

А. П. Соколов, В. Н. Щетинин, А. С. Сапелкин

## Параллельный алгоритм реконструкции поверхности прочности композиционных материалов для архитектуры Intel MIC (Intel Many Integrated Core Architecture)

**Аннотация.** Целью исследования было создание параллельной программной реализации численного метода реконструкции моделей поверхности прочности первичного разрушения исследуемых композиционных материалов. Использовался квадратичный критерий прочности Малмейстера-Ву. В основе использовались методы асимптотического осреднения (Бахвалов Н.С., Победра Б.Е.) и конечных элементов. Программная реализация была создана в рамках графоориентированной технологии, реализованной в Распределенной вычислительной системе GCD для архитектуры Intel MIC. Были проведены вычислительные эксперименты для серии моделей композиционных материалов, задаваемых их схемами армирования («ячейками периодичности»), по определению сечений поверхности прочности первичного разрушения. Рассматривались 3D-армированный, 1D-армированный и композит специального типа (армированное клеевое соединение). Результаты расчетов представлены.

**Ключевые слова и фразы:** микромеханика композиционных материалов, упругие и прочностные характеристики, квадратичный критерий разрушения, гомогенизация, численные методы решения обратных задач, высокопроизводительные вычисления, распределенные системы, метод конечных элементов, метод асимптотического осреднения.

### Введение

В процессе решения прикладных задач анализа механических характеристик композиционных материалов (КМ) часто применяют численные подходы, одним из которых является метод асимптотического осреднения (МАО), который в зарубежной литературе часто называется просто гомогенизацией [1, 2]. В основе метода лежит решение серии краевых задач  $L_{pq}$  специального вида, называемых

---

Работа проведена на инициативной основе.

- © А. П. Соколов, В. Н. Щетинин, А. С. Сапелкин, 2015  
© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015  
© ПРОГРАММНЫЕ СИСТЕМЫ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ, 2015

«локальными» [3], каждая из которых решается методом конечных элементов (МКЭ) [4, 5].

В процессе инженерного анализа композитных конструкций МАО используется для того, чтобы обеспечить замену неоднородного материала композитного элемента исследуемой конструкции эквивалентным материалом с осредненными характеристиками, которые называются эффективными [6].

МАО обеспечивает возможность предварительного расчета линейных характеристик периодических гетерогенных структур, с помощью которых могут быть описаны схемы армирования композиционных материалов, используемых в конструкции. К таким характеристикам следует отнести эффективные упругие (тензоры модулей упругости  $C_{ijkl}$ ), тепловые (тензоры теплопроводности  $\alpha_{ij}$ ), электростатические и прочие характеристики. После определения ЭХ композитные элементы исследуемой конструкции могут быть заменены на эквивалентные однородные с определенными свойствами. Далее, к примеру, в процессе решения задач о напряженно-деформируемом состоянии (НДС) композитные элементы конструкции могут быть разбиты на значительно более грубую конечно-элементную сетку, что позволяет существенно снизить вычислительные затраты.

Для практически значимых задач, однако, расчет упругих характеристик композитов не столь актуален<sup>1</sup>. Чаще встает задача определения эффективных упруго-прочностных характеристик либо задача проектирования композиционного материала с заданными характеристиками.

**Объектом** настоящего исследования были эффективные упруго-прочностные характеристики (ЭУПХ) композиционных материалов, описываемых различными схемами армирования<sup>2</sup>.

К эффективным упругим свойствам КМ относят:

- компоненты тензора модулей упругости  $C_{ijkl}$ , где здесь и далее  $i, j, k, l \in \{1, 2, 3\}$  в предположении рассмотрения задачи в трехмерной постановке;
- компоненты тензора упругих податливостей  $\Pi_{ijkl}$ ;

---

<sup>1</sup>На практике обычно помимо упругих свойств материала также важно знать предельно допустимые нагрузки, которые способен выдержать материал конструкции до потери несущей способности.

<sup>2</sup>В работе исследовались ЭУПХ КМ различных схем армирования: волокнистые 3D и 1D армированные КМ, а также были проведены расчеты ЭУПХ армированного сферическими включениями клеевого соединения.

- технические константы материала: модули Юнга  $E_i$ , модули сдвига  $G_{ij}$ , коэффициенты Пуассона  $\nu_{ij}$ ;
- компоненты тензора концентрации напряжений<sup>3</sup>  $B_{ijkl}(\varepsilon)$ .

При расчете прочностных характеристик исследовались пределы первичного разрушения (пределы пропорциональности), а также определялись сечения эффективной поверхности прочности первичного разрушения.

А именно, в работе определялись:

- эффективные пределы первичного разрушения композита (пределы пропорциональности):  $\sigma_{\{\tau|s|c\}}$  на растяжение, сжатие, сдвиг, и, для наиболее общего случая, пределы прочности в 6-тимерном пространстве тензора напряжений:  $\sigma_{xLMNPST}$ , где введены индикаторы:
  - $x \in \{p, y, u\}$ , где  $p$  – предел пропорциональности,  $y$  – предел текучести,  $u$  – предел полного разрушения;
  - $L, M, N, P, S, T \in \{0, E, C\}$ , где  $E$  – Extension (растяжение),  $C$  – Compression (сжатие),  $0$  – указывает на отсутствие нагрузок<sup>4</sup>;
- поля функций повреждаемости<sup>5</sup>;
- сечения поверхности прочности в осях выбранных компонент тензора напряжений  $\sigma_{ij}$ .

Задача расчета ЭУПХ КМ для фиксированного простого пути нагружения требует существенных вычислительных ресурсов<sup>6</sup>.

Для расчета сечения поверхности прочности может потребоваться многократный расчет ЭУПХ КМ для различных путей нагружения в плоскости, заданной двумя выбранными компонентами тензора

<sup>3</sup>Тензор связывает локальные микронапряжения  $\sigma_{ij}(\varepsilon)$  в ячейке периодичности исследуемого композита и средние напряжения  $\sigma_{ij}$  на более высоком масштабном уровне.

<sup>4</sup>Например,  $\sigma_{yE00000} = \sigma_t$  предел текучести при растяжении вдоль оси  $Ox$ .

<sup>5</sup>Функции повреждаемости определялись выбранным критерием разрушения материала. Для настоящего исследования использовался критерий прочности Малмейстера-Ву[7].

<sup>6</sup>Например, в процессе применения MAO для определения ЭУПХ КМ (первичного разрушения) необходимо: а) определить упругие ЭХ КМ, что требует решения серии задач  $L_{pq}$  МКЭ (в общем случае 6 задач с разными краевыми условиями); б) для выбранного простого пути нагружения необходимо вычислить предел пропорциональности на основе выбранных критериев прочности каждой компоненты исследуемого КМ. На современном персональном компьютере такой расчет может занять около 1 минуты при условии, что число конечных элементов в расчетной сетке составляет порядка  $10^6$ ).

