

*О.М. Хімич, В.В. Полянко, О.В. Попов, В.А. Сидорук, О.В. Чистяков*

## Технологія грід-обчислень для математичного моделювання процесів в'язкого руйнування

Діагностика технічного стану зварних конструкцій, що працюють при значних зовнішніх навантаженнях, в агресивних середовищах тощо, є ключовим аспектом як гарантування, так і продовження термінів їх безпечної експлуатації. При цьому важливим є аналіз тих багатовимірних взаємопов'язаних фізико-механічних процесів, які визначають несучу здатність окремих конструкційних елементів з урахуванням усього спектру експлуатаційного силового впливу, а також прогнозування необоротних змін в металі, що мають наслідком зародження і розвиток мікро-і макродефектів матеріалу.

Актуальним завданням є використання методів математичного моделювання та сучасних інформаційних технологій в рамках комплексних процедур технічної діагностики стану відповідальних зварних конструкцій з метою оцінки безпеки їх експлуатації, оптимізації ремонтно-відновлювальних робіт та обґрунтованого продовження ресурсу. Такі вимоги зумовлюють використання складних тривимірних моделей, що в свою чергу зумовлює появу розрахункових задач великої та надвеликої розмірності. Розв'язування таких задач вимагає значних обчислювальних ресурсів – на персональних комп'ютерах, використовуючи програмні засоби, що реалізують послідовну модель обчислень, необхідно декілька діб неперервних обчислень.

Вирішити цю проблему можна шляхом застосування паралельних обчислень та сучасних великих кластерних комплексів. Адже це дозволяє досягати суттєвого зменшення часу на проведення чисельних експериментів як за рахунок розпаралелення розв'язування однієї задачі, так і можливості одночасного розв'язування декількох незалежних задач.

Проте, створення орієнтованих на паралельні обчислення нових програмних комплексів (ПК) вимагає значних людських та часових ресурсів. Саме тому актуальності набуває питання адаптації до паралельних обчислювальних систем вже існуючого програмного забезпечення з послідовною організацією обчислень та розробка мережевих технологій, у тому числі грід-технологій використання створених кластерних програмних комплексів. Такий підхід було використано при розробці програмних комплексів для розв'язування задач аналізу міцності будівельних конструкцій [1] та задач математичного моделювання фізичних процесів при зварюванні [2].

В даній роботі такий адаптивний підхід використано для розпаралелювання розв'язування задач, що виникають при математичному моделюванні процесів в'язкого руйнування ділянки трубопроводу – шляхом заміни в розробленому в Інституті електрозварювання ім. Е.О. Патона НАН України програмному комплексі модулів для розв'язування систем лінійних рівнянь (ці підзадачі потребують найбільше комп'ютерного часу) на відповідні програмні модулі з паралельною організацією обчислень.

## Постановка та розв'язування задач

Для розв'язування задач, пов'язаних з термомеханічними процесами в зварюванні і при наступній експлуатації зварних конструкцій, використовуються методи математичного моделювання на основі просторових кінетичних моделей.

В загальному випадку, механізм в'язкого руйнування представляється декількома послідовними етапами: а) зародження пор в'язкого руйнування при виробництві конструкції; б) збільшення розмірів пор при пластичній деформації, взаємодія і об'єднання пор в'язкого руйнування; в) зародження макродефекту і відповідне зниження несучої здатності як дефектної області, так і конструкції в цілому; г) розвиток макродефекту. Кожний з цих етапів має різну фізико-механічну природу і описується відповідною взаємозв'язаною моделлю.

Зародження пор в області структурних дефектів і неоднорідностей пов'язано з істотним розвитком пластичних деформацій (первинні пори), який може бути кількісно охарактеризований за допомогою параметра Одквіста [3]  $\kappa = \int d\varepsilon_i^p$ , де  $d\varepsilon_i^p = \sqrt{2d\varepsilon_{ij}^p d\varepsilon_{ij}^p} / 3$ ,  $d\varepsilon_{ij}^p$  – компоненти тензора приростів пластичних деформацій.

Подальше зростання пор, що зародилися, залежить від жорсткості напруженого стану та інтенсивності пластичної деформації металу і описується законом Райса-Трейсі [4]  $dR = R_0 K_1 \exp(K_2 \sigma_m / \sigma_1) d\varepsilon_i^p$ , де  $R$ ,  $R_0$  – поточний та початковий радіуси пор відповідно,  $\sigma_m / \sigma_1$  – параметр жорсткості напруженого стану,  $K_1, K_2$  – константи.

