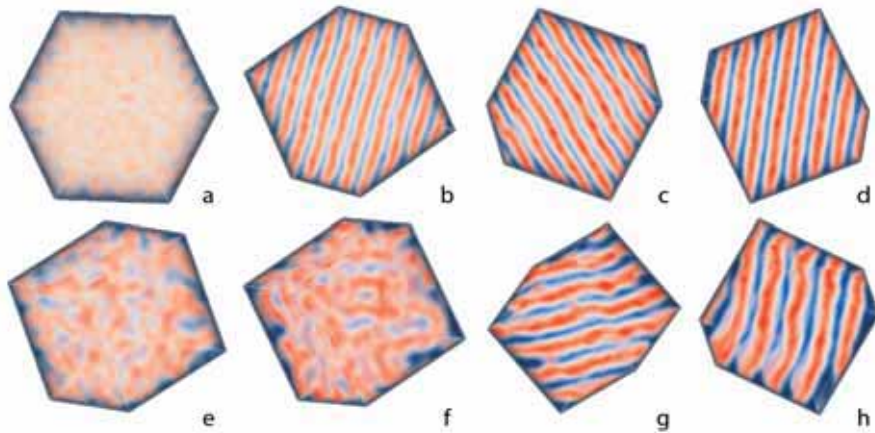
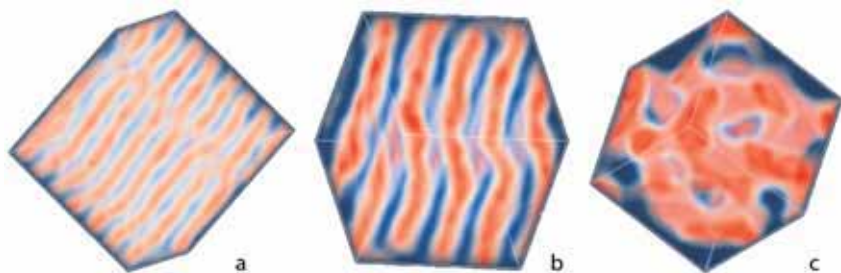


монстрирован нами на примере исследования фазового поведения мультиблок-сополимеров. Еще 3–4 года назад решать подобные задачи в России было невозможно, с вводом в эксплуатацию новых кластеров, таких, как «Чебышев» и «Ломоносов», данные задачи можно решить за 2–3 месяца (при использовании достаточного количества процессорных ядер).



**Рис. 4.**  
Скриншоты полученных систем: а) – reg-4 @  $\chi=3.1$ , б) – reg-4 @  $\chi=9.2$ , в) – reg-4 @  $\chi=15.3$ , д) – reg-4 @  $\chi=42.8$ , е) – ran-4 @  $\chi=3.1$ , ф) – ran-4 @  $\chi=9.2$ , г) – ran-4 @  $\chi=15.3$ , х) – ran-4 @  $\chi=42.8$



**Рис. 5.**  
Скриншоты систем при одинаковом  $\chi = 30.6$ : а) – ran-2, б) – ran-4, в) – ran-8

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kim H.-C., Park S.-M., Hinsberg W.D. // Chem Rev. 110 (2010). 146.
2. Abetz V., Simon P.F.W. // Adv. Polym. Sci. 189 (2005). 125.
3. Groot R.D., Warren P. B. // J. Chem. Phys. 107 (1997). 11.

## Использование суперкомпьютерных технологий в задачах прочности. Пакет Fidesys



## 25 Использование суперкомпьютерных технологий в задачах прочности. Пакет Fidesys

При проектировании практически любого изделия, которое в процессе эксплуатации подвергается механическим нагрузкам и другим воздействиям, требуется провести анализ прочности, который, в свою очередь, обычно включает в себя компьютерное моделирование. Моделирование может проводиться с использованием аппарата механики сплошной среды как на макро-, так и на наноуровне и на уровне молекулярной динамики. Такого рода моделирование часто является вычислительно емким, что и определяет необходимость использования для него суперкомпьютерных систем. Приведенные результаты расчетов получены на основе пакета прочностного анализа Fidesys.

