МГУ им. М.В. Ломоносова, механико-математический факультет

** Тверской государственный университет

Поступила в редакцию 10.12.2012, после переработки 20.01.2013.

Описывается методика и алгоритм численной оценки механических характеристик пористых материалов. Рассматриваются материалы со статистически равномерным распределением и изотропным расположением пор. Эффективный материал считается линейно упругим, свойства ищутся в виде закона Гука. На основе данного алгоритма разработан программный модуль. Проанализирована производительность этого модуля и применено распараллеливание вычислений с использованием технологии CUDA с целью существенного уменьшения времени расчета. Выполнены расчёты эффективных свойств пенобетона. Исследована зависимость эффективных характеристик от коэффициента пористости.

A method and algorithm for numerical estimation of effective properties of porous materials are described. The materials with statistically homogeneous and isotropic distribution of pores are considered. It is assumed that the effective material is linear elastic, and its properties are described by Hooke's law. The program module is developed on the base of this algorithm. The performance of this module is analyzed, and the optimization is performed by parallelization using CUDA technique. Effective properties of foam concrete are analyzed. Dependence of effective properties on porosity is investigated.

Ключевые слова: теория упругости, эффективные свойства, численные прочностные расчёты, CUDA, GPU, высокопроизводительные вычисления, метод конечных элементов.

Keywords: theory of elasticity, effective properties, numerical strength analysis, CUDA, GPU, high-performance computations, finite-element method.

¹Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект №11-08-01284-а) и частично при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Государственный контракт №07.524.11.4019 на выполнение ОКР).

Введение

Большинство пористых материалов характеризуется нерегулярностью расположения пор. Форма пор сложна и зависит от множества факторов, возникающих при изготовлении материала. В частности, в одних материалах поры являются открытыми, в других – замкнутыми [3]. В пористых материалах, изготовленных из несферических частиц разного размера, форма пор носит ярко выраженный случайный характер. Нерегулярно расположенные поры различной формы могут возникать в материале и в процессе разрушения [10]. Расчет напряженно-деформированного состояния подобных структур крайне сложен. Однако во многих случаях нет необходимости выполнять детальный анализ напряженно-деформированного состояния в таком материале, а достаточно вычислить его осредненные (эффективные) механические свойства [18, 23, 25, 27]. Для этого в материале выделяется представительный объем, решается краевая задача теории упругости для этого объема при заданных на его границе перемещениях или напряжениях, осредняются напряжения и деформации по этому объему и строится зависимость между осредненными деформациями и напряжениями, которая и представляет собой эффективные определяющие соотношения. Чем больше отношение этого объема к характерному объему поры, тем точнее будут результаты. Однако с увеличением этого отношения растет и количество конечных элементов, на которые разбивается представительный объем при расчете, а следовательно, возрастают требования к вычислительным ресурсам компьютера. Кроме того, возникает проблема задания формы и расположения пор в представительном объеме. Можно либо получить данные о расположении пор посредством сканирования образца реального материала (а эта процедура может быть дорогостоящей), либо разрабатывать для этой цели специальные алгоритмы, которые могут быть весьма нетривиальными, особенно в случае, когда пористость велика [7]. Еще один возможный подход – замена осреднения по представительному объему осреднением по ансамблю реализаций. В этом случае рассматривается небольшой представительный объем, сторона которого соизмерима с характерным размером пор. Осуществляется расчет эффективных характеристик для различных вариантов расположения пор в этом объеме с использованием аналитических [16, 22, 34] или численных [19] методов, например, метода конечных элементов [8, 9, 20], после чего полученные результаты осредняются таким образом, чтобы средняя по ансамблю пористость соответствовала коэффициенту пористости исходного материала [28, 29].

Вышеприведенный подход осложняется тем, что даже структура, содержащая всего несколько пор, может иметь сложную форму. Вычисление свойств одной конфигурации занимает длительное время, а для более точного описания характеристик пористого материала требуется произвести расчёт на нескольких сотнях конфигураций. Однако специфика задачи допускает эффективное распараллеливание процесса вычисления, что позволило добиться значительного прироста производительности за счёт использования вычислительных мощностей графических процессоров (GPU).