напряжений  $\sigma_{ij}$ . Такой расчет для нескольких сотен путей нагружения приведет к часовым временным затратам.

Таким образом появляется необходимости задействовать высокопроизводительные вычислительные ресурсы.

В настоящей работе был разработан параллельный алгоритм вычисления пределов первичного разрушения  $\sigma_{pLMNPST}$ . Программная реализация была построена с использованием графо-ориентированной технологии [8], применяемой для создания программных реализаций сложных вычислительных методов в рамках **Распределенной вычислительной системы GCD**. Вычислительные эксперименты были проведены с использованием высокопроизводительной вычислительной системы на основе архитектуры **Intel MIC**, что позволило получить сечения поверхностей прочности серии различных композиционных материалов.

**Распределенная вычислительная система GCD** обеспечила возможность задействовать удаленные вычислительные ресурсы, управляя процессом постановки задачи локально на клиентской машине. **Лаборатория информационных технологий (ЛИТ) Объединенного института ядерных исследований (Laboratory of Information Technologies of Joint Institute for nuclear research)** любезно предоставила доступ к высокопроизводительной вычислительной системе на базе архитектуры **Intel MIC** для проведения тестовых вычислительных экспериментов.

## 1. Постановка задачи построения поверхности прочности композиционного материала

### 1.1. Прочностные характеристики композиционного материала для пространственного случая

Напряженно-деформированное состояние материала в общем случае определяется тензором напряжений  $\underline{\sigma}$ . Для пространственного случая в классической теории упругости тензор напряжений симметричен и имеет 6 независимых компонент. Существует ряд математических теорий прочности [7, 9–12] и все они базируются на введении и вычислении специальной скалярной функции **повреждаемости** с последующим ее сравнением с единицей:

$$(1) \quad F(\sigma_{ij}(\mathbf{x}), S^\alpha(\mathbf{x})) \vee 1,$$

где  $\mathbf{x}$  – декартовы координаты точки,  
 $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$  – текущее напряженно-деформированное состояние в точке  $\mathbf{x}$ ,  
 характеризуемое значениями компонент тензора напряжений,  
 $S^\alpha(\mathbf{x})$  – прочностные характеристики материала в точке  $\mathbf{x}$ .

Т.о. для того, чтобы обеспечить численное моделирование процесса разрушения материала (композита в частности и, в некоторых случаях, нанокompозитов), необходимо:

- (1) ввести универсальное обобщенное обозначение **технических пределов прочности**, а именно пределов пропорциональности, текучести и полного разрушения материала в точке;
- (2) выбрать наиболее универсальный критерий прочности материала, который мог бы быть применим для большинства материалов (был выбран частный случай тензорно-полиномиального критерия Гольденבלата-Копнова [13] – квадратичный критерий Малмейстера-Ву [7]).

**ОБОЗНАЧЕНИЕ 1.1.** Введем общее обозначение технических пределов прочности (пределов пропорциональности, текучести и полного разрушения) в 6-тимерном пространстве тензора напряжений:

$$\sigma_{tLMNPST},$$

где  $t \in \{p, y, u\}$ ;

где  $p$  – обозначение для пределов упругости или пропорциональности (*Proportional limit*);

$y$  – обозначение для пределов текучести (*Yield strength*);

$u$  – обозначение для пределов полного разрушения (*Ultimate strength*);

$\{L, M, N, P, S, T\} \in \{0, E, C\}$ , где  $E$  – индикатор растяжения (*Extension*),

$C$  – индикатор сжатия (*Compression*);

$0$  – указывает на отсутствие НДС по соответствующей компоненте тензора напряжений;

положение каждого индекса соответствует определенной компоненте тензора напряжений:  $L \rightarrow \sigma_{11}$ ,  $M \rightarrow \sigma_{22}$ ,  $N \rightarrow \sigma_{33}$ ,  $P \rightarrow \sigma_{12}$ ,  $S \rightarrow \sigma_{13}$ ,  $T \rightarrow \sigma_{23}$ .

Например, используя введенные обозначения:  $\sigma_{eE00000} = \sigma_\tau$  – предел пропорциональности при растяжении вдоль оси  $OX$ ;  $\sigma_{u00C000} = \sigma_c$  – предел полного разрушения при сжатии по оси  $OZ$ ;  $\sigma_{u000E00} = \sigma_s$  – предел полного разрушения при сдвиге в плоскости  $OXY$ ;  $\sigma_{yE00000} = \sigma_t$  – предел текучести при растяжении вдоль оси  $OX$ .

**ОБОЗНАЧЕНИЕ 1.2.** *Простым путем нагружения будем называть прямую, индуцированную базисным вектором  $\vec{\sigma} = (a, b, c, d, e, f)^T$ , определенным в 6-тимерном пространстве тензора напряжений, где  $a \rightarrow \sigma_{11}$ ,  $b \rightarrow \sigma_{22}$ ,  $c \rightarrow \sigma_{33}$ ,  $d \rightarrow \sigma_{12}$ ,  $e \rightarrow \sigma_{13}$ ,  $f \rightarrow \sigma_{23}$ ;  $\{a, b, c, d, e, f\} \in \{0, 1, -1\}$ , где значение '1' его компоненты указывает на увеличение (или растяжение), а значение '-1' его компоненты указывает на уменьшение (или сжатие) соответствующей компоненты тензора напряжений:*

**ОБОЗНАЧЕНИЕ 1.3.** *Будем называть эффективными техническими упруго-прочностными характеристиками исследуемого КМ:*

- (1) *технические упругие постоянные, получаемые на основе компонент эффективного тензора модулей упругости  $C_{ijkl}$  и эффективного тензора упругих податливостей  $\Pi_{ijkl}$  при допущении об ортотропности модели гомогенизированного композиционного материала:*
  - модули Юнга  $E_X, E_Y, E_Z$ ;
  - коэффициенты Пуассона  $\nu_{XY}, \nu_{YZ}, \nu_{XZ}$ ;
  - модули сдвига  $G_{XY}, G_{YZ}, G_{XZ}$ ;
- (2) *осредненные технические пределы прочности первичного разрушения в обозначениях, введенных выше:*
  - $\sigma_{pLMNPST}$ , где  $\{L, M, N, P, S, T\} \in \{0, E, C\}$ .
  - параметры  $L, M, N, P, S, T$  определяются выбранным в данный момент простым путем нагружения (см. Обозначение 1.2)<sup>7</sup>.

## 1.2. Упрощенный квадратичный критерий прочности

Будем использовать критерий прочности, записанный в следующей форме:

$$(2) \quad B\sigma + \frac{1}{3}B_1\sigma^2 + B_2\sigma_i^2 = 1$$

Константы  $B, B_1, B_2$  можно выразить через пределы прочности:

- на растяжение  $\sigma_T$ ,
- на сжатие  $\sigma_C$ ,

<sup>7</sup>Следует отметить, что общее число  $M$  простых путей нагружения, исходя из введенного обозначения 1.2, определяется по формуле  $M = 3^6 - 1 = 728$ [7], что фактически определяет общее число пределов прочности, которые могут быть найдены для выбранного КМ в рамках данной теории прочности.