### АВТОРЫ:

**В.А. Левин** – докт. физ.-мат. наук, профессор, каф. вычислительной механики мех.-мат. ф-та МГУ;  
e-mail: V.A.Levin@mail.ru

**А.В. Вершинин** – канд. физ.-мат. наук, доцент, каф. вычислительной механики мех.-мат. ф-та МГУ;  
e-mail: versh1984@mail.ru

**Д.И. Сабитов** – ассистент, каф. математического анализа мех.-мат. ф-та МГУ;  
e-mail: SabitovDI@yandex.ru

**И.В. Никифоров** – соискатель, каф. вычислительной механики мех.-мат. ф-та МГУ;  
e-mail: Ivan.Nikiforov@gmail.com

**Д.А. Пендюр** – аспирант, каф. вычислительной механики мех.-мат. ф-та МГУ;  
e-mail: PendyurDA@yandex.ru

Задачи прочности представляют интерес для многих отраслей промышленности: автомобильной, нанотехнологий, нефтегазовой отрасли, аэрокосмической промышленности, энергетики, машиностроения и станкостроения, оборонной промышленности, судостроения, электронной промышленности, телекоммуникационной отрасли, гражданского и промышленного строительства, химической промышленности, производства товаров массового спроса, разработки изделий и технологий, ориентированных на охрану окружающей среды.

Во всех перечисленных отраслях при проектировании изделий, которые в процессе эксплуатации подвергаются механическим нагрузкам и другим воздействиям, требуется провести анализ прочности [2], включающий в себя как обычный расчет напряженно-деформированного состояния в рамках классической механики сплошной среды с последующим анализом прочности по полученным напряжениям и деформациям, так и моделирование самого процесса разрушения, фазовые переходы, а также моделирование самой структуры материалов на наноуровне и на уровне молекулярной динамики [7, 8].

### Классические модели механики деформируемого твердого тела

При расчете напряженно-деформированного состояния в теле, т.е. при использовании «классических» моделей механики деформируемого твердого тела – упругости, вязкоупругости, пластичности, могут быть использованы различные численные методы, имеющие общую суть. В основе всех этих методов лежит разбиение тела на элементы, которые обладают достаточно простой геометрией (треугольники или четырехугольники в двумерном случае и тетраэдры или гексаэдры в трехмерном [3]) и внутри которых значение любого параметра напряженно-деформированного состояния в произвольной точке определяется его значениями в конечном наборе точек элемента. Иными словами, при помощи такой дискретизации задача от бесконечномерной сводится к конечномерной. В результате приближенное решение исходной системы дифференциальных уравнений получается в общем случае путем решения системы или нескольких систем линейных алгебраических уравнений.

В пакете Fidesys [6] реализованы методы: конечных элементов (Finite Element Method, FEM) [2], спектральных элементов (Spectral Element Method, SEM) [5], разрывный метод Галеркина (Discontinuous Galerkin, DG) [4].

Поскольку в практических задачах часто требуется обеспечить как приемлемую точность расчетов, так и приемлемое время счета, то часто производительности «обычного» компьютера оказывается недостаточно по мощности



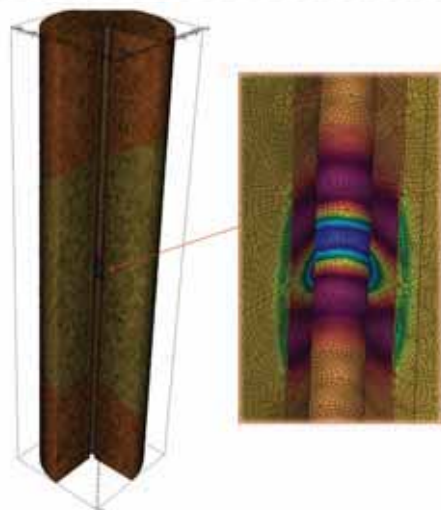


Рис. 1.  
Акустический каротаж в скважине

данной задачи был использован метод спектральных элементов, ее дискретизация содержала 40 000 000 расчетных узлов, расчет проводился на трех массивно-параллельных устройствах NVIDIA Tesla. Для распределения вычислительной нагрузки по узлам область расчета специальным образом разбивается на части, каждая из которых рассчитывается отдельным устройством (рис. 2).