1. Алгоритм вычисления эффективных механических свойств пористых материалов

Построение эффективных определяющих соотношений осуществляется на основе известных общих принципов разработанных такими учёными, как Т.Д. Шермергор [23], Б.Е. Победря [18], М. Качанов [27], А.С. Вавакин [6] и другими [11, 12, 13, 29, 33].

В материале выделяется некоторый представительный объём (в двумерном случае площадь [13]), по механическому поведению которого при нагружении можно судить о свойствах материала в целом. Для этого объёма (площади) решается статическая задача нелинейной упругости при заданных перемещениях на его границе. Затем напряжения осредняются по представительному объёму (площади) и эффективные определяющие соотношения строятся как зависимость между средними деформациями и напряжениями. Данная методика основана на предположении о равенстве средних напряжений по области для эффективного и исходного материалов при одинаковых перемещениях граней [11, 13].

Дадим определение эффективного материала. Пусть на внешней границе представительного объёма, выделенного в недеформированной конфигурации в исходном материале, заданы перемещения. Под **эффективным** материалом будем понимать однородный материал, такой, что если этим материалом заполнить до деформации представительный объём, включая поры, и задать на его границе те же самые перемещения граней, то средние напряжения по исходному и эффективному материалам совпадут.

Приведём алгоритм построения эффективных определяющих соотношений для пористого упругого материала при конечных деформациях с учётом выдвинутых предположений.

В пористом теле, в недеформированной конфигурации, выделяется представительный объём V_0 и решается краевая задача нелинейной упругости [11] для этого объёма с заданным на его границе условием

$$u|_0 = \overset{0}{R} \cdot (\Psi^e - I), \quad (1)$$

где ψ^e – заданный постоянный (не зависящий от координат) тензор второго ранга, представляющий собой аффинор деформаций эффективного материала; $\overset{0}{R}$ – радиус-вектор частицы в начальном состоянии; u – вектор перемещений; I – единичный тензор; Γ_0 – граница объёма в начальном состоянии. Решение этой задачи, в частности, позволяет найти тензор напряжений σ . Далее определяется тензор напряжений σ^e эффективного материала по формуле

$$\sigma^e = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} N \cdot \sigma R d\Gamma, \quad (2)$$

где R – радиус-вектор частицы в текущем состоянии, Γ – граница объёма в текущем состоянии; N – нормаль к границе в текущем состоянии.

Данная формула получается осреднением тензора напряжений по представительному объёму и применением формулы Гаусса-Остроградского. Приведем ее вывод. Согласно определению эффективного материала,

$$\sigma^e = \frac{1}{V} \int_V \sigma dV. \quad (3)$$

Далее используем тождество

$$\nabla \cdot (\sigma R) = (\nabla \cdot \sigma)R + \sigma \cdot (\nabla R)^* = (\nabla \cdot \sigma)R + \sigma \cdot I = \sigma. \quad (4)$$

Интегрируя (4) по объему V и разделив полученное равенство на этот объем, получаем

$$\frac{1}{V} \int_V \sigma dV = \frac{1}{V} \int_V \nabla(\sigma R) dV. \quad (5)$$

Далее пользуемся формулой Гаусса-Остроградского и получаем равенство

$$\frac{1}{V} \int_V \nabla(\sigma R) dV = \frac{1}{V} \int_{\Gamma} N \cdot \sigma R d\Gamma, \quad (6)$$

из которого при учете (5) и (3) следует формула (2).

Важно заметить, что в данной формуле используется интегрирование по объему тела в конечном состоянии.

После этого вычисляется тензор деформаций Грина и второй тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа эффективного материала по формулам [15]:

$$E^e = \frac{1}{2} (\Psi^e \cdot \Psi^{e*} - I), \quad (7)$$

$$\Sigma^e = (\det \Psi^e) (\Psi^e)^{* -1} \cdot \sigma^e \cdot (\Psi^e)^{-1}, \quad (8)$$

после чего эффективные определяющие соотношения строятся в виде зависимости между E^e и Σ^e :

$$\Sigma_{mn}^e = C_{mnij}^{(0)} E_{ij}^e + C_{mni jkl}^{(1)} E_{ij}^e E_{kl}^e. \quad (9)$$

При реализации данного алгоритма удобнее задавать не аффиноор деформаций эффективного материала, а тензор деформаций Грина, и через тензор Грина уже вычислять аффиноор. Но аффиноор – несимметричный тензор второго ранга, и он определяется неоднозначно по симметричному тензору Грина. Поэтому мы задаём одну из компонент аффиноора равной нулю.