- на сдвиг  $\sigma_s$ .

$$(3) \quad B = \frac{1}{\sigma_\tau} - \frac{1}{\sigma_c}$$

$$(4) \quad B_1 = \frac{3}{\sigma_\tau \sigma_c} - \frac{1}{\sigma_s^2}$$

$$(5) \quad B_2 = \frac{1}{3\sigma_s^2}$$

где  $\sigma = I_1(\sigma_{ij})$  – первый инвариант тензора напряжений,  $\sigma_i$  – интенсивность тензора напряжений:

$$(6) \quad I_1(\sigma) = \sigma_{ii}g^{ii} = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33},$$

для декартовой системы координат.

$$(7) \quad \sigma_i = \sqrt{\frac{1}{2}((\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{11} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2))},$$

### 1.2.1. Инверсия прочности

Случай, когда  $\sigma_c = \sigma_\tau$ , т.е. когда прочность материала на сжатие и растяжение одинакова, называют инверсией прочности[7]. В этом случае коэффициент  $B = 0$ .

Не ограничивая общности в формулах при этом используют только предел прочности на растяжение  $\sigma_\tau$ . С учетом этого факта преобразуем (2), подставив в соотношение критерия прочности выражения для констант прочности  $B_1, B_2$ , получим:

$$\frac{1}{3} \left( \frac{3}{\sigma_\tau^2} - \frac{1}{\sigma_s^2} \right) I_1(\sigma)^2 + \frac{1}{3\sigma_s^2} \sigma_i^2 = 1$$

$$\left( \frac{1}{\sigma_\tau^2} - \frac{1}{3\sigma_s^2} \right) (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})^2 + \frac{1}{3\sigma_s^2} \times \\ \times \left( \frac{1}{2} ((\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{11} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2)) \right) = 1$$

раскроем скобки и упростим полученное соотношение. Т.о. получим вид упрощенного квадратичного критерия прочности:

$$(8) \quad \frac{1}{\sigma_\tau^2} (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})^2 + \frac{1}{\sigma_s^2} (\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2 - \sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{11}\sigma_{33} - \sigma_{22}\sigma_{33}) = 1$$

### 1.2.2. Устранение допущения об инверсии прочности

Допущение об инверсии прочности в процессе математического моделирования напряженного-деформированного состояния представительного элемента композиционного материала («ячейки периодичности») или целой конструкции может быть устранено.

Для этого следует различать прочностные характеристики на сжатие  $\sigma_c$  и растяжение  $\sigma_\tau$ .

Т.о. представленный выше критерий прочности принимает вид:

$$(9) \quad \left( \frac{1}{\sigma_\tau} - \frac{1}{\sigma_c} \right) (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}) + \frac{1}{\sigma_\tau^2} (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})^2 + \frac{1}{\sigma_s^2} (\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2 - \sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{11}\sigma_{33} - \sigma_{22}\sigma_{33}) = 1$$

### 1.3. Квадратичный критерий прочности в общем виде

Наиболее широко используемым критерием прочности является тензорно-полиномиальный критерий Гольденבלата-Копнова или в некотором частном случае Цая-Малмейстера [7].

Введем функцию повреждаемости, как функцию компонент тензоров прочности и напряжения, следующим образом:

$$(10) \quad F(S^{(1)}, S^{(2)}, \sigma) = S_{ij}^{(1)} \sigma_{ij} + S_{ijkl}^{(2)} \sigma_{ij} \sigma_{kl},$$

где  $S^{(1)}, S^{(2)}$  – тензоры прочности второго и четвертого рангов соответственно, определяемые прочностными свойствами материала, а  $\sigma$  – тензор напряжений.

Критерий прочности записывается следующим образом:

$$(11) \quad F(S^{(1)}, S^{(2)}, \sigma) = 1.$$

При выполнении этого равенства достигается разрушение.

#### 1.4. Реконструкция поверхности прочности

ОБОЗНАЧЕНИЕ 1.4. *Поверхностью прочности* называется геометрическое место точек заданных неявно уравнением (1), с явно заданной функцией повреждаемости  $F(\sigma_{ij}(\mathbf{x}), S^\alpha(\mathbf{x}))$ .

Поверхность прочности может быть найдена путем построения ее аппроксимации при помощи метода наименьших квадратов, предварительно вычислив достаточное число опорных точек в пространстве тензора напряжений  $\sigma_{ij}$ .

В настоящей работе поверхность прочности не аппроксимировалась, а строились лишь ее сечения для заранее выбираемых секущих плоскостей в 6-тимерном пространстве тензора напряжений.

#### 1.5. Формальная постановка задачи

**Дано:**

- (1) Модель композиционного материала. Определена характерным объемом области КМ, определяющим схему армирования всего материала, и называемым ячейкой периодичности (ЯП)  $V^8$ . ЯП КМ  $V = \bigcup_{\alpha} V^\alpha$ , где  $\alpha \in \mathbf{N}$ ,  $\alpha$  – номер компоненты КМ (обычно выделяют наполнитель  $\alpha = 1$  и матрицу  $\alpha = 2$ ) [6]. Ячейка может обладать многоуровневой структурой, – в таком случае задано древовидное описание микроструктуры КМ [14], для которой определены геометрии всех необходимых ЯП для каждого структурного уровня  $V^{(n)}$ , где  $n$  – номер уровня. Геометрия ЯП задавалась с применением технологии Constructive Solid Geometry (CSG).
- (2) Каждый узел древовидного (или иерархического) описания микроструктуры КМ должен быть представлен своей ячейкой периодичности и для каждой ЯП должен быть определен набор материалов-компонентов. Для каждого материала-компонента должны быть заданы упруго-прочностные свойства.

---

<sup>8</sup>Ячейка периодичности (unit cell) определяет микроструктуру армирования композиционного материала в целом. Предполагается, что исследуемые КМ обладают строгой периодической структурой

- (а) Задан минимально достаточный набор упругих констант<sup>9</sup>: модули Юнга  $E_X, E_Y, E_Z$ ; коэффициенты Пуассона  $\nu_{XY}, \nu_{YZ}, \nu_{XZ}$ ; модули сдвига  $G_{XY}, G_{YZ}, G_{XZ}$ .
- (б) Задан минимально достаточный набор пределов прочности (пропорциональности)<sup>10</sup> каждого материала-компонента КМ.