Швидкість зародження вторинних сферичних пор залежить від концентрації включень в металі конструкції і розвитку пластичних деформацій за законом [5]

$$f = f_0 + f_i \exp\left(-\frac{\kappa^*}{\kappa - \kappa_c}\right), \text{ де } f_i \text{ – об'ємна концентрація включень, } \kappa^* \text{ – константа}$$

матеріалу, що характеризує максимально можливий приріст параметра Одквіста.

**Скінченно-елементна модель.** Математично об'єднана задача кінетики температурного поля, розвитку напруг і деформацій та формування мікропор базується на скінченно-елементних моделях з використанням восьмивузлових скінченних елементів (СЕ, рис. 1).

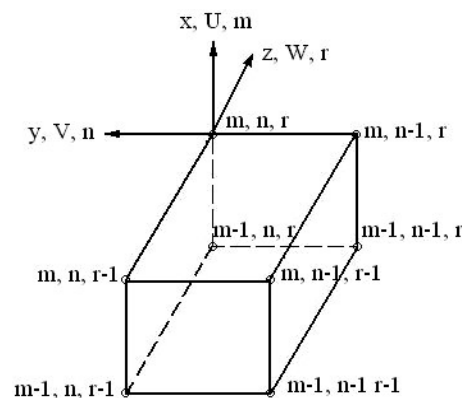


Рис. 1. Схема скінченного елемента в системі координат  $x, y, z$

У рамках об'єму, обмеженого даним СЕ, розподіли температур, напруг і деформацій прийнято однорідними. Тензор приростів деформацій (з врахуванням наявності і рівномірного розподілу мікропор) представляється у наступному вигляді

[3]  $d\varepsilon_{ij} = d\varepsilon_{ij}^e + d\varepsilon_{ij}^p + \delta_{ij}(d\varepsilon_T + df/3)$ , де  $d\varepsilon_{ij}^e, d\varepsilon_{ij}^p, \delta_{ij}d\varepsilon_T, \delta_{ij}df/3$  – компоненти тензора приростів деформацій, обумовлені (відповідно) пружним механізмом деформації, пластичними деформаціями, кінетикою неоднорідного температурного поля та пористістю,  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера.

Залежність деформацій від напруг визначається законом Гука і асоційованим законом пластичної течії.

$$\Delta\varepsilon_{ij} = \Psi(\sigma_{ij} - \delta_{ij}\sigma_m) + \delta_{ij}(K\sigma_m + \Delta\varepsilon_T + \Delta f/3) - 0,5(\sigma_{ij} - \delta_{ij}\sigma_m)^*/G + (K\sigma_m)^*,$$

де  $\sigma_m$  – середнє значення нормальних компонент тензора напруг,  $K$  – модуль об'ємного стиснення,  $G$  – модуль зсуву, символ «\*» відносить змінну або вираз до попереднього кроку відстежування,  $\Psi$  – функція стану матеріалу, яка визначає умову пластичної течії згідно критерію Мізеса з додатковим урахуванням зниження несучого нетто-перетину скінченного елемента внаслідок формування несучильності в рамках моделі Гурсона-Твергаарда [4].

Пластичні деформації визначаються співвідношенням  $\Delta\varepsilon_{ij} = \left(\Psi - \frac{1}{2G}\right)(\sigma_{ij} - \delta_{ij}\sigma_m)$ . Значенням функції  $\Psi$  визначається пластична нестійкість в конкретному СЕ на конкретному кроці відстежування. При збільшенні  $\Psi$  приріст пластичних деформацій  $\Delta\varepsilon_{ij}^p$  також збільшується, тоді як напруги  $\sigma_{ij}$  зменшуються. Якщо ітераційний процес по  $\Psi$  в даному СЕ на даному кроці навантаження дає значення  $\Psi$  вище  $\Psi_{кр}$ , то можна вважати, що даний елемент не в змозі сприймати навантаження на даному кроці. Відповідно  $\Psi \rightarrow \infty, \sigma_{ij} \rightarrow 0$ .

Можливий також інший варіант втрати працездатності даного СЕ, якщо істинні максимальні головні напруги  $3\sigma_1/(3-2f)$  перевищують напругу сколу  $S_k$ , що можливе при високому деформаційному зміцненні матеріалу.

