

На правах рукописи

Егорова Мария Сергеевна

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ТЕЧЕНИЙ СЖИМАЕМЫХ СРЕД
МЕТОДОМ SPH С ПОМОЩЬЮ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО
ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Егорова

Москва — 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном унитарном предприятии «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Паршиков Анатолий Николаевич

Официальные оппоненты: **Головизнин Василий Михайлович**, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», профессор кафедры вычислительных методов факультета вычислительной математики и кибернетики

Савенков Евгений Борисович, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук», ведущий научный сотрудник сектора № 3 отдела № 11

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук

Защита состоится «__» _____ 2019 г. в __ час. __ мин. на заседании диссертационного совета Д 212.141.15 при Московском государственном техническом университете имени Н.Э. Баумана по адресу: 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1, зал Ученого совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана и на сайте <http://www.bmstu.ru>.

Автореферат разослан «__» _____ 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат технических наук, доцент



Аттетков
Александр
Владимирович

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Нестационарные задачи механики сплошной среды в экстремальных состояниях характеризуются наличием значительных градиентов давления и скорости, быстрыми изменениями пространственного распределения вещества с сопутствующим движением контактных и свободных границ и присутствием в среде контактных разрывов плотности. Такие условия встречаются при моделировании задач высокоскоростного соударения тел, прохождения ударных волн в среде неоднородной мезоструктуры, разрушения хрупких материалов при ударном сжатии, моделировании распространения детонации в пористых материалах. Для детального понимания физики происходящих процессов необходимо прямое математическое моделирование на мезомасштабе, т. е. с учетом внутренней структуры среды, без привлечения осредняющих моделей, что с использованием традиционных сеточных методов затруднено.

Решением проблемы является применение бессеточных лагранжевых методов частиц: методов пространственной дискретизации и аппроксимации производных по пространству в гидродинамике сплошной среды, в которых единственный элемент представления среды (частица) не имеет фиксированных на все время расчета связей с другими частицами, расположенными в среде рядом с ним. Отслеживание контактных и свободных границ происходит автоматически и не требует дополнительной обработки, как это делается при сеточном представлении среды. Таким образом, группа бессеточных лагранжевых методов является естественно подходящей для решения задач мезомасштабного моделирования.

Для расширения круга задач, решаемых методами частиц, необходимо внедрение в компьютерные программы алгоритмов, направленных на увеличение эффективности использования вычислительных ресурсов современных машин массивно-параллельной архитектуры с распределенной памятью (кластеров). В настоящее время как в литературе, так и в доступных широкому кругу пользователей программных пакетах отсутствует универсальный высокопроизводительный алгоритм параллелизации расчетов с адаптивным выравниванием нагрузки между узлами и вычислительными ядрами таких машин, который оказался бы эффективен для задач физики экстремальных состояний, поставленных в рамках приближения сплошной среды.

Целью данной работы является развитие контактного метода гидродинамики сглаженных частиц CSPH для решения нестационарных задач механики сплошной среды с неоднородной структурой в экстремальных состояниях и создание высокопроизводительного программного комплекса с использованием технологии параллельного программирования MPI, в основе которого лежит

метод CSPH.

Для достижения поставленной цели потребовалось решение следующих задач:

1. Разработка модели пространственно-неоднородной среды с явно заданной структурой и граничными условиями для последующего применения контактного метода гидродинамики сглаженных частиц.

2. Разработка принципов учета условий на контакте различных сред в методе CSPH.

3. Создание модифицированного высокоэффективного алгоритма параллелизации трехмерных нестационарных расчетов методами частиц с использованием диаграммы Вороного для динамического, выравнивающего вычислительную нагрузку распределения SPH-частиц по ячейкам диаграммы.

4. Создание программного комплекса для моделирования методом CSPH с применением технологии MPI для массивно-параллельных расчетов и анализ его эффективности.

Методы исследования. При решении поставленных задач использовались: метод гидродинамики сглаженных частиц для сжимаемой среды с включенными в него решениями задачи Римана для обеспечения пространственной аппроксимации законов сохранения массы, импульса и энергии, явный метод Эйлера для интегрирования аппроксимированных законов сохранения, метод динамической декомпозиции расчетной области по диаграмме Вороного, списки Верле и связные списки для быстрого поиска соседних частиц в расчете аппроксимаций законов сохранения, а также маскирующие операции передачи данных как метод оптимизации времени на межпроцессорный обмен.

Достоверность и обоснованность полученных результатов обеспечивается строгостью используемого математического аппарата и подтверждается сравнением результатов расчетов с известными аналитическими решениями и экспериментальными данными, а также результатами, полученными ранее другими авторами.

Научная новизна. В диссертации получены следующие новые научные результаты.

1. Создан программный комплекс CSPH&VD³, в основе которого лежит модифицированный метод динамической декомпозиции SPH-частиц по диаграмме Вороного. Высокая эффективность MPI-параллелизации подтверждается полученной обратной линейной зависимостью времени расчета от числа процессорных ядер, задействованных в расчете, как для статической, так и для динамических задач.

2. Разработаны алгоритмы учета контактных условий в CSPH в рамках математической модели гетерогенной среды с неоднородной структурой и подвижными границами между различными подобластями. Разработанные условия на

границе с вакуумом обеспечивают корректный расчет перемещений свободной границы вещества.

3. Получено общее выражение для расчета выравнивающих вычислительную нагрузку смещений ячеек диаграммы Вороного. В нем учтено линейное смещение точек-центров диаграммы и их вращение вокруг общей точки ячеек. Использование выражения ускоряет сходимость декомпозиции частиц к оптимальной по нагрузке.

4. Исследован механизм формирования пылевого облака, выброшенного с поверхности баллистически упакованного слоя шарообразных металлических частиц после выхода на его поверхность ударной волны. Установлено, что в условиях эксперимента (G. Prudhomme, P. Mercier, L. Berthe, 2014) происходит потеря исходной структуры слоя с компактификацией частиц и развитие гидродинамической неустойчивости Рихтмайера — Мешкова, что приводит к наблюдению в эксперименте разлета частиц пыли разного размера, обладающих различной скоростью.

Практическая значимость диссертационной работы состоит в расширении области применимости метода гидродинамики сглаженных частиц. Полученные аппроксимации граничных условий позволяют корректно проводить математическое моделирование течения среды, граничащей с вакуумом.