**Определить:**

- (1) компоненты эффективного тензора модулей упругости  $C_{ijkl}$ ;
- (2) компоненты эффективного тензора упругих податливостей  $\Pi_{ijkl}$ ;
- (3) эффективные упругие модули: модули Юнга, коэффициенты Пуассона, модули сдвига;
- (4) эффективные технические пределы прочности первичного разрушения (пределы пропорциональности) для любых произвольно выбираемых простых путей нагружения, определяемых в 6-ти мерном пространстве тензора напряжений;
- (5) сечения поверхностей прочности первичного разрушения в заранее определенных двух выбранных осях компонент тензора напряжений.

**1.6. Метод асимптотического осреднения для нахождения упругих характеристик, тензоров концентрации напряжений и упругих податливостей КМ**

Метод асимптотического осреднения был предложен проф. Бавваловым Н.С. и проф. Победрей Б.Е. [6, 15] как инструмент, обеспечивающий математическое описание гетерогенных сред с периодической микроструктурой.

Подробно теория МАО и его программная реализация рассмотрены в диссертационном исследовании [16].

В рамках настоящего исследования МАО использовался как основа для расчета прочностных характеристик исследуемых КМ.

---

<sup>9</sup>Достаточный набор в смысле возможности определения: **а)** типа симметрии, к которому относится исходный материал-компоненты КМ; **б)** всех 21-ой независимых компонент тензора модулей упругости  $C_{ijkl}$ .

<sup>10</sup>Аналогично, достаточный в смысле возможности определения: **а)** типа симметрии; **б)** наличия или отсутствия инверсии прочности; **в)** всех **12-и** независимых компонент тензоров прочности второго  $S_{ij}^{(2)}$  и четвертого  $S_{ijkl}^{(4)}$  рангов (для анализа прочности как минимум на базе квадратичных критериев Малмейстера-Ву, Цая-Малмейстера, Гольденבלата-Копнова [7]).

## 1.7. Алгоритм поиска предела пропорциональности КМ для выбранного простого пути нагружения

Предел первичного разрушения или предел пропорциональности может быть легко найден аналитически без итеративного увеличения нагрузки.

Аналитический метод определения предела пропорциональности:

- (1) зададим простой путь нагружения  $\vec{\sigma} = (a, b, c, d, e, f)^T$ , компоненты этого базисного вектора становятся зависимыми при увеличении или уменьшении нагрузки меняются синхронно;
- (2) тензор концентрации напряжений  $B_{ijkl}(\xi)$  связывает средние напряжения  $\sigma_{kl}$  с локальными микронапряжениями  $\sigma_{ij}(\xi)$  в ЯП, что верно только для линейно-упругой модели деформирования, таким образом могут быть найдены поля компонент тензора напряжений  $\sigma_{ij}(\xi) = \alpha B_{ijkl}(\xi) \sigma_{kl}$  в ЯП без полного решения МКЭ;
- (3) простой путь нагружения  $\vec{\sigma}$  «домноженный» на параметр  $\alpha$  определяет средние напряжения  $\sigma_{kl}$ ;
- (4) подставив средние напряжения  $\sigma_{kl}$  и пределы прочности конкретной компоненты в уравнение  $F(\sigma_{ij}, S^\alpha) = 1$  будем получать уравнение (квадратное уравнение для квадратичного критерия Малмейстера-Ву) относительно  $\alpha$ .
- (5) Для несложных критериев прочности это уравнение может быть решено аналитически.

## 2. Программная реализация вычислительного алгоритма

Разработка программной реализации алгоритма решения поставленной задачи была осуществлена с использованием языка программирования C++, графоориентированной технологии построения программных реализаций сложных вычислительных методов **Распределенной вычислительной системы GCD**.

### 2.1. Особенности последовательной программной реализации алгоритма

- (1) Инициализация объектов:
  - (a) конечно-элементная сетка (**Mesh**);
  - (b) тип конечного элемента (**Finite Element Type**);

- (с) фиксированный для задачи поиска эффективных упругих характеристик набор из 6 граничных условий (ГУ), необходимых для метода гомогенизации (**BoundaryConditionsMap**), для каждой соответствующей задачи  $L_{pq}$ ;
  - (d) Данные о материалах-компонентах исследуемого КМ (**SLD** - Solid data).
- (2) Для всех краевых условий (для каждой задачи  $L_{pq}$ ) должна быть решена задача о напряженно-деформированном состоянии согласно следующей последовательности операций.
- (a) Инициализация объекта решателя разрешающей системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) (**LASSolver**).
  - (b) Ассемблирование матрицы жесткости и вектора правой части.
  - (c) Решение СЛАУ.
  - (d) По найденному полю вектора перемещений  $U_i$  решению в узлах поиск компонент тензора деформации  $\varepsilon_{ij}$  и тензора напряжений  $\sigma_{ij}$ .
- (3) Поиск тензора концентрации напряжений  $B_{ijkl}$ .
- (4) Расчет пределов первичного разрушения.
- (a) Инициализация набора простых путей нагружения.
  - (b) Вычисление пределов первичного разрушения (пропорциональности)  $\sigma_{pLMNPST}$ .

## 2.2. Особенности параллельной программной реализации алгоритма

### 2.2.1. Технические характеристики вычислительного узла

Программная реализация алгоритма вычисления точек сечений поверхностей прочности исследуемых КМ была реализована на вычислительном узле с архитектурой Intel MIC. Узел включает в себя: управляющий хост на базе 2-х процессоров Intel Xeon E5-2695 с общей памятью и сопроцессор Intel Xeon Phi 7120, подключенный к PCI слоту хоста.

Технические характеристики вычислительного узла:

- Intel Xeon E5-2695: а) 12 физических ядер с тактовой частотой 2.4 GHz (24 логических ядер); б) объем оперативной памяти: 64 Гб; в) объем кэш памяти ядра: 30 Мб; г) длина векторного регистра: 256 бит.
- Intel Xeon Phi 7120: а) 61 физическое ядро с частотой 1.238 GHz каждое (244 логических ядер); б) объем оперативной памяти:

16Гб; в) объем кэш памяти ядра: 30 Мб; г) длина векторного регистра: 512 бит.

Так же, следует отметить, что для компиляции был использован специализированный пакет Intel Parallel Studio 2016 XE Composer Edition.

### 2.2.2. Параллельный алгоритм поиска тензоров концентраций напряжений и упругих податливостей КМ

Легко заметить, что основная вычислительная часть последовательной схемы алгоритма может быть легко распараллелена: задачи  $L_{pq}$  о НДС для разных ГУ независимы и могут быть решены параллельно. Выделим пункты 1-3 последовательной схемы (см. стр. 11) в отдельный алгоритм поиска тензоров концентрации напряжений  $B_{ijkl}$  и упругих податливостей  $\Pi_{ijkl}$  КМ для возможности исследования эффективности его распараллеливания на процессоре Intel Xeon E5-2695. Суть параллельной схемы решения задачи заключается в независимом решении задач  $L_{pq}$  с выделением для каждой отдельного вычислительного потока. Многопоточное программирование осуществлялось при помощи технологии **OpenMP**. Отметим, что алгоритм не потребовал специальной подготовки данных для каждого потока: все данные инициализированные в пункте 1 схемы являются разделяемыми.