Таким чином, конкретний СЕ незворотно втрачає спроможність сприймати навантаження в разі пластичної нестійкості:

$$\Psi > \frac{1}{2G} + \frac{\varepsilon_f - \kappa^*}{1,5\sigma_s(\kappa, T)} \quad (1)$$

та / або руйнування мікросколом

$$3\sigma_1/(3-2f) > S_k. \quad (2)$$

Якщо процес вказаного “занулення” за умов (1), (2) відбувається на даному кроці навантаження, охоплюючи все більшу кількість сусідніх СЕ, і не дозволяє перейти до наступного кроку навантаження, то даний крок навантаження визначає граничне навантаження спонтанного руйнування. Такий підхід вимагає знання певної кількості додаткових параметрів процесу:  $\kappa_c, f_0$ , які характеризують зародження пор, та  $\varepsilon_f, S_k$ , які визначають “занулення” скінчених елементів.

На кожному кроці ітерацій по  $\Psi$  напруги  $\varepsilon_{ij}$  обчислюються за формулами (по індексах, що повторюються, проводиться підсумовування)

$\sigma_{ij} = \frac{1}{\Psi} \left( \Delta\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \frac{\Psi - K}{K} \Delta\varepsilon \right) + J_{ij}$ . Співвідношення між компонентами тензора приростів деформацій  $\Delta\varepsilon_{ij}$  та вектора приростів переміщень  $\Delta U_i$  визначаються виразом  $\Delta\varepsilon_{ij} = 0,5(\Delta U_{ij} + \Delta U_{j,i})$ , де комою позначено диференціювання в межах СЕ.

Компоненти тензора напруг задовольняють рівнянням статки для внутрішніх СЕ і крайовим умовам для граничних СЕ. У свою чергу, компоненти вектора приросту переміщень  $\Delta U_i = (\Delta U, \Delta V, \Delta W)$  задовольняють відповідним умовам на границі.

Процес визначення критичного навантаження полягає в послідовному розв'язуванні на кожному кроці відстежування та ітерацій по  $\Psi$  нелінійної системи рівнянь відносно змінних вектора приростів переміщень у вузлах СЕ. Ці системи отримуються з варіаційного принципу Лагранжа при мінімізації функціоналів

$$\mathcal{E}_I = \frac{1}{2} \sum_V (\sigma_{ij} + J_{ij}) \Delta \varepsilon_{ij} V_{m,n,r} + \sum_{S_p} P_i \Delta U_i \Delta S_p^{m,n,r}.$$

де  $\sum_V$  – оператор суми по всім (з внутрішніми вузлами) СЕ,  $\sum_{S_p}$  – оператор суми по граничним СЕ, на яких задано компоненти силового вектора  $P_i$ .

Тобто система

$$\frac{\partial \mathcal{E}_I}{\partial \Delta U_{m,n,r}} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{E}_I}{\partial \Delta V_{m,n,r}} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{E}_I}{\partial \Delta W_{m,n,r}} = 0. \quad (3)$$

дозволяє отримати розв'язок в компонентах вектора приросту переміщень на кожному кроці відстежування та ітерацій по  $\Psi$  для конкретного СЕ. Розв'язування системи нелінійних рівнянь (3) проводиться ітераційно шляхом лінеаризації на кожній ітерації по нелінійності.

**Розв'язування СЛАР** Отже, на кожній ітерації по нелінійності розв'язується система лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР)

$$Ax = b. \quad (4)$$

Матриці цих СЛАР в загальному випадку несиметричні без діагональної переваги та мають розріджену структуру, переважно є стрічковими.

Технологічну схему розв'язування задачі розрахунку напружено-деформованого і граничного станів зварної конструкції, наприклад, ділянки трубопроводу, зображено нижче (рис. 2).



Рис. 2. Технологічна схема розв'язування задачі розрахунку напружено-деформованого і граничного станів трубопроводу

Для розв'язування СЛАР (4) доцільно використовувати метод Гауса з частковим вибором головного елемента. Зауважимо, що розв'язування всієї задачі потребує розв'язання декількох сотень СЛАР (4) з різними матрицями, порядок яких становить  $O(10^5)$ , а ширина стрічки складає  $\approx 2\,000$ . Тому для істотного скорочення часу необхідно залучити високопродуктивні обчислювальні ресурси, зокрема комп'ютери з паралельною організацією обчислень, використавши для розв'язування СЛАР (4) відповідні паралельні алгоритми методу Гауса [6-10].