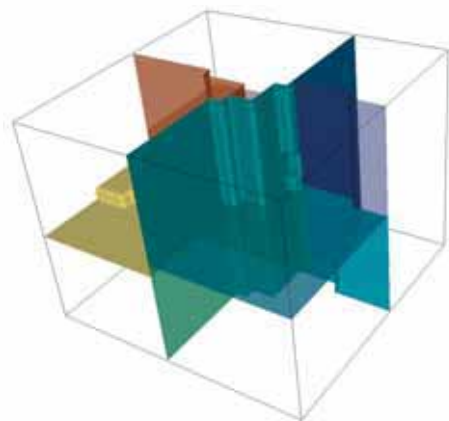


Рис. 2.  
Декомпозиция домена

процессоров и по объему памяти. Использование суперкомпьютеров в вычислениях позволяет решить эти проблемы. Некоторые примеры таких задач приведены ниже.

На рис. 1 представлен результат расчета напряженно-деформированного состояния в пласте при акустическом каротаже. Суть каротажа заключается в размещении в скважине источника волн, обычно ультразвукового диапазона с частотами в десятки килогерц, и последующем измерении их характеристик после прохождения через породу. Этот метод очень часто используется в геофизике, и подобного рода численное моделирование представляет весьма большую практическую ценность. Для решения

аналогичное разбиение области используется и при реализации решения задач методом конечных элементов с использованием технологии MPI [1] на кластере.

### Молекулярная динамика

Метод молекулярной динамики позволяет использовать атомарные модели наноразмерных образцов для проведения вычислительных экспериментов на растяжение и сдвиг образца

с целью определения его механических характеристик.

В методе молекулярной динамики атомы считаются материальными точками с определенной массой. Химические связи между ними моделируются с помощью задания сил, величина которых нелинейно зависит от расстояния между атомами [8].

При задании сил, действующих на атомы так, как показано на рис. 3 и 4, и проведении расчетов положений атомов можно получить константы материала, описывающие его упругие свойства. Точность расчета повышается, если образец материала взят достаточно большого размера. С вычислительной точки зрения это означает, что необходимо оперировать количеством атомов порядка нескольких миллионов.

Пакет Fidesys позволяет проводить расчеты для образцов, содержащих порядка 10 млн атомов. Подобная задача успешно решается на массивно-параллельных архитектурах, наиболее доступными из которых являются сейчас графические процессоры. Использование таких архитектур для расчетов позволило проводить вычислительные эксперименты на определение механических характеристик за время порядка нескольких часов и проводить расчеты для больших образцов, что невозможно при использовании РС.

Часть работы выполнена при поддержке РФФИ (проект 09-01-12056-офи\_м) и корпорации NVIDIA.