Схема параллельного алгоритма поиска тензоров концентраций напряжений и упругих податливостей КМ:

- (1) Инициализация объектов (аналогично последовательной схеме).
- (2) Инициализация 6-ти потоков в соответствии с числом задач  $L_{pq}$ , где  $\{p, q\} \in \{1, 2, 3\}$ .
- (3) Решение задач  $L_{pq}$  МКЭ в отдельных вычислительных потоках.
- (4) Барьерная синхронизация потоков по окончанию вычислений, слияние результатов вычислений.
- (5) Расчет тензора концентрации напряжений  $B_{ijkl}$  (аналогично последовательному алгоритму).
- (6) Расчет пределов первичного разрушения (аналогично последовательному алгоритму).

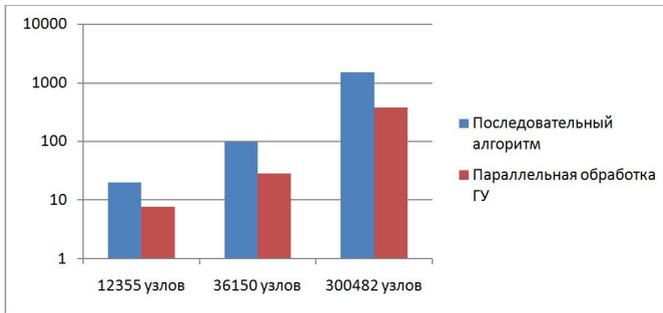


Рис. 1. Временные затраты при проведении расчетов на различных вычислительных сетках. По оси ординат шкала логарифмическая

### 3. Вычислительный эксперимент

#### 3.1. Сравнение ускорения при расчете на различных вычислительных сетках

| Число узлов в КЭ сетке | Время расчета (PC), [сек.] | Время расчета (Intel MIC), [сек.] |
|------------------------|----------------------------|-----------------------------------|
| 12355                  | 19.986                     | 7.693                             |
| 36150                  | 98.171                     | 28.705                            |
| 300482                 | 1530.980                   | 376.958                           |

#### 3.2. Параллельное вычисление СЛАУ в рамках метода сопряженного градиента CG

Для решения разрешающей СЛАУ МКЭ использовался метод сопряженного градиента (Conjugate Gradient (CG)). Основная ресурсоемкая операция этого итерационного метода – вычисление произведения матрицы на вектор. Эта операция хорошо распараллеливается как на системах с общей памятью, так и на системах с распределенной памятью. В предыдущем пункте для решения задачи мы заняли только 6 ядер процессоров хоста из 48 доступных.

Для распараллеливания метода CG были задействованы оставшиеся 42 логических ядра. Для хранения СЛАУ использовался формат CSR (Compressed sparsed row). Программный код был написан на языке программирования C++ в рамках PBC GCD.

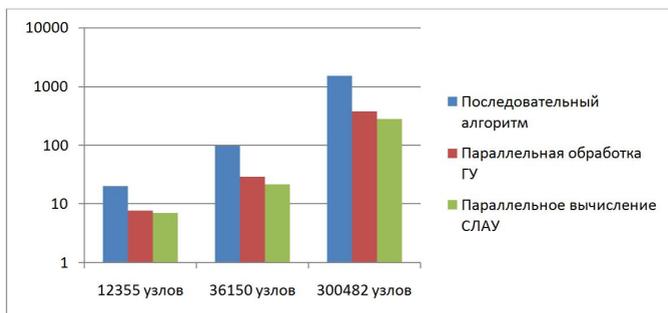


Рис. 2. Временные затраты при решении СЛАУ методом сопряженных градиентов на различных вычислительных сетках. По оси ординат шкала логарифмическая

| Число узлов в КЭ сетке | Время расчета (последовательный алгоритм), [сек.] | Время расчета (Параллельная обработка $L_{pq}$ , Intel MIC), [сек.] | Время расчета (Параллельное решение СЛАУ методом CG, Intel MIC), [сек.] |
|------------------------|---|---|---|
| 12355                  | 19.986  | 7.693   | 6.993   |
| 36150                  | 98.171  | 28.705  | 21.604  |
| 300482                 | 1530.980  | 376.958   | 277.398   |

Заметим, что такой подход обеспечивает существенное ускорение только на задаче с большим числом узлов и малое – на задачах с малым числом узлов, при том, что количество задействованных ядер увеличивается в 8 раз.

### 3.3. Использование векторных инструкций

Используемый процессор Intel Xeon E5-2695 имеет векторный регистр длиной 256 бит, что позволяет, используя набор команд ассемблера AVX векторизовать следующие части алгоритма:

- (1) решение СЛАУ;
- (2) вычисление компонент тензоров деформации и напряжений;
- (3) вычисление компонент тензора концентрации напряжений.

После векторизации были получены следующие результаты.

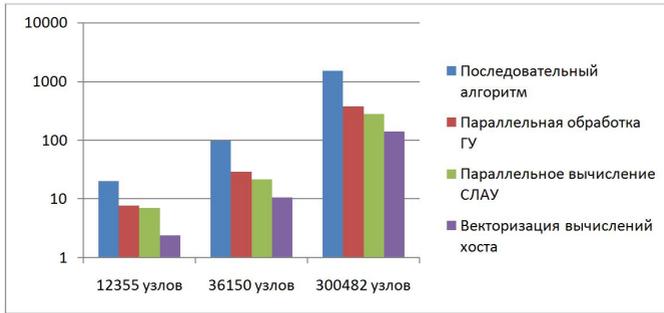


Рис. 3. Сравнительные временные затраты при решении задачи на различных вычислительных сетках. По оси ординат шкала логарифмическая

| Число узлов в КЭ сетке | Время расчета (последовательный алгоритм), [сек.] | Время расчета (Параллельная обработка $L_{pq}$ , Intel MIC), [сек.] | Время расчета (Параллельное решение СЛАУ методом CG, Intel MIC), [сек.] | Время расчета (после векторизации вычислительных операций, Intel MIC), [сек.] |
|------------------------|---|---|---|---|
| 12355                  | 19.986  | 7.693   | 6.993   | 2.38087   |
| 36150                  | 98.171  | 28.705  | 21.604  | 10.6767   |
| 300482                 | 1530.980  | 376.958   | 277.398   | 140.648   |

### 3.4. Параллельный алгоритм поиска пределов пропорциональности по заданному набору простых путей нагружения

С точки зрения параллельных вычислений расчет отдельного предела прочности по заданному фиксированному простому пути нагружения никак не связан с аналогичным расчетом для другого пути, что позволяет эффективно задействовать архитектуру Intel MIC в части многопоточного распараллеливания вычислений по отдельным

путям нагружения<sup>11</sup>.