Рассмотрим схему осреднения по ансамблю (которая приближенно моделирует статистически равномерное распределение пор). Будем считать, что все поры имеют круговую в недеформированном состоянии форму и одинаковы по размеру. Пусть представительная область V есть куб, стороны a которого параллельны осям координат. В области S строится равномерная сетка с узлами $(x^{(i)}, y^{(j)}, z^{(k)})$, где $x^{(i)} = h \cdot (i + \frac{1}{2})$, $y^{(j)} = h \cdot (j + \frac{1}{2})$, $z^{(k)} = h \cdot (k + \frac{1}{2})$; $i = 0, \dots, N-1$; $j = 0, \dots, N-1$; $k = 0, \dots, N-1$; $h = \frac{a}{N}$; N – заданное натуральное число – параметр сетки (рассматриваются сетки для $N = 2$ и $N = 3$). Будем рассматривать только случаи, когда центры пор располагаются в узлах сетки (число пор не фиксируется). Для

каждого из этих случаев определяются эффективные модули, затем проводится осреднение. Для того, чтобы поры не пересекали и не касались границы V и контуров других пор, достаточно выполнения условия $R < \frac{h}{2}$.

Пусть ρ — вероятность наличия поры с центром в некотором узле. Будем считать, что эта вероятность не зависит от наличия пор с центрами в других узлах. С учётом сделанных предположений коэффициент пористости P может быть определён по формуле

$$P = \rho \frac{4\pi R^3}{3h^3}.$$

Выразим отсюда ρ через коэффициент пористости:

$$\rho = P \frac{3h^3}{4\pi R^3}.$$

Определим теперь вероятность $\rho^{(k)}$ того, что в области V имеется ровно k пор. С учётом сделанных предположений

$$\rho^{(k)} = C_n^k \rho^k (1 - \rho)^{n-k}.$$

Здесь $n = N^3$ — число узлов в V . Пусть $\langle C \rangle$ — один из упругих модулей, полученный осреднением по всевозможным случаям расположения пор в V , а $\langle C \rangle|_k$ — соответствующий модуль, полученный осреднением по тем случаям, для которых число пор в V равно k , тогда

$$\langle C \rangle = \sum_{k=0}^n \langle C \rangle|_k \rho^{(k)}.$$

Отметим, что в случае достаточно малой вероятности ρ можно пренебречь эффектами взаимовлияния пор внутри V без значительной потери точности.

2. Распараллеливание вычислений

Используя выкладки предыдущего параграфа, несложно посчитать, что для определения эффективных свойств одного пористого материала, если задать параметр сетки $N = 2$, в трехмерном случае требуется рассчитать 256 различных конфигураций, для расчёта каждой из которых необходимо решить 12 типов задач упругости (с 6 типами нагрузок и минимум двумя различными величинами нагрузок для каждого типа). Решение каждой задачи даже на современных компьютерах может достигать нескольких минут. Следовательно, для определения эффективных свойств с помощью данного алгоритма требуется несколько суток. Такая ситуация не удовлетворительна, если, например, необходимо построить график зависимости характеристик материала от его коэффициента пористости.