Разработанный программный комплекс CSPH&VD³ не имеет аналогов по параллельной эффективности в области SPH-моделирования нестационарных задач с контактными и свободными границами. Достигнутая путем применения модифицированного алгоритма динамической декомпозиции частиц идеальная параллелизация позволяет проводить расчеты с десятками миллионов SPH-частиц без потери производительности. Данный алгоритм может быть использован для других методов частиц с ограниченной и переменной областью взаимодействия.

Результаты моделирования гетерогенных сред с неоднородной структурой могут быть использованы для совершенствования моделей квазигомогенных сред.

Положения, выносимые на защиту:

1. Программный комплекс CSPH&VD³ с использованием технологии MPI-параллелизации, в основе которого лежит модифицированный метод декомпозиции частиц по диаграмме Вороного.

2. Алгоритмы учета контактных условий в CSPH в рамках математической модели гетерогенной среды с неоднородной структурой и подвижными границами между различными подобластями. Учет в CSPH условий на границе с вакуумом.

3. Модифицированный алгоритм выравнивающих вычислительную нагрузку смещений ячеек диаграммы Вороного, в котором применена комбинация ли-

нейного смещения центров ячеек и их поворот вокруг общей точки ячеек диаграммы Вороного.

4. Результаты математического моделирования эксперимента о прохождении ударной волны через упаковку из шарообразных металлических частиц. Механизм формирования пылевого облака, выброшенного после выхода ударной волны на поверхность упаковки.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях и семинарах: X и XI Международные конференции «International Smoothed Particle Hydrodynamics European Research Interest Community (SPHERIC) Workshop» (Парма, Италия, 2015; Мюнхен, Германия, 2016); IX и X Конференции «Всероссийская школа-семинар Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем (АФМ)» (Москва, 2015, 2016); XXXI, XXXIII Международные конференции «Equations of State for Matter (EOS ELBRUS)» (пос. Эльбрус, 2016, 2018); XXXII, XXXIV Международная конференция «Interactions of Intense Energy Fluxes with Matter (IEFM ELBRUS)» (пос. Эльбрус, 2017, 2019); Международная конференция «Supercomputer Simulations in Science and Engineering» (Москва, 2016); семинар «Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности» НОЦ «Суперкомпьютерные технологии» МГУ (Москва, 2016); Всероссийская конференция «Харитоновские тематические научные чтения — XIX» (Саров, 2017); Школа-семинар МИЭМ ВШЭ «Суперкомпьютеры в научных исследованиях: горизонты атомистического моделирования и эффективного суперкомпьютерного ко-дизайна» (Москва, 2017); Четвёртый слёт разработчиков отечественных CFD кодов «Отечественные CFD коды — 2017» (Москва, 2017); Международная конференция «Turbulence, Mixing, and Beyond (VI TMB)» (Триест, Италия, 2017); Международная конференция «Физика взрыва: теория, эксперимент, приложения» (Новосибирск, 2018); семинар им. К.И. Бабенко в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Москва, 2018); семинар на ученом совете ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН (Черноголовка, 2019).

Публикации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 8 научных статьях, в том числе в 6 статьях в изданиях, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science.

Личный вклад. Все исследования, изложенные в диссертационной работе, проведены лично соискателем в процессе научной деятельности. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю, заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений и списка литературы. Работа изложена на 137 страницах, содержит 52 иллюстра-

ции и 13 таблиц. Список литературы включает 157 наименований.

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, сформулирована цель, поставлены задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость диссертационной работы.

В **первой главе** описана математическая модель пространственно-неоднородной среды с явно заданной структурой. Среда предполагается состоящей из подобластей Ω_m , занятых изотропными материалами m , как показано на Рис. 1.

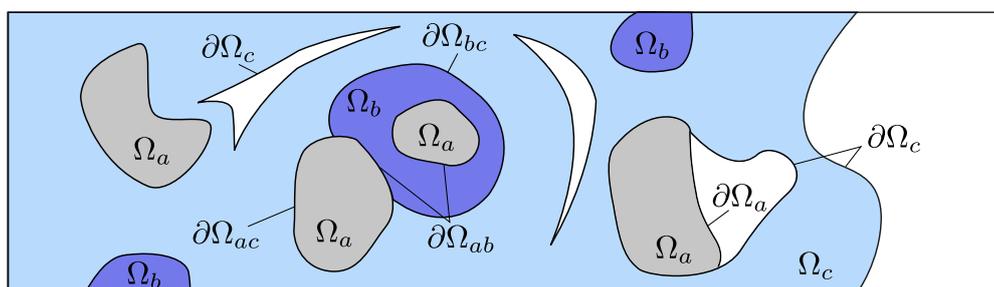


Рис. 1. Схема-пример пространственно-неоднородной среды, составленной из участков Ω_m , заполненных разными материалами m (на рисунке $m = a, b, c$).

Обозначены все подобласти и некоторые границы материалов, например, $\partial\Omega_c$ — свободная поверхность материала c и $\partial\Omega_{ab}$ — контактная граница между материалами a и b

В процессе расчета подобласти могут эволюционировать соответственно характеру гидродинамического течения: распадаться, объединяться, в них могут образовываться и схлопываться пустоты (белые участки на Рис. 1). Взаимодействие подобластей друг с другом обеспечивается заданием граничных условий на контактных поверхностях $\partial\Omega_{m_1m_2}$ и свободных поверхностях $\partial\Omega_m$.

Среда в каждой из подобластей Ω_m , показанных на Рис. 1, описывается приведенной ниже системой уравнений:

$$\text{закон сохранения массы:} \quad \frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (1)$$

$$\text{закон сохранения импульса:} \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (2)$$

$$\text{закон сохранения энергии:} \quad \frac{du}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}). \quad (3)$$

Использованы следующие обозначения: ρ — плотность, \mathbf{v} — скорость, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — тензор напряжений, $u = e + v^2/2$ — полная удельная энергия, e — удельная внут-

ренная энергия. Система уравнений записана в эйлеровых переменных с материальной производной по времени da/dt .