### 3.4.1. Параллельный поиск пределов пропорциональности на хосте

Проведем поиск пределов пропорциональности только на хосте. Так как общее число логических ядер равно 48, то будем делить общее число простых путей нагружения на группы по 48. Расчет по каждой группе будем вести в отдельном OpenMP потоке.

Расчеты будем проводить на тех же конечно-элементных аппроксимациях ячеек периодичности исследуемых композитов. Заметим, что одна из размерностей тензора  $B$  совпадает с количеством конечных элементов, соответственно по ней можно судить о вычислительной сложности задачи. Количество точек поверхности прочности для всех экспериментов зададим равное 10 000.

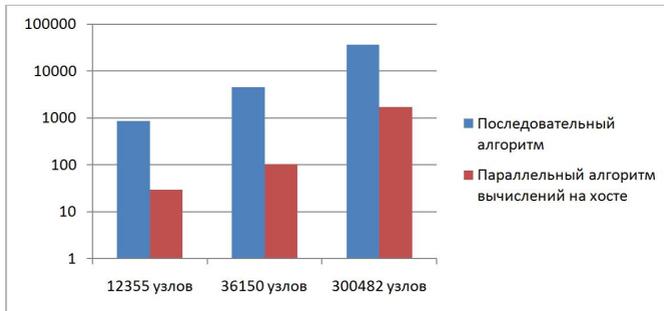


Рис. 4. Сравнительные временные затраты при решении задачи реконструкции сечений поверхностей прочности исследуемых КМ. По оси ординат шкала логарифмическая. Слева направо: последовательный алгоритм, параллельный алгоритм на хосте

<sup>11</sup>В ближайшее время планируется перенести эту вычислительную нагрузку на сопроцессор.

| Число узлов в КЭ сетке | Время расчета (последовательный алгоритм), [сек.] | Время расчета (Параллельная обработка отдельных путей нагружения в отдельных потоках), [сек.] |
|------------------------|---|---|
| 12355                  | 850   | 29.7729   |
| 36150                  | 4550  | 102.802   |
| 300482                 | 37041   | 1714.51   |

Отметим, что с ростом вычислительной нагрузки в параллельной части алгоритма производительность также возрастает.

### 3.4.2. Использование технологии *Offload* передачи данных между хостом и сопроцессорами

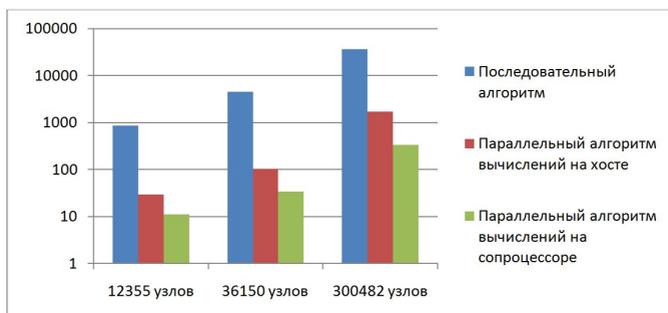


Рис. 5. Сравнительные временные затраты при решении задачи реконструкции сечений поверхностей прочности исследуемых КМ. По оси ординат шкала логарифмическая. Слева направо: последовательный алгоритм, параллельный алгоритм на хосте, параллельный алгоритм на сопроцессоре

| Число узлов в КЭ сетке | Время расчета (последовательный алгоритм), [сек.] | Время расчета (параллельная обработка отдельных путей нагружения в отдельных потоках), [сек.] | Время расчета (параллельная обработка отдельных путей нагружения в отдельных потоках на сопроцессоре), [сек.] |
|------------------------|---|---|---|
| 12355                  | 850   | 29.7729   | 11.233  |
| 36150                  | 4550  | 102.802   | 33.87   |
| 300482                 | 37041   | 1714.51   | 333.435   |

### 3.5. Примеры графических результатов расчетов

#### 3.5.1. Исследование 1D-дисперсно-армированного композиционного материала

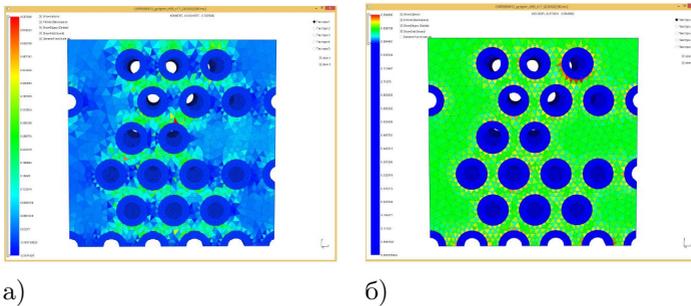


Рис. 6. Решения задач  $L_{pq}$  в рамках МГ: а),б) поля функции повреждаемости при сдвиге и сжатии вдоль оси армирования соответственно

#### 3.5.2. Исследование 3D-армированного композиционного материала

### 4. Выводы

- (1) В работе предложен алгоритм построения сечений поверхности прочности композиционного материала и его параллельная программная реализация для архитектуры Intel MIC. Показано, что

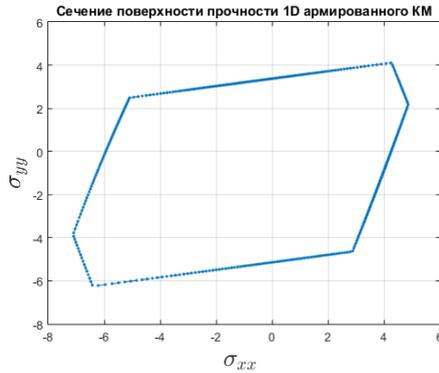


Рис. 7. Сечение поверхности прочности 1D армированного КМ в осях компонент тензора напряжений:  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}$

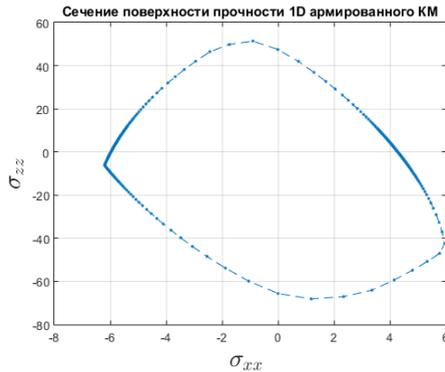


Рис. 8. Сечение поверхности прочности 1D армированного КМ в осях компонент тензора напряжений:  $\sigma_{xx}, \sigma_{zz}$

алгоритм может быть эффективно реализован на данной архитектуре.