Історично перші паралельні алгоритми трикутного розвинення розрідженої матриці було розроблено для блочно-діагонального з об'ємним представленням такої

матриці [9]. Досить детально такий же алгоритм описано також в [10] для розв'язування задач з вузькими стрічковими матрицями. Проте можливості паралельних алгоритмів цієї групи обмежені через появу в процесі розвинення зведеної матриці, порядок якої дорівнює кількості рядків (стовпчиків) в обрамленні. Трикутне розвинення такої матриці може бути виконано або в послідовному режимі (якщо її порядок порівняно невеликий), або в паралельному, але для цього необхідно перерозподілити дані між процесорними пристроями і використати паралельний алгоритм для щільних матриць. Крім того, ефективність такого алгоритму для випадку стрічкової матриці обмежена зверху 25 % через те, що таку матрицю необхідно привести до блочно-діагональної матриці з обрамленням, що збільшує в 4 рази кількість арифметичних операцій.

Враховуючи сучасні тенденції розвитку технічних та програмних засобів для високопродуктивних обчислень, зокрема розробку виробниками технічних засобів також і програмного забезпечення, доцільно модифікувати запропоновані алгоритми так, щоб переважна більшість операцій зводилась до матрично-матричних або матрично-векторних операцій із щільними блоками елементів розріджених матриць. Дана модифікація алгоритму дозволить використати ефективні бібліотечні програми, що реалізують відповідні алгоритми з урахуванням особливостей архітектури апаратного забезпечення. Такий підхід дозволяє значно підняти ефективність роботи програми.

Таким чином, замінивши послідовний розв'язувач СЛАР паралельним, можна досягти суттєвого скорочення часу розв'язування всієї задачі розрахунку напружено-деформованого і граничного станів зварних конструкцій. Це реалізовано в програмному комплексі (ПК) "3D-osesim-cluster" для розрахунку напружено-деформованого і граничного станів трубопроводу під внутрішнім тиском. Тут розпаралелено розв'язування СЛАР, а всі інші обчислення виконуються в послідовному режимі (див. рис. 2).

## Технологія грід-обчислень

Технологія розв'язування в грід-середовищі задач чисельного аналізу напружено-деформованого стану трубопровідних елементів з урахуванням зародження, взаємодії і розвитку пор в'язкого руйнування надається ПК "3D-osesim-cluster", який має клієнт-серверну архітектуру і складається з двох частин: клієнтської, яка працює в ОС Windows на комп'ютері користувача, та серверної, яка встановлена на кластері з паралельною організацією обчислень та працює в ОС Linux (рис. 3).

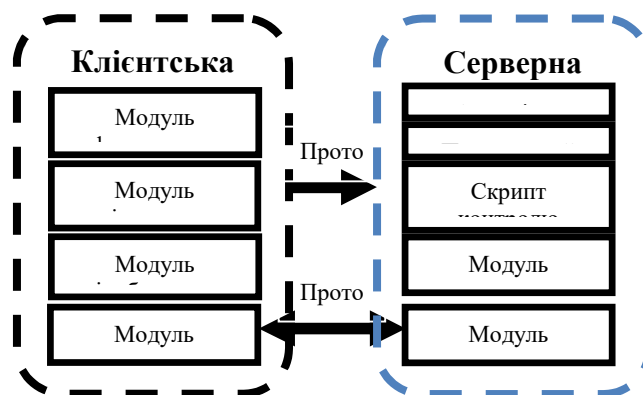


Рис. 3. Архітектура ПК "3D-osesim-cluster"

На кластері розміщуються програмні модулі для виконання паралельних розрахунків, а також файли для запуску цих програм. На комп'ютері користувача знаходяться: програма для запуску паралельних обчислень, командні файли та файли-сценарії для обміну даними та ініціювання запуску паралельних розрахунків на кластері.

Для запуску задачі в грід необхідно мати доступ до будь-якого вузла УНГ, через який користувач приєднується до грід-середовища. Також необхідною умовою успішної роботи є наявність високошвидкісного підключення до мережі Інтернет.

Робота з ПК "3D-osesim-cluster" починається із стартового вікна (рис. 4). У цьому вікні користувач може ініціювати сесію в грід-середовищі (якщо він не зробив це в інший спосіб), вказати кількість ядер, які будуть використовуватись для розрахунків, і запустити задачу на обрахунок на кластері або в грід.