Тензор напряжений $\hat{\sigma}$ представляется в виде суммы шаровой $-p\hat{\mathbf{I}}$, где p — давление, $\hat{\mathbf{I}}$ — единичный тензор второго ранга, и девиаторной $\hat{\mathbf{S}}$ частей:

$$\hat{\sigma} = -p\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (4)$$

В задачах физики экстремальных состояний девиатор напряжений в изотропной упругой среде, как правило, вычисляются по следующей зависимости:

$$\hat{\mathbf{S}} = 2G \left(\hat{\dot{\epsilon}} - \frac{1}{3} \text{tr}(\hat{\dot{\epsilon}}) \hat{\mathbf{I}} \right), \quad (5)$$

которая представляет из себя продифференцированный по времени ($\dot{a} = da/dt$) закон Гука, G — вторая константа Ламе, или модуль сдвига. Компоненты тензора скоростей деформаций $\hat{\dot{\epsilon}}$ вычисляются из тензора малых деформаций:

$$\hat{\dot{\epsilon}} = \frac{1}{2} (\nabla \otimes \mathbf{v} + (\nabla \otimes \mathbf{v})^T). \quad (6)$$

Система уравнений (1)–(6) замыкается уравнением состояния. В диссертационной работе приведены используемые на практике уравнения состояния: идеального газа, баротропное уравнение состояния линейно-упругого тела, уравнение состояния в форме Ми — Грюнайзена с опорной кривой в виде адиабаты Гюгонио.

Поставлены условия на контакте различных сред: непротекание, прилипание, проскальзывание, учет напряжения на разрыв и условия на свободной поверхности.

Предложенный в диссертационной работе подход к описанию структуры среды отличается большой гибкостью в задании граничных условий на контактных поверхностях и использованием уравнений механики сплошных сред с индивидуальными механическими свойствами для материалов в каждой из подобластей. Возможно применение любых локальных моделей пластичности и разрушения.

Вторая глава посвящена изложению метода гидродинамики сглаженных частиц SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) и его контактной модификации CSPH (Contact SPH).

В разделе 2.1 выведены общие формулы для аппроксимации производных по пространству в методе гидродинамики сглаженных частиц. Изложено получение классической формулировки SPH, применение метода к системе уравнений модели, описанной в первой главе, и обсуждаются характеристики метода как разностной схемы.

Метод SPH представляет собой лагранжев метод частиц, предназначенный для дискретизации сплошной среды и аппроксимации пространственных производных в уравнениях математических моделей среды. Частицы в методе SPH представляют собой подвижные объемные элементы среды фиксированной массы и заданной формы. Им приписываются механические и физические характеристики: положение, скорость, плотность, характерный размер, температура, давление в материале частицы и так далее, в зависимости от привлекаемых моделей среды. Аппроксимация пространственных производных производится в SPH через их перенос на так называемую сглаживающую функцию, являющейся аппроксимацией дельта-функции Дирака.

Рассмотрим свертку функции $f = f(\mathbf{r})$ с дельта-функцией Дирака $\delta(\mathbf{r})$ и заменим дельта-функцию на ее гладкое финитное приближение $W(\mathbf{r}, h)$:

$$f(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\xi})\delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = \lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Omega} f(\boldsymbol{\xi})W(\mathbf{r} - \boldsymbol{\xi}, h) d\boldsymbol{\xi},$$

здесь $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ — некоторый объем сплошной среды, содержащий \mathbf{r} . Дифференцируя по \mathbf{r} и перейдя от интеграла к конечному суммированию, получим аппроксимацию значения производных ∇f в частице i :

$$\nabla f(\mathbf{r}_i) \approx \sum_j f(\mathbf{r}_j)\nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h_{ij})\frac{m_j}{\rho_j},$$

где m_j и ρ_j — масса и плотность частицы j , \mathbf{r}_j — ее координата, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Суммирование ведется по всем частицам j , для которых $W(\mathbf{r}_{ij}, h_{ij}) > 0$. Параметр h_{ij} определяет радиус носителя сглаживающей функции для частиц i и j .

В разделе 2.2 подробно описана техника модификации исходного метода для получения контактного CSPH. Указаны методы решения задачи Римана, используемые для аппроксимации значения на контакте между частицами: акустическое приближение, получаемое из метода Годунова для пары частиц (Р. Рихтмайер, 1972); точное решение для случая замыкания системы законов сохранения уравнением состояния идеального газа (Е.Ф. Торо, 2009); метод Дуковица, использующий параметры ударной адиабаты веществ в паре контактирующих частиц (J.K. Dukowicz, 1985).

Система обыкновенных дифференциальных уравнений по времени, получаемая в CSPH для частицы i из (1)–(3), выглядит следующим образом:

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -2\rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_i^R - v_{ij}^{*R}) W'_r(r_{ij}, h_{ij}), \quad (7)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{2}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{T}_{R \rightarrow x} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ij}^*) W'_r(r_{ij}, h_{ij}), \quad (8)$$

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{2}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\boldsymbol{\sigma}_{ij}^* \cdot \mathbf{v}_{ij}^*) W_r'(r_{ij}, h_{ij}), \quad (9)$$

где верхними индексами « R » обозначена компонента вектора вдоль направления $\mathbf{r}_{ji} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$. Матрица $T_{R \rightarrow x}$ задает переход системы координат из локальной ортонормированной $CRST$, где одна из осей сонаправлена с R , к общей системе координат $Oxyz$ (Рис. 2). Верхний индекс « $*$ » в сочетании с нижним « ij » означает, что значение берется из решения задачи Римана между частицами i и j в локальной системе координат (Рис. 3).

В диссертационной работе приведена аппроксимация закона Гука (5) и других выражений, необходимых для расчета линейно-упругой среды.

Рассмотрены вопросы реализации контактных и граничных условий, в том числе примененный алгоритм учета жестких стенок. Условия на контакте двух SPH-частиц из разных материалов применяются путем модификации получаемого между ними решения задачи Римана. Условие проскальзывания в частице i в контакте с частицей j реализуется путем установления в (7)–(9) и, если среда считается линейно-упругой, в SPH-аппроксимации закона Гука $\sigma_{ij}^{*S,T} = 0$, $v_{ij}^{*S,T} = v_i^{S,T}$. Учет напряжения на разрыв реализован в виде замены $\sigma_{ij}^* \rightarrow \min\{\sigma_{ij}^{*R}, \sigma_c\}$, где σ_c — предел прочности на разрыв. Условия непротекания и прилипания учитываются в SPH и CSPH автоматически.