- (2) В процессе проведения вычислительных экспериментов был получен существенный прирост производительности (более чем на 1 порядок), что было связано с использованием специализированного оптимизирующего компилятора Intel Compiler, обеспечивающего автоматическую векторизацию вычислительных матричных операций и активным использованием расширенных ин-

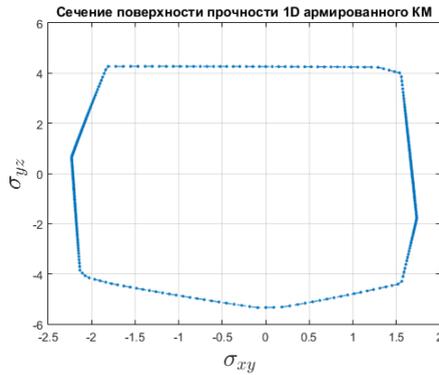


Рис. 9. Сечение поверхности прочности 1D армированного КМ в осях компонент тензора напряжений:  $\sigma_{xy}, \sigma_{yz}$

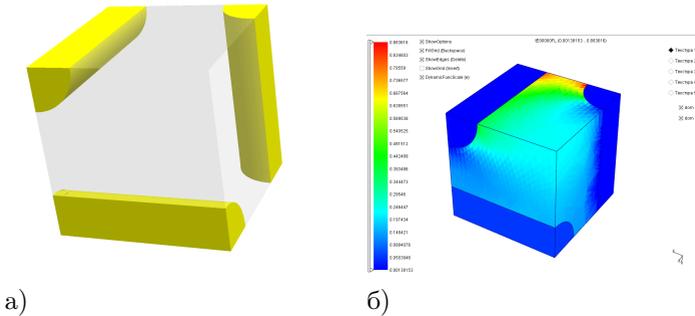


Рис. 10. Геометрия ЯП (слева) и поле функции повреждаемости при растяжении по оси  $Ox$  3D-армированного композиционного материала

струкций процессора SSE, AVX и библиотеки OpenMP в рамках архитектуры Intel MIC на процессорах Intel Xeon Phi. Существенный прирост производительности позволяет сделать **вывод о принципиальной возможности применения метода гомогенизации для прикладных задач проектирования новых композиционных материалов**<sup>12</sup>.

<sup>12</sup>Пример простейшей прикладной задачи оценки эффективных упруго-прочностных характеристик некоторого КМ: а) конечно-элементная аппроксимация геометрии ячейки периодичности модели схемы армирования КМ должна

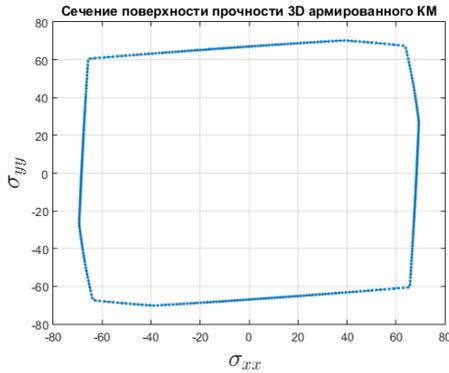


Рис. 11. Сечение поверхности прочности 3D-армированного КМ в осях компонент тензора напряжений:  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$

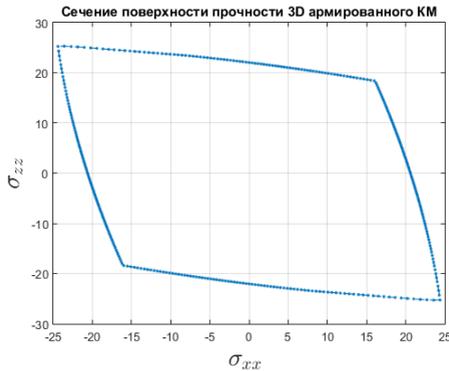


Рис. 12. Сечение поверхности прочности 3D-армированного КМ в осях компонент тензора напряжений:  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{zz}$

содержать **не менее 10 тыс. узлов** для получения удовлетворительных упругих характеристик методом гомогенизации; б) **минимум один-два входных параметра**, определяющих упругие характеристики компонент исследуемого КМ, могут быть заданы неточно, что приводит к необходимости их варьирования и решения минимум одно-дву-мерной задачи оптимизации, уточняя результат расчета на основе известных экспериментальных данных (для определенности будем считать двумерной). Для каждой точки в пространстве варьируемых параметров

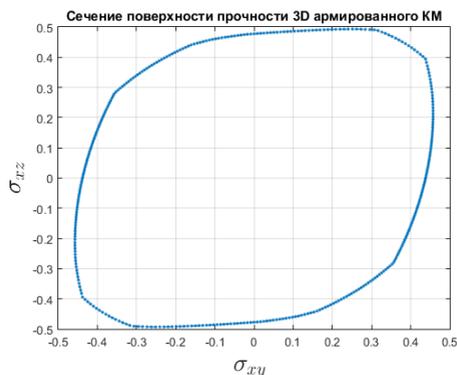


Рис. 13. Сечение поверхности прочности 3D-армированного КМ в осях компонент тензора напряжений:  $\sigma_{xy}, \sigma_{xz}$

- (3) Показано, что в алгоритме явно выделяются две части: вычисления на хосте и на сопроцессоре.
- (4) Разобраны несколько стадий распараллеливания алгоритма: многопоточное решение задач  $L_{pq}$ , параллельное решение СЛАУ, векторизация матричной алгебры, вынесение на сопроцессор вычислительных операций, требующих массивного параллелизма.
- (5) Вычислительные эксперименты продемонстрировали прирост производительности от реализации каждой стадии.
- (6) Проведено сравнение полного алгоритма с вынесением массивно параллельной части на сопроцессор и без; доказана эффективность первого подхода. Были использованы следующие технологии: OpenMP, SSE, AVX, Offload и оптимизатор бинарного кода компилятора Intel Compiler. Использование архитектуры

потребуется решение прямой задачи поиска ЭУПХ КМ методом гомогенизации, что, как показали вычислительные эксперименты, требует **около 2-х секунд** процессорного времени. Если считать, что для каждого неточно заданного параметра необходимо провести **минимум 10 варьирований**, то для проведения всего расчета потребуется  $10^n$  раз запустить процедуру гомогенизации, где  $n = 2$  число варьируемых параметров для рассматриваемой задачи. То есть решение всей задачи с применением предоставленной высокопроизводительной системы на базе архитектуры Intel MIC потребует времени порядка 200 секунд, что вполне удовлетворительно и позволяет успешно проводить отладку разработанной программной реализации и уточнение используемых математических моделей.

Intel MIC стало хорошей альтернативой вычислительной связке CPU+GPU для задач, обладающих свойством массивного параллелизма. Запланирована реализация данного алгоритма на CPU+GPU и проведение сравнительных исследований производительности.

- (7) Применение **графоориентированной технологии** построения программной реализации инструмента решения задачи реконструкции поверхностей прочности различных композиционных материалов в рамках **PBC GCD** обеспечило существенное сокращение сроков разработки, возможность удаленного запуска расчета, а также возможности последующих сопровождения и доработки созданных программных средств.
- (8) В работе были получены сечения поверхностей прочности ряда моделей КМ. При этом каждое сечение было построено на основе автоматически выбираемых **360-ти простых путей нагружения**. При этом соотношение вычислительных затрат на поиск упругих характеристик КМ методом гомогенизации и поиск всех пределов прочности по всем выбранным путям нагружения составило 1 : 1, что позволяет сделать вывод о технической возможности реконструкции трехмерных проекций 6-тимерной поверхности прочности с последующей ее визуализацией[7].