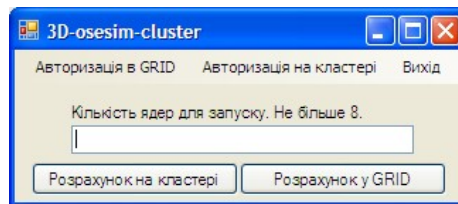


Рис. 4. Стартове вікно ПК "3D-osesim-cluster"

Після вводу кількості ядер та натискання кнопки «Розрахунок у GRID» відбувається генерування файлу інструкцій запуску паралельної програми в грід.

Використовуючи грід-сервіс, розроблений для грід-середовища ARC, вибирається грід-кластер, на якому встановлено серверну частину ПК "3D-osesim-cluster" та який має достатній для розв'язування задачі вільний обчислювальний ресурс. Якщо на момент запуску вільного ресурсу недостатньо, задача вноситься у чергу завдань на грід.

Перед запуском задачі на розрахунок на вибраному грід-ресурсі дані задачі копіюються на цей кластер. Після закінчення роботи програми на кластері результати копіюються на комп'ютер користувача. Інформацію про деталі паралельних обчислень користувач може переглянути у стандартному протоколі задачі.

## Апробація

Використовуючи ПК "3D-osesim-cluster", в грід-середовищі було розв'язано декілька тестових та прикладних задач розрахунку напружено-деформованого і граничного станів трубопроводу під внутрішнім тиском з урахуванням геометричних аномалій типу локального стоншування стінки і колових зварних швів. Розглянуто граничний стан елемента магістрального трубопроводу (МТ). В області колового монтажного шва даної ділянки МТ є зовнішній напівеліптичний дефект локального стоншення стінки розміром  $s = 25$  мм,  $a = 5$  мм.

В дискретних моделях використовувались скінчено-елементні сітки з  $12 \times 25 \times 140 = 42\,000$  вузлами та з  $14 \times 25 \times 53 = 18\,550$  вузлами, що приводило до СЛАР (1.4) з параметрами (відповідно)  $n = 126\,000$ ,  $m_l = m_u = 902$  та  $n = 55\,650$ ,  $m_l = m_u = 1\,052$ .

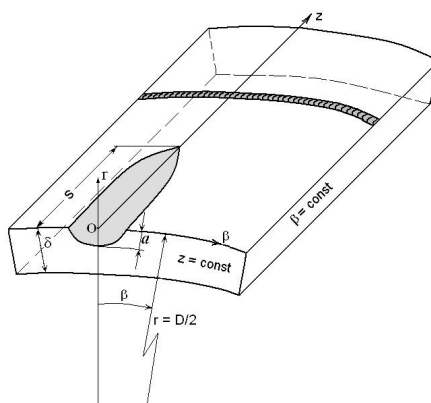


Рис. 5. Схема ділянки трубопроводу з локальним стоншенням стінки і коловим зварним швом

Задачі розв'язувались з використанням одного з кластерів, підключених до ґрід-мережі. За отриманими розв'язками визначались величини деформацій конструкції, а також значення зусиль та напруг під дією внутрішніх та зовнішніх сил та досліджувались залежності від відстані між дефектом стоншування і коловим зварним швом граничного тиску в трубопроводі та розподілу об'ємної концентрації мікропор на даній ділянці трубопроводу при граничному навантаженні.

Нижче в таблиці наведено часові характеристики виконання деяких розрахунків. В ґрід-мережі розрахунки виконувались на інтелектуальній робочій станції Інпарком-GPU, який має наступні параметри – до 32 вузлів (кожен вузол має 2 чотириядерні процесори Intel Xeon 5606, 2,13 ГГц, 24 Гб оперативної пам'яті).

№ п.п.	Напруга сколу $S_k$	Параметри СЛАР	Кіл-ть СЛАР	Критичне навантаження	Час виконання			
					Послідовний варіант на перс. комп'ютері		Паралельний варіант на Інпарком-GPU в ґрід	
					1 СЛАР	Загальний час	1 СЛАР	Загальний час
1	1 000	$n = 126\ 000$ $m_l = m_u = 902$	1		11 хв.		12 сек.	
2	1 000	$n = 55\ 650$ $m_l = m_u = 1\ 052$	485	15,2	3 хв.	65 год. 52 хв.	7 сек.	3 год. 10 хв.
3	800	$n = 55\ 650$ $m_l = m_u = 1\ 052$	588	16,2	3 хв.	80 год.	8 сек.	4 год.
4	900	$n = 55\ 650$ $m_l = m_u = 1\ 052$	619	16,6	3 хв.	84 год.	8 сек.	4 год.