Изложен алгоритм учета свободной поверхности для CSPH. При решении задач со свободными границами как методом CSPH, так и стандартным SPH на границе между SPH-частицей и вакуумом (v) требуется обеспечение условий $\sigma_{iv}^{*R} = 0$ и скорости v_{iv}^{*R} , соответствующей скорости истечения среды в вакуум. Первое условие во всех методах SPH выполняется автоматически. Второе требует корректного расчета скорости границы. В случае использования CSPH необходим поиск решения задачи Римана на границе с вакуумом.

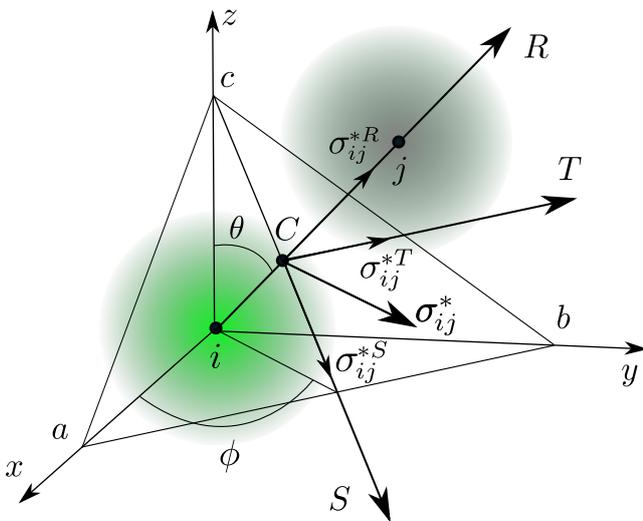


Рис. 2. Система координат RST для пары SPH-частиц i и j

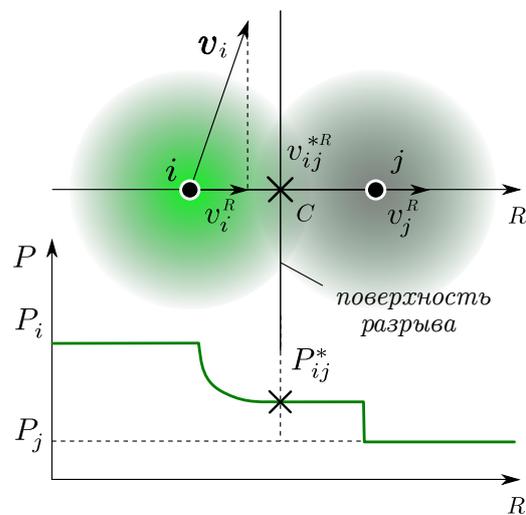


Рис. 3. Задача Римана для пары SPH-частиц i и j

Для того чтобы применить вакуумное граничное условие, необходимо определить частицы, граничащие с вакуумом. Для этого для всех частиц вычисляются три величины:

$$\sigma_i = \sum_j \omega_{ij}, \quad \lambda_i = \sum_j r_{ij} \omega_{ij}, \quad \mathbf{n}_i = - \sum_j \mathbf{r}_{ij} \omega_{ij},$$

где $\omega_{ij} = \omega(r_{ij}/h_{ij})$ и $\omega(q) = (2 - q)/(2 - q + (q/1.7)^{12})$, $0 < q \leq 2$. Параметр σ_i показывает, сколько ближайших соседей имеется у частицы i . Параметр λ_i есть суммарная длина векторов r_{ij} до ближайших соседей, \mathbf{n}_i есть вектор, указывающий направление, в котором находится область вакуума.

Для разделения частиц на внутренние и граничные эмпирически получен критерий следующего вида: если $\sigma_i < 38(|\mathbf{n}_i|/\lambda_i - 0.07) + 5$, то частица граничная. Если частица i оказалась граничной, ее образ i' размещается на расстоянии d_i от частицы i в направлении \mathbf{n}_i , где $d_i = \sqrt[3]{m_i/\rho_i}$ — размер частицы i . Вклад этой виртуальной частицы в SPH-сумму учитывается с весом $W_{ii'} = W_{ii}(\max_j(\sigma_j) - \sigma_i)$, где максимум берется по всем соседям частицы i .

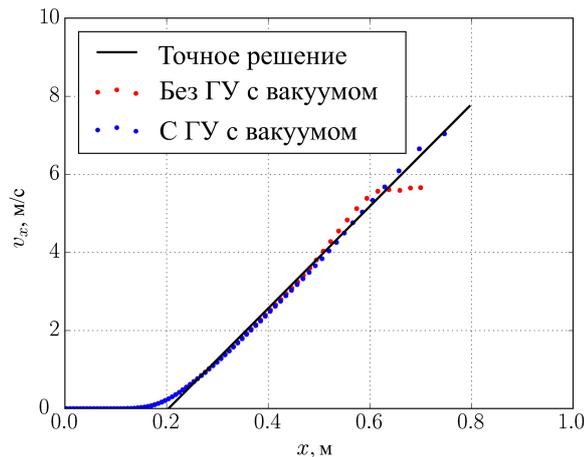


Рис. 4. Профили скоростей в задаче об истечении газа в вакуум

В диссертационной работе показано, что использование разработанных условий позволяет уменьшить торможение SPH-частиц у границы с вакуумом. Пример расчета задачи об истечении газа в вакуум показан на Рис. 4.

После вычисления аппроксимаций правых частей уравнений математической модели среды решается система обыкновенных дифференциальных уравнений по времени. Применяется аналитическое решение уравнения для плотности и явный метод Эйлера для других интегрируемых по времени величин. На основе

вновь вычисленного по уравнению движения поля скорости частицы меняют положение, по плотности, полученной из уравнения неразрывности, — размер.

В третьей главе рассматривается разработанный алгоритм динамической декомпозиции SPH-частиц по диаграмме Вороного с балансировкой вычислительной нагрузки между MPI-процессами, описана реализация программного комплекса CSPH&VD³, использующего данный алгоритм, и приведены результаты тестирования комплекса. Рассматривается производительность CSPH&VD³ на примере задач, в которых вещество подвергается экстремальным скоростям деформации, что приводит к сильному неоднородному пространственному распределению SPH-частиц.

В разделе 3.1 рассмотрен модифицированный алгоритм динамической декомпозиции по диаграмме Вороного.