Рассмотрим более детально самые ресурсозатратные этапы вычислений. Задача решается методом конечных элементов. Решение задач нелинейной теории упругости сводится к решению нелинейной системы алгебраических уравнений [9, 13, 14]. Решение этой системы находится с использованием метода Ньютона [2]. Данный процесс состоит из трех основных этапов:

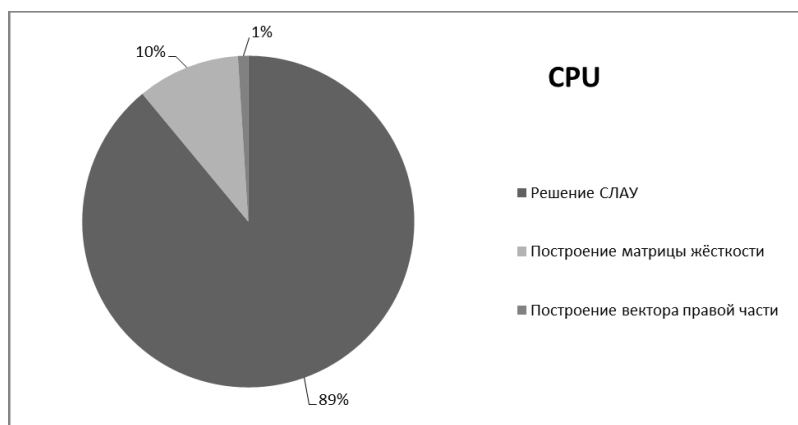


Рис. 1: Распределение времени расчёта тестовой задачи с использованием САЕ-системы ФИДЕСИС (количество узлов расчётной сетки $\sim 100\,000$)

1. Составление линейаризованной системы уравнений.
2. Составление вектора нагрузок.
3. Решение системы линейных уравнений с полученной матрицей и вектором правой части.

Эти этапы наиболее требовательны к вычислительным ресурсам. При увеличении числа узлов конечно-элементной сетки количество арифметических операций, необходимых для расчета, возрастает квадратично. Отметим, что все этапы решения распадаются на множество мелких подзадач с независимыми данными. Это позволяет применить массивно-параллельный подход к решению задачи. Применение технологии CUDA позволяет уменьшить время расчета в несколько раз [5, 30], причем с увеличением количества узлов конечно-элементной сетки ускорение вычислений по сравнению с расчетом без распараллеливания увеличивается.

Рассмотрим возможности распараллеливания вычислений на каждом из перечисленных этапов.

1. Составление линейаризованной системы уравнений [8, 20].

Глобальная матрица системы уравнений складывается из локальных матриц, составленных для каждого элемента расчетной сетки. Для каждого элемента расчетной сетки строится локальная матрица, которая не зависит от локальных матриц на других элементах. После этого элементы локальных матриц прибавляются к соответствующим элементам глобальной матрицы. В параллельной версии программы составление локальных матриц производится параллельно. Каждый поток вычисляет локальную матрицу для одного элемента. Затем с помощью атомарных операций они прибавляются к глобальной матрице. Перед вычислением все данные о сетке, о свойствах материала и о граничных условиях копируются в память графического процессора (GPU).

2. Составление вектора нагрузок.

Составление вектора правой части по существу аналогично составлению матрицы линейаризованной системы. Для каждого элемента расчетной сетки строится свой локальный вектор, после чего они все прибавляются к глобальному вектору.

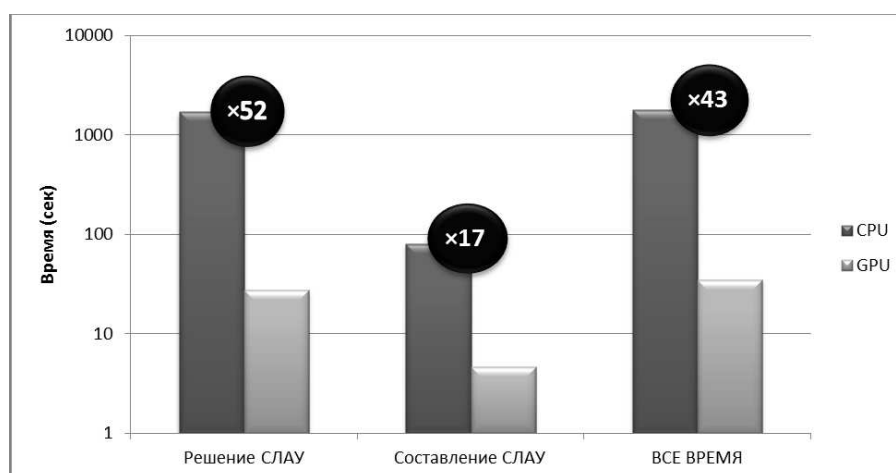


Рис. 2: Сравнение времени выполнения различных этапов решения задачи упругости на последовательной и параллельной версиях программы

3. Решение системы линейных уравнений с полученной матрицей и вектором правой части.