### Благодарности

Работа проведена на инициативной основе. Выражаем искреннюю благодарность сотрудникам **Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований** за предоставленные вычислительные мощности для осуществления тестовых расчетов.

### Список литературы

- [1] N. S. Bakhvalov, G. P. Panasenko. Homogenization: Averaging processes in periodic media. *Mathematical Problems in the Mechanics of Composite Materials. Mathematics and its Applications*, vol. **36**: Springer, 1989. ↑ 1.
- [2] G. Pavliotis, A. Stuart. *Multiscale methods: Averaging and homogenization. Texts in Applied Mathematics*, vol. **53**, 2008. ↑ 1.
- [3] М. А. А. Димитриенко Ю.И. Кашкаров А.И.. *Разработка конечно-элементного метода решения локальных задач теории упругости на ячейке периодичности для композитов с периодической пространственной структурой // Математика в современном мире / Под ред. Ю.А.Дробышева., 2004, с. 177–191. ↑ 2.*

- [4] Р. У. Э. Митчел. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными.: М.: Мир, 1981. ↑ 2.
- [5] О. Зенкевич. Метод конечных элементов в технике.: М.: Мир, 1975. ↑ 2.
- [6] Победря Б.Е.. Механика композиционных материалов: Москва: МГУ, 1984. ↑ 2, 9, 10.
- [7] A. K. Malmeister, V. P. Tamuj, G. A. Teters. The resistance of polymer and composite materials: Riga, Zinatne, 1980. ↑ 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 24.
- [8] Соколов А.П., Щетинин В.Н., Макаренков В.М.. Опыт применения теории графов для создания гибких сопровождаемых масштабируемых программных реализаций сложных вычислительных методов: Издательство МАИ, 2015. ↑ 4.
- [9] Победря Б.Е.. *Критерии прочности анизотропного материала* // Прикладная математика и механика, 1988. Т. 1, с. 141–144. ↑ 4.
- [10] Сендецки, Дж. Механика композиционных материалов: Мир, 1978. ↑ 4.
- [11] A. V. Ilinykh, V. E. Vildeman. *Modeling of structure and failure processes of granular composites* // Computational continuum mechanics, 2012. Vol. 5, no. 4, p. 443–451. ↑ 4.
- [12] Макарова Е.Ю., Соколкин Ю.В.. *Нелинейные многоуровневые модели механики деформирования и разрушения композитов* // Тезисы докладов iv-го Всероссийского симпозиума «Механика композиционных материалов и конструкций», June 4, с. 51. ↑ 4.
- [13] I. I. Goldenblat, V. A. Kopnov. *Strength of glass-reinforced plastics in the complex stress state* // Polymer Mechanics, 1966. Vol. 1, no. 2, p. 54–59. ↑ 5.
- [14] Димитриенко Ю.И., Соколов А.П.. *Многомасштабное моделирование упругих композиционных материалов* // Математическое моделирование, 2012. Т. 24, № 5, с. 3–20. ↑ 9.
- [15] Бахвалов Н.С.. *Осредненные характеристики тел с периодической структурой* // Докл. АН СССР, 1974. Т. Т.218, № 5, с. 1040. ↑ 10.
- [16] Соколов А.П.. *Математическое моделирование эффективных упругих композитов с многоуровневой иерархической структурой*, Ph.D. Thesis, МГТУ им. Н.Э. Баумана, (2008). ↑ 10.

*Об авторах:*

### Александр Павлович Соколов



Доцент по кафедрам «Вычислительная математика и математическая физика» и «Системы автоматизированного проектирования», читаемые курсы: «Основы программирования на C++», «Базы данных», «Основы метода конечных элементов», «Системное и прикладное ПО». Веду научно-исследовательскую деятельность в МГТУ им. Н.Э. Баумана по направлению: «Разработка распределенных вычислительных систем анализа свойств композиционных материалов». Автор Распределенной вычислительной системы GCD.

*e-mail:*

[alsokolo@bmmstu.ru](mailto:alsokolo@bmmstu.ru)



### **Виталий Николаевич Щетинин**

Студент кафедры «Системы автоматизированного проектирования». Область научных интересов: высокопроизводительные вычисления, разработка распределенных вычислительных систем, микромеханика композиционных материалов.

*e-mail:*

[sch\\_vitaly@mail.ru](mailto:sch_vitaly@mail.ru)



### **Арсений Сергеевич Сапелкин**

Студент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика». Область научных интересов: микромеханика композиционных материалов, разработка программных инструментов автоматического построения трехмерных моделей, высокопроизводительные вычисления, разработка распределенных вычислительных систем.

*e-mail:*

[asapelkin@bmstu.ru](mailto:asapelkin@bmstu.ru)

*Пример ссылки на эту публикацию:*

А. П. Соколов, В. Н. Щетинин, А. С. Сапелкин. «Параллельный алгоритм реконструкции поверхности прочности композиционных материалов для архитектуры Intel MIC (Intel Many Integrated Core Architecture)», *Программные системы: теория и приложения*, 2015, ??-?, с. ??-??.

URL

<http://psta.psiras.ru/read/>

Alexandr Sokolov, Vitaly Schetinin, Arseniy Sapelkin. *Strength surface reconstruction using special parallel algorithm based on Intel MIC (Intel Many Integrated Core) architecture.*

ABSTRACT. The main objective of this research was to create a parallel software implementation of a numerical method for the reconstruction of strength surface of initial failure of composite material under research. Quadratic tensor polynomial criterion named after Malmeyster-Woo was used. Asymptotic averaging method or homogenization (Nikolay.S. Bahvalov, Boris.E. Pobedria) and finite element method were used. Software implementation was developed using graph-based technology provided in Distributed computational system GCD using Intel MIC architecture. Computational experiments have been carried out for a series of models of composite materials defined by their reinforcement schemes (junit cells $_{i,j}$ ) to obtain the slice of its strength surface. Three types of composites were considered: 3D-reinforced, 1D-reinforced and one special type (reinforced composite compound). The results of calculations are presented.(*in Russian*).

*Key Words and Phrases:* micromechanics of composite materials, elastic and strength properties, quadratic failure criterion, homogenization, numerical methods for solving inverse problems, high performance computing, distributed systems, finite element method, the method of asymptotic averaging.

*Sample citation of this publication*

Alexandr Sokolov, Vitaly Schetinin, Arseniy Sapelkin “Strength surface reconstruction using special parallel algorithm based on Intel MIC (Intel Many Integrated Core) architecture”, *Program systems: theory and applications*, 2015, ??-?, pp. ??-??. (*In Russian*).

URL

<http://psta.psir.ru/read/>