Согласно определению (Q. Du, 1999) диаграмма Вороного есть разбиение замкнутого подпространства $\bar{\Omega} \in \mathbb{R}^3$ на $N_{\hat{V}}$ областей $\{\hat{V}_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$ (ячеек) по признаку расстояния до заданного набора точек $\{G_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$, называемых центрами диаграммы Вороного:

$$\hat{V}_k = \{\mathbf{r} \in \Omega : |\mathbf{r} - \mathbf{g}_k| < |\mathbf{r} - \mathbf{g}_l|, l = 1, \dots, N_{\hat{V}}, l \neq k\},$$

где \mathbf{g}_k — радиус-вектор точки G_k .

Диаграмма Вороного $\{\hat{V}_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$ задает декомпозицию среды $\bar{\Omega}$, представленной частицами, на $N_p = N_{\hat{V}}$ MPI-процессов: данные, связанные с частицами, попавшими в ячейку \hat{V}_k , размещаются в памяти процесса k .

Эффективность работы процесса k при параллельном моделировании может быть охарактеризована величиной $L_k = t_k^u/t^e$, $0 < L_k < 1$, которая считается вычислительной нагрузкой процесса k . Здесь t_k^u — полезное время, включающее время на SPH-расчет и построение списка соседей, t^e — общее время, затрачиваемое на один шаг моделирования по времени.

Минимальное общее время расчета достигается, если вычислительная нагрузка L_k равномерно распределена между MPI-процессами $k = 1, \dots, N_p$. Общий механизм балансировки вычислительной нагрузки для пространственных методов декомпозиции — смещение границ подобластей декомпозиции для перераспределения частиц, а значит, и вычислительной работы, между ними. Так как набор центров $\{G_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$ однозначно определяет форму всех ячеек диаграммы $\{\hat{V}_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$, смещение центров однозначно определяет смещение границ между ячейками диаграммы Вороного.

Алгоритм динамической декомпозиции области по диаграмме Вороного (Voronoi Dynamic Domain Decomposition, VD³) устанавливает правила перемещения центров диаграммы G_k для уменьшения разницы в вычислительной нагрузке между контактирующими ячейками, как это было сделано для метода молекулярной динамики (V.V. Zhakhovskii, 2005). Вычислительная работа передается от сильно загруженных процессов к менее загруженным. Для этого точка-центр G_k с радиус-вектором \mathbf{g}_k смещается в соответствии с разницей в нагрузке между соседними ячейками диаграммы Вороного $\hat{V}_k - \hat{V}_l$:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{g}_k &= (1 - \sigma) \sum_l \Delta \mathbf{g}_{k,l} + \sigma \sum_l \sum_m \Delta \mathbf{g}_{k,l,m} = \\ &= (1 - \sigma) \sum_l^{M_k} D_{k,l}^{\text{sh}} \frac{L_k - L_l}{L_k + L_l} \frac{\mathbf{g}_{kl}}{|\mathbf{g}_{kl}|} + \sigma \sum_{l,m}^{M_k} (-\mathbf{c}_k + \mathbf{M}(\mathbf{c}_k \times \mathbf{c}_m, \alpha_m) \mathbf{M}(\mathbf{c}_k \times \mathbf{c}_l, \alpha_l) \mathbf{c}_k), \end{aligned} \tag{10}$$

где $D_{k,l}^{\text{sh}}$ — полуширина пограничной полосы между ячейками диаграммы \hat{V}_k и \hat{V}_l , которая зависит от радиуса носителя сглаживающего ядра, M_k — число соседних ячеек для \hat{V}_k , $\mathbf{c}_p = \mathbf{g}_p - \mathbf{o}_{klm}$, $p = k, l, m$. Матрица $\mathbf{M}(\mathbf{a}, \alpha)$ есть матрица вращения, осуществляющая вращение в плоскости на угол α вокруг вектора \mathbf{a} , проходящего через точку O_{klm} . Величины углов $\alpha_l = \pi/3(L_l - L_k)/(L_k + L_l + L_m)$ и $\alpha_m = \pi/3(L_m - L_k)/(L_k + L_l + L_m)$. Второй член выражения (10) указан для случая двумерной диаграммы, такой случай рассматривается в тестовых расчетах.

Формула (10) проиллюстрирована Рис. 5, где показана начальная несбалансированная диаграмма на тонком однородном диске (Рис. 5, а). Первый член формулы, $\Delta \mathbf{g}_{k,l}$, задает линейное смещение (Рис. 5, б) вдоль линии, соединяющей пару центров ячеек диаграммы (V.V. Zhakhovskii, 2005), а второй, $\Delta \mathbf{g}_{k,l,m}$, — смещение вращением вокруг общей точки ячеек (Рис. 5, в). Сумма двух видов балансирующих смещений дает идеальную декомпозицию (Рис. 5, г).

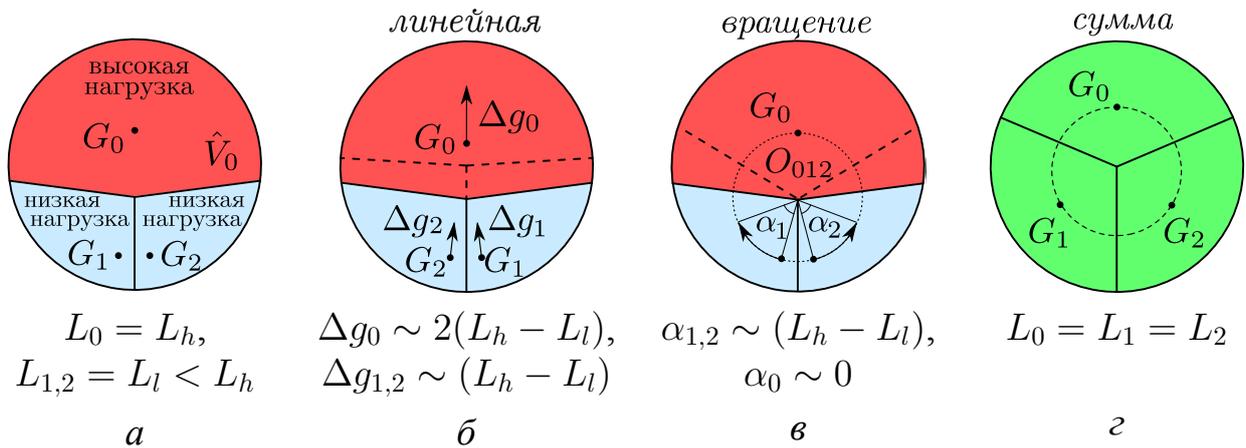


Рис. 5. Балансировка нагрузки на тонком диске. Начальная декомпозиция (а), линейная корректировка нагрузки (б), балансировка нагрузки вращением центров диаграммы вокруг точки O_{012} (в), идеальная декомпозиция (г).