Для решения больших систем линейных алгебраических уравнений используются итерационные методы [1, 2, 4, 31, 32]. Они основаны на линейных операциях с матрицами и векторами. Эти операции линейной алгебры легко распараллеливаются на графических процессорах [24].

Данный подход к распараллеливанию реализован в программном модуле САЕ-системы ФИДЕСИС [26] с использованием метода конечных элементов. В результате распараллеливания удалось достичь следующих результатов:

В качестве тестовой решалась следующая задача. Рассматривалась представительная область в виде куба с единичной стороной и сферической полостью в его центре. Диаметр поры равен 0.9 стороны куба. На границе куба задан аффинор деформаций, соответствующий сдвигу в плоскости XY на 0.4%.

На рисунках 3 и 4 представлены результаты расчётов для тестовой задачи, использованной для оценки производительности программы. Представлены поля компонент тензора напряжений σ_{xx} и σ_{yy} на поверхности поры (изображено сечение поры, проходящее через её центр и перпендикулярное оси OY).

3. Результаты расчётов эффективных характеристик

С помощью разработанного модуля проведён ряд численных экспериментов по оценке эффективных свойств пенобетона. Построена зависимость эффективного модуля Юнга и коэффициента Пуассона от коэффициента пористости материала. На рисунках 5 и 6 приведены графики этих зависимостей. При исследовании рассматривались всевозможные конфигурации расположения пор с центрами в узлах сетки, с параметром сетки (количеством узлов на сторону представительного объёма) $N = 2$. Модуль Юнга исходного материала равен 10 ГПа, а коэффициент Пуассона равен 0.33.

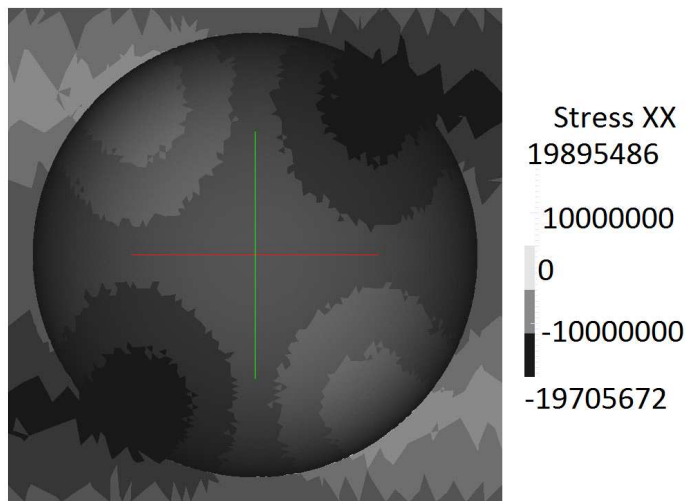


Рис. 3: Распределение поля напряжений (компонента σ_{xx}) при сдвиге в плоскости xu для представительного объёма с одним отверстием. Сечение плоскостью, перпендикулярной оси Oy

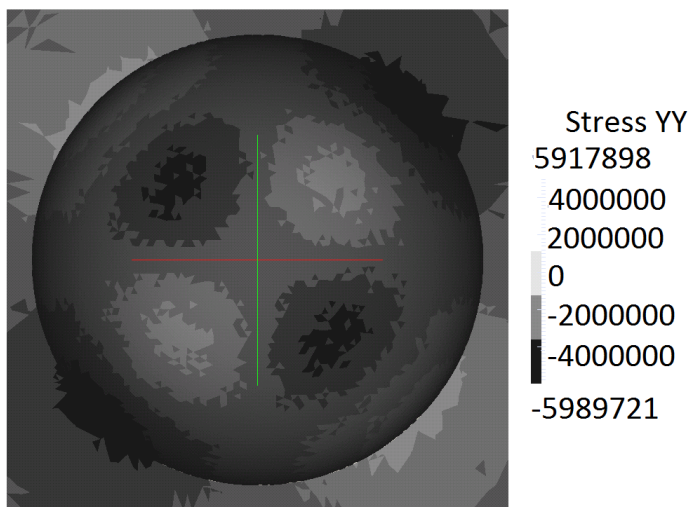


Рис. 4: Распределение поля напряжений (компонента σ_{yy}) при сдвиге в плоскости xu для представительного объёма с одним отверстием. Сечение плоскостью, перпендикулярной оси Oy