Наведені результати свідчать, що використання високопродуктивних обчислень на кластерах для чисельного моделювання процесів зварювання та споріднених технологій дозволяє суттєво скоротити час на виконання розрахунків: при розв'язуванні СЛАР – в  $\approx 50$  раз, а всієї задачі – більше, ніж 20 раз. Тобто замість декількох діб на один варіант розрахунку потрібно декілька годин). Слід також взяти до уваги, що, наприклад, архітектура Інпарком-GPU дозволяє одночасно проводити до 32 різних варіантів таких розрахунків напружено-деформованого і граничного станів трубопроводів.

## Висновки

Проведені дослідження і апробація програмного комплексу "3D-osesim-cluster" на робочих станціях Інпарком показали перспективність створення програмних засобів для розв'язування прикладних задач на паралельних комп'ютерах кластерного типу шляхом вбудовування паралельних програмних модулів для

вирішення окремих підзадач в існуючі програмні комплекси в різних галузях науки і техніки.

Розроблене програмне забезпечення може працювати як безпосередньо на комп'ютерах (кластерних комплексах) користувача, так і у віддаленому режимі, використовуючи запропоновану ґрід-технологію. Перевагою даної технології є те, що використання паралельного обчислювального ресурсу дозволяє підвищити покращує якість математичного моделювання відповідних процесів, а ґрід – суттєво зменшити економічні витрати на виконання розрахунків. Також така технологія на багато вузловому кластері надає можливість виконувати одночасні розрахунки багатьох варіантів задачі.

Запропоновані підходи та технології є перспективними як з точки зору розширення кола задач, що розв'язуються, так і створення програмних комплексів для проведення розрахунків на комп'ютерах з гібридною архітектурою.

## Література

1. Хіміч О.М., Попов О.В., Полянко В.В. Технології високопродуктивних обчислень для дослідження та розв'язування задач розрахунку міцності конструкцій // Искусственный интеллект, №3, 2010 г. – С. 141-150.
  2. Махненко В.И., Попов А.В., Семенов А.П., Химич А.Н., Яковлев М.Ф. Математическое моделирование на МІМД-комп'ютерах физических процессов при сварке // УСиМ, №6, 2007 г. – С. 80–87.
  3. Xue L. Constitutive modeling of void shearing effect in ductile fracture of porous materials. // Engineering Fracture Mechanics – №75. – 2008. – P. 3343–3366.
  4. Махненко В.И. Проблемы экспертизы современных сварных конструкций ответственного назначения // Автоматическая сварка. – №5. – 2013. – С. 22–29.
  5. Карзов Г.П., Марголин Б.З., Швецова В.А. Физико-механическое моделирование процессов разрушения. Спб.: Политехника, 1993. – 391 с.
  6. Химич А.Н., Попов А.В., Полянко В.В. Алгоритмы параллельных вычислений для задач линейной алгебры с матрицами нерегулярной структуры // Кибернетика и системный анализ, №6, 2011 г. – С. 159-174.
  7. Хіміч О.М., Баранов А.Ю. Гібридний алгоритм розв'язування лінійних систем зі стрічковими матрицями прямими методами // Комп'ютерна математика. Зб. наук. праць. – 2013. – Вип. 2. – С.80– 87.
  8. Хіміч О.М., Попов О.В., Полянко В.В. Проблеми паралельних і розподілених обчислень при дослідженні математичних моделей з розрідженими структурами даних. // Праці Міжнародної наукової конференції “Питання оптимізації обчислень (ПОО-XL)” – Київ: Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2013. – С.267– 268.
  9. Попов О.В. Про ефективний метод розв'язування некоректних задач з розрідженими матрицями. // Теорія оптимальних рішень. Зб. наук. праць. – 2013. – С.77– 81.
  10. Попов О.В. Про паралельні алгоритми факторизації розріджених матриць // Комп'ютерна математика. Зб. наук. праць. – 2013. – Вип. 2. – С.115– 124.
- 
-