Штриховые линии показывают новые границы между ячейками диаграммы после итераций балансирующего алгоритма

Новое положение $\hat{\mathbf{g}}_k$ центра ячейки k определяется как взвешенная сумма среднего перемещения всех частиц в области \hat{V}_k в течение нескольких временных шагов и балансирующих смещений $\Delta \mathbf{g}_k$:

$$\hat{\mathbf{g}}_k = (1 - \theta)(\mathbf{g}_k + \gamma \Delta \mathbf{g}_k) + \theta(\mathbf{r}_{c,k} + \Delta \mathbf{r}_{c,k}), \quad (11)$$

где \mathbf{g}_k — предыдущая позиция точки G_k и $\mathbf{r}_{c,k} = (\sum_{i=1}^{N_k} \mathbf{r}_i)/N_k$ — предыдущий геометрический центр ячейки, здесь также $\Delta \mathbf{r}_{c,k}$ — среднее перемещение частиц, и $\theta \in [0, 1]$, $\gamma \in [0, 1]$ — параметры.

На примере исходной декомпозиции тонкого диска, аналогичной схематично представленной на Рис. 5, *a*, исследована сходимость выравнивающих нагрузки смещений ячеек (Рис. 6). Значения параметров для выражений (10) и (11), когда механизмы балансировки учитывались совместно, составили $\sigma = 0.5$ и $\sigma = 0.5$, $\theta = 0.25$ соответственно. Для всех расчетов принималось $\gamma = 1$.

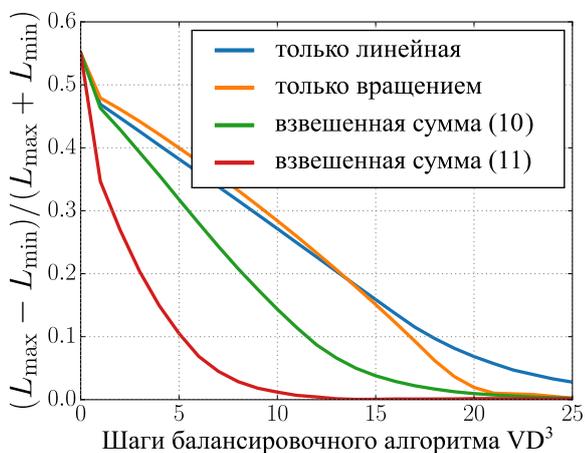


Рис. 6. Сходимость алгоритмов балансировки от декомпозиции на Рис. 5, *a*

В диссертационной работе рассмотрен вопрос адаптации исходного VD^3 к CSPH, где частицы в отличие от (V.V. Zhakhovskii, 2005) имеют переменный радиус сглаживания. Описан связанный с VD^3 алгоритм поиска в ячейке диаграммы Вороного частиц, входящих в SPH-сумму. Из него выведены необходимые для работы VD^3 размеры областей обмена частицами.

В разделе 3.2 описан разработанный программный комплекс CSPH& VD^3 . На момент опубликования CSPH& VD^3 реализован на языках Fortran и Python 2 с использованием библиотек MPI. Для

сборки кода на Fortran требуется использование компилятора с поддержкой стандарта Fortran 2003: используются инкапсуляция данных и методов, указатели на функции и абстрактные интерфейсы (M. Metcalf et al., 2011).

Основная часть комплекса, осуществляющая расчет и ввод-вывод данных, работает как единая программа и имеет модульную структуру (состоит из файлов вида `module ...end module`). В диссертационной работе описан функционал всех используемых модулей. Представлен формат входного файла и файлов с константами материалов. Описана обработка выводимых результатов моделирования программами, реализованными на Python.

Метод CSPH был протестирован в одномерном пространстве (А.Н. Паршиков, 2013). В разделе 3.3 данной работы приведены результаты тестирования одномерной задачи, поставленной в трехмерном пространстве. Также приведены сравнительные расчёты для различных типов начальной пространственной упаковки SPH-частиц и сглаживающих функций, используемых в программе.

Проведено тестирование CSPH& VD^3 на сильную масштабируемость, т.е. получено измерение ускорения расчета с фиксированным количеством частиц с ростом числа MPI-процессов, на статической задаче. Для наглядности результатов использована двумерная декомпозиция в приложении к квазидвумерному образцу, тонкой неподвижной пластине размером $L_x = L_y = 1$ м, $L_z = 0.15$ м (Рис. 7). Дисбаланс нагрузки вводится в систему путем декомпо-

зиции каждой четверти квадрата по диаграмме Вороного с количеством ячеек диаграммы в неравной пропорции: $3N_p/8$, $N_p/4$, $N_p/4$, $N_p/8$ от общего числа процессов $N_p = 32, \dots, 1024$. Результаты тестирования показывают идеальную масштабируемость для данного диапазона числа процессов.

В разделе 3.4 рассматривается производительность CSPH&VD³ в решении динамических задач: струеобразования с шероховатой поверхности металла при выходе на нее ударной волны; электрического взрыва проводника вследствие срыва тока при прохождении через него импульсного тока. Сильные деформации и разрушения в исходном образце, наблюдаемые в данных задачах, приводят к неоднородному пространственному распределению SPH-частиц, что является сложным тестом для любого алгоритма динамической балансировки нагрузки с декомпозицией по пространству.

Приводятся результаты теста на сильную масштабируемость (Рис. 8) для данных задач. В целях более наглядной демонстрации результатов в этих примерах используется двумерная, а не трехмерная декомпозиция по диаграмме Вороного. Показана близкая к идеальной масштабируемость параллельного расчета для моделирования струеобразования (20.8 млн SPH-частиц). Для задачи о взрыве проводника (3.6 млн SPH-частиц) показано, что за счет увеличения числа процессов достигнуто сверхлинейное ускорение.