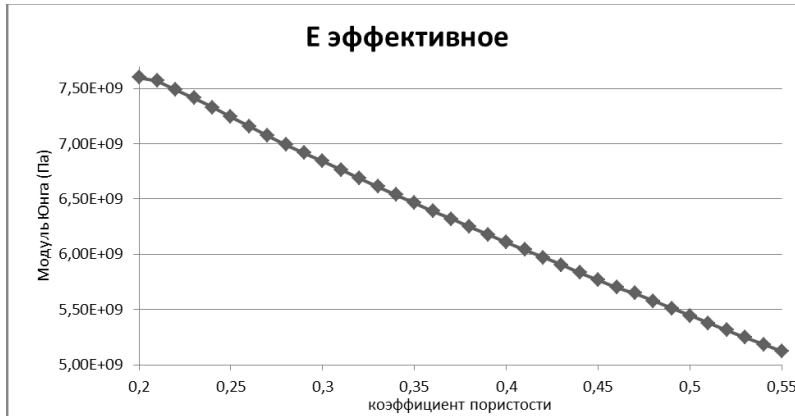


Рис. 5: Зависимость модуля Юнга эффективного материала от коэффициента пористости

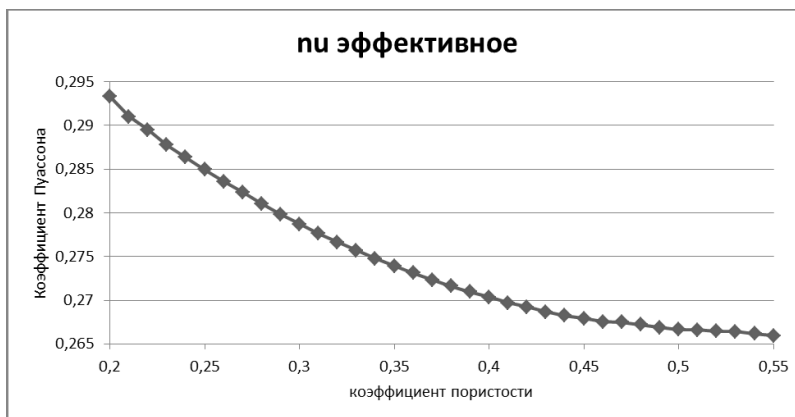


Рис. 6: Зависимость коэффициента Пуассона эффективного материала от коэффициента пористости

Как и ожидалось, при увеличении пористости модуль Юнга уменьшается. При большей пористости материал в данном случае становится более сжимаемым, о чем свидетельствует уменьшение коэффициента Пуассона.

Заключение

Разработаны алгоритмы определения эффективных характеристик пористых материалов для случая статистически равномерного изотропного распределения пор. Эти алгоритмы реализованы с использованием параллельных вычислений, что позволило проводить расчет эффективных характеристик с учётом большого количества вариантов расположения пор. Исследованы эффективные характеристики пористых материалов и их зависимость от коэффициента пористости.