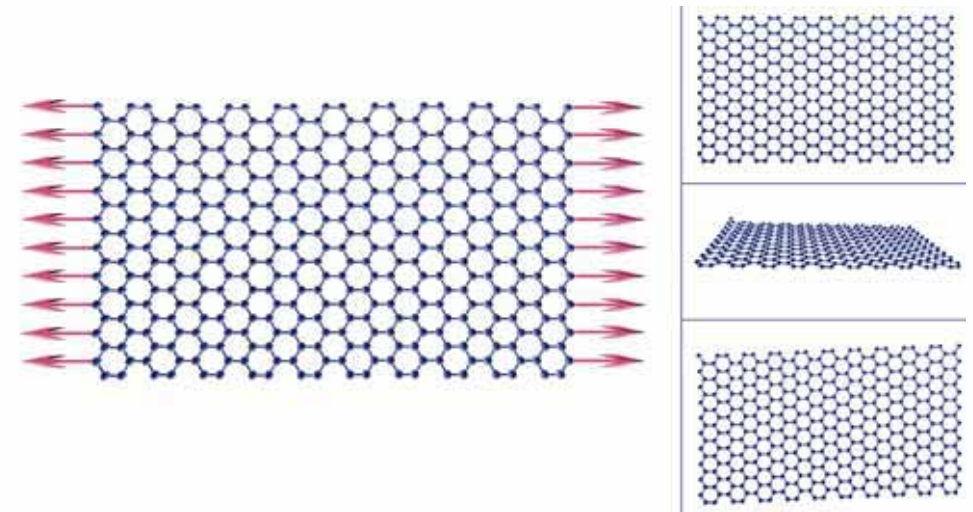


Рис. 3.  
Эксперимент на растяжение листа графена

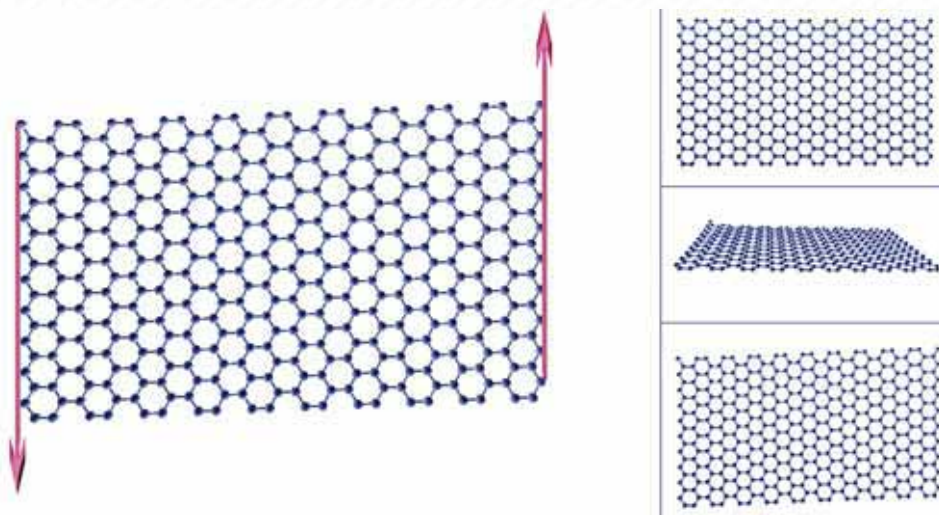


Рис. 4.  
Эксперимент на сдвиг листа графена

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
2. Левин В.А., Калинин В.В., Зингерман К.М., Вершинин А.В. Развитие дефектов при конечных деформациях. Компьютерное и физическое моделирование / Под ред. В.А. Левина М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007.
3. Василевский Ю., Данилов А. Взаимодействие с САПР для построения расчетных сеток в сложных областях // Труды Математического центра им. Н.И. Лобачевского. 2009. Т. 39. С. 5–12.
4. Kaser M., Dumbser M. An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes – II. The three-dimensional isotropic case // Geophys. J. Int. (2006) 167.
5. Komatitsch D., Barnes C., Tromp J. Wave propagation near a fluid-solid interface: A spectral-element approach // Geophysics. 2000. Vol. 65, N 2. P. 623–631.
6. Levin V.A., Zingerman K.M., Vershinin A.V., Freiman E.I., Kukushkin A.V., Trachenko A.V. Development and use of the CAE-system "FIDESYS" for nonlinear analysis of solids with microstructure that changed during loading /Keynote/. ECCM. Paris, 2010. — [https://www.eccm-2010.org/abstract\\_pdf/abstract\\_1650.pdf](https://www.eccm-2010.org/abstract_pdf/abstract_1650.pdf).
7. Levitas V. I., Levin V. A., Zingerman K. M., Freiman E. I. Displacive phase transitions at large strains: Phase-field theory and simulations // Physical Review Letters. 2009. Vol. 103, N 2. 025702.
8. Mazo M.A., Manevich L. I., Gusarova E.B., Shamaev M.Yu., Berlin A.A., Balabaev N.K., Rutledge G.C. Computer simulation of thermo-mechanical properties of layered nano-crystals for the example of montmorillonite crystal // Russian Journal of Mathematical Physics. Vol. 15, N 3. 2008. P. 419–421.

## Использование параллельных технологий для моделирования процесса теплообмена при изготовлении сложных изделий