В четвертой главе рассматриваются примеры применения программного комплекса CSPH&VD³ к задачам прохождения ударных волн через сложную гетерогенную среду. Задачи характеризуются сложной формой движения поверхностей и большими относительными перемещениями сред. Для данных задач использовалась трехмерная декомпозиция. Тесты на масштабируемость для этих задач не проводились ввиду сложности и ресурсоемкости расчетов.

Движение ударной волны по взвеси, состоящей из жидких металлических

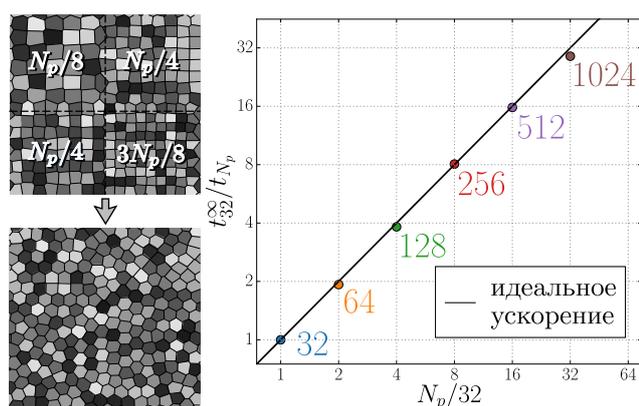


Рис. 7. Тест на сильную масштабируемость для статической задачи. 52 млн частиц, t^{∞} — время на шаг сбалансированной системы

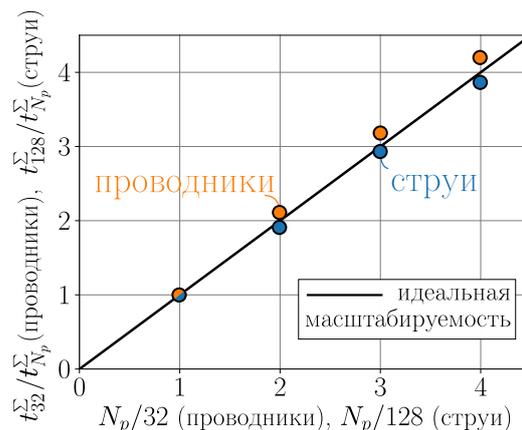


Рис. 8. Результаты теста на сильную масштабируемость для динамических задач. t^{Σ} — общее время моделирования

частиц и менее плотной несущей фазы, характеризуется отсутствием скоростного равновесия за фронтом ударной волны между перечисленными компонентами. Установление скоростного равновесия между металлическими частицами из золота диаметром $D = 1$ мкм и несущей фазой (жидкой водой) происходит в зоне релаксации скорости и достигается вследствие обмена импульсом между компонентами. Результаты моделирования (Рис. 9), представленные в разделе 4.1, представляют интерес при изучении лазерной абляции в жидкости.

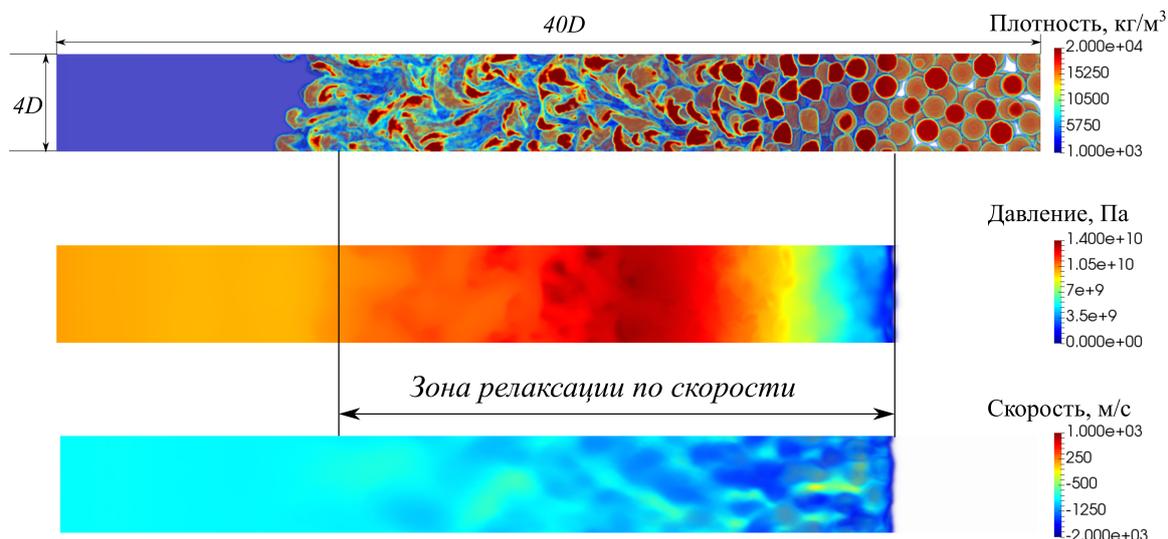


Рис. 9. Воксельное изображение участка расчетной области в задаче о прохождении ударной волны через взвесь жидких частиц в менее плотной жидкости

Давление за фронтом ударной волны в расчете составляет 7.5 ГПа. Профиль ударной волны, до вхождения во взвесь прямоугольный, меняет форму. Моделирование показывает образование зоны релаксации по скорости и потерю исходной формы частиц включений. Компактирования частиц не наблюдается.

При прохождении ударной волны амплитудой около 100 ГПа через слой шарообразных металлических частиц микронных размеров наблюдается образование облака металлической пыли, частицы в котором двигаются с различными скоростями (G. Prudhomme, P. Mercier, L. Berthe, 2014). По результатам эксперимента представляет интерес как получение данных о точном составе облака, так и анализ процессов, приводящих к его образованию.

В разделе 4.2 рассмотрены результаты моделирования прохождения ударной волны амплитудой $P = 160$ ГПа через слой частиц диаметром 9 мкм «плотной», «неплотной» и баллистической упаковок. Результаты показывают, что при давлении, обусловленном экспериментальными данными, в процессе прохождения ударной волны исходные шарообразные частицы теряют целостность

вследствие плавления и кумулятивных эффектов за фронтом ударной волны. Пример расчета с 8.2 млн SPH-частиц на 128 ядрах показан на Рис. 10. Процесс прохождения ударной волны по слою показан на Рис. 10, *а*, *б*. Позднее время в моделировании показано на Рис. 10, *в* (5 часов реального времени моделирования).