Список литературы

- [1] Баландин М.Ю. Шурина Э.П. Методы решения СЛАУ большой размерности.
- [2] Бахвалов И. С, Жидков Н П . Кобельков Г.М. Численные методы. — М: Наука, 1987. - 630 с.
- [3] Берлин А.А., Шутов Ф.А. Химия и технология газонаполненных высокополимеров. - М.: Наука, 1980. - 504 с.
- [4] Богачёв К.Ю. Методы решения линейных систем и нахождения собственных значений.
- [5] Боресков А. В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA // ДМК Пресс, 2010. – 232 с.
- [6] Вавакин А.С, Салганик Р.Л. Об эффективных характеристиках неоднородных сред с изолированными неоднородностями // Изв. АН СССР Мех те. тела 1975, № 3. С 65-75.
- [7] Гаришин О.К. Геометрический синтез и исследование случайных структур// Структурные механизмы формирования механических свойств зернистых полимерных композитов. Екатеринбург, 1997. С. 48-81.
- [8] Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М., Мир, 1975.
- [9] Левин В. А., Калинин В. В., Зингерман К. М., Вершинин А. В. Развитие дефектов при конечных деформациях. Компьютерное и физическое моделирование. / Под ред. В. А. Левина. – М., Физматлит, 2007. – 392 с.
- [10] Левин В. А., Морозов Е. М., Матвиенко Ю. Г. Избранные нелинейные задачи механики разрушения. М., Физматлит, 2004. – 408 с.
- [11] Левин В.А., Зингерман К.М. О построении эффективных определяющих соотношений для пористых упругих материалов при конечных деформациях и их наложении // Доклады РАН. 2002. Т. 382, № 4. С. 482-487.

- [12] Левин В.А., Лохин В.В., Зингерман К.М. Об оценке эффективных характеристик пористых материалов при больших деформациях // Вестн. МГУ Сер. Матем., мех 1996, № 6. С. 48-50
- [13] Левин В.А., Лохин В.В., Зингерман К.М. Об одном способе оценки эффективных характеристик пористых тел при конечных деформациях // Изв. РАН Мех тв. тела. 1997. № 4. С 45-50.
- [14] Ломакин В.А. Статистические задачи механики твёрдых деформируемых тел. М.: Наука, 1970. 139 с.
- [15] Лурье А. И. Нелинейная теория упругости. М., Наука, 1980. – 512 с.
- [16] Лурье. А. И. Теория упругости. М., Наука, 1970. – 940 с.
- [17] Победря Б.Е., Георгиевский Д.В. Основы механики сплошной среды. Курс лекций. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006 - 272 с.
- [18] Победря Б.Е. Механика композиционных материалов. — М.: Изд-во МГУ, 1984.-336 с.
- [19] Победря Б.Е. Численные методы в теории упругости и пластичности. — М.: МГУ, 1995.
- [20] Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М., Мир, 1979.
- [21] Седов Л.И. Введение в механику сплошной среды. — М.: Физматгиз, 1962. - 284 с.
- [22] Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 2. — М. Наука, 1994 —528 с.
- [23] Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. — М.: Наука, 1977. — 399 с.
- [24] Bell N., Garland M. Efficient Sparse Matrix-Vector Multiplication on CUDA.
- [25] Hashin Z. The elastic moduli of heterogeneous materials. – J. Appl. Mech., 1962, v.29, p. 143.
- [26] <http://cae-fidesys.ru>
- [27] Kachanov M., Tsukrov I., Shafiro B. Effective Properties of Solids with Randomly Located Defects / In: Probabilities and Materials / Ed. by D. Breusse. Kluwer Publ.: 1994. P. 225-240.
- [28] Levin V.A., Zingermann K.M. Effective Constitutive Equations for Porous Elastic Materials at Finite Strains and Superimposed Finite Strains// Trans. ASME. Journal of Applied Mechanics. 2003. Vol. 70, No. 6. P.809–816.
- [29] Levin V.A., Lokhin V.V., Zingerman K.M. Effective elastic properties of porous materials with randomly dispersed pores. Finite deformation // Trans. ASME. J. Appl. Mech. 2000. V. 67, No. 4. P. 667-670.
- [30] NVIDIA CUDA C Programming Guide // Version 4.0 March 2011.

- [31] Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. Second edition, SIAM, Philadelphia, 2003.
- [32] Shewchuk R. An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain Pittsburg, 1994
- [33] Tsukrov I., Novak J. Effective Elastic Properties of Solids with Defects of Irregular Shapes // International Journal of Solids and Structures, v. 39, pp. 1539–1555, 2002.
- [34] Tsukrov I., Kachanov M. Stress concentrations and microfracturing patterns in a brittle-elastic solid with interacting pores of diverse shapes // Intern. J. Solids and Structures. 1997. V. 34, No. 22. P. 2887–2904.