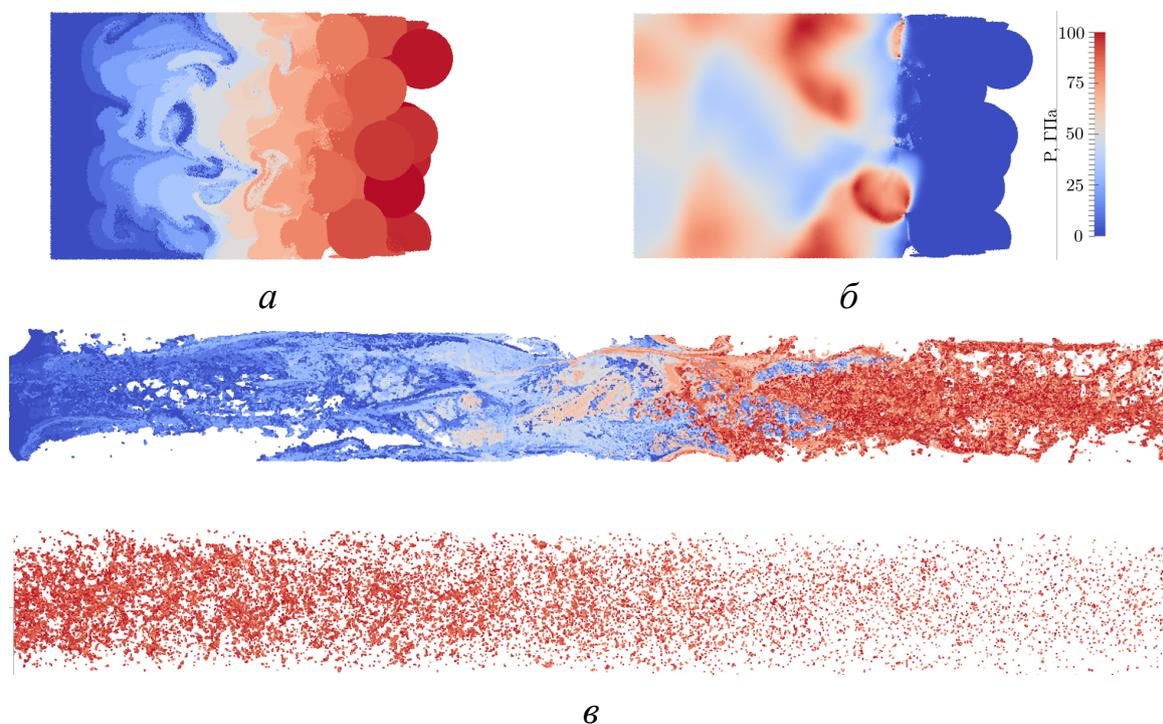


Рис. 10. Прохождение ударной волны через слой частиц (*а*). Золотые частицы, показанные различными цветами (*а*, *в*) и распределение давления в среде (*б*). Время составило $t = 0.01$ мкс (*а*, *б*) и $t = 0.22$ мкс (*в*). Нижняя часть (*в*) — продолжение верхней части этого рисунка

Основные результаты диссертационной работы

1. Создан программный комплекс CSPH&VD³, MPI-параллелизация в котором основана на модифицированном методе динамической декомпозиции SPH-частиц по диаграмме Вороного. Полученная обратная линейная зависимость времени расчета от числа процессорных ядер подтверждает высокую эффективность параллелизации расчета как для статических, так и для динамических задач.

2. Разработаны алгоритмы учета контактных условий в CSPH в рамках математической модели гетерогенной среды с подвижными границами между различными подобластями. Разработанные условия на границе с вакуумом обеспечивают корректный расчет движения свободной границы вещества.

3. Получена расширенная форма выражения балансирующей поправки для метода динамической декомпозиции по диаграмме Вороного с привлечением вращательной составляющей. Ее использование ускоряет сходимость декомпозиции к оптимальной по нагрузке.

4. Проведено математическое моделирование процесса прохождения ударной волны через упакованный баллистически слой шарообразных металлических частиц. Результаты моделирования объясняют механизм формирования пылевого облака, выброшенного после выхода ударной волны на поверхность упаковки. Установлено, что в условиях эксперимента исходные частицы полностью теряют целостность вследствие плавления и кумулятивных эффектов за фронтом ударной волны.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Comparative SPH and MD modeling of shock-produced ejecta from grooved metal surface / M.S. Egorova [et al.] // Proceedings of the 10th International SPHERIC Workshop Parma, 2015. P. 413–418. (0.34 п.л./0.09 п.л.)

2. Auto-balancing Voronoi domain decomposition for parallel SPH simulation of materials in extremes / M.S. Egorova [et al.] // Proceedings of the 11th International SPHERIC Workshop Munchen, 2016. P. 219–225. (0.41 п.л./0.10 п.л.)

3. Detonation initiation in a model of explosive: Comparative atomistic and hydrodynamics simulations / M.S. Egorova [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 774. Art. 012077. (0.38 п.л./0.06 п.л.)

4. Shock-induced ejecta from a layer of spherical particles. Part I: SPH meso-scale simulation / M.S. Egorova [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Vol. 815. Art. 012029. (0.52 п.л./0.06 п.л.)

5. Shock-induced ejecta from a layer of spherical particles. Part II: Modeling with the non-equilibrium two-phase model of a granular medium / M.S. Egorova [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Vol. 815. Art. 012030. (0.63 п.л./0.08 п.л.)

6. Auto-balancing algorithm for parallel SPH simulation of materials in extremes / M.S. Egorova [et al.] // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2017. Vol. 38, iss. 5. P. 893–897. (0.26 п.л./0.05 п.л.)

7. Explicit failure model for boron carbide ceramics under shock loading / M.S. Egorova [et al.] // Journal of Applied Physics. 2018. Vol. 124. Art. 085902. (0.6 п.л./0.1 п.л.)

8. Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains / M.S. Egorova [et al.] // Computer Physics Communications. 2019. Vol. 234. P. 112–125. (0.84 п.л./0.21 п.л.)

Подписано к печати __.__.____. Заказ № ____
Объем 1,0 печ. л. Тираж 100 экз.
Типография МГТУ им. Н.Э. Баумана
105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1
(499) 263-62-01

