

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РАБОТОСПОСОБНОСТИ СВАРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ НА КОМПЬЮТЕРАХ ГИБРИДНОЙ АРХИТЕКТУРЫ

Аннотация. Рассмотрены высокопроизводительные расчетные алгоритмы для компьютеров гибридной архитектуры для решения задач прогнозирования напряженно-деформированного состояния ответственных сварных конструкций с учетом зарождения и развития докритического разрушения металла по механизму малоциклового усталости. Предложены алгоритмы применительно к характерным задачам анализа работоспособности сварных трубопроводных элементов с дефектами несплошности металла коррозионной природы.

Ключевые слова: математическое моделирование, высокопроизводительные вычисления, гибридные алгоритмы, напряженно-деформированное состояние, вязкое разрушение, сварные конструкции.

ВВЕДЕНИЕ

Использование методов математического и компьютерного моделирования для оценки прочности и работоспособности ответственных конструкций, деталей машин и механизмов позволяет существенно ускорить принятие обоснованных выводов о возможности безопасной эксплуатации и снизить количество натуральных испытаний. Достоверность необходимых экспертных оценок определяется как доскональностью моделей физических и технологических процессов, так и точностью численного решения соответствующих расчетных задач. В частности, для решения практических задач оценки прочности и остаточного ресурса сварных трубопроводов и сосудов давления в настоящее время широко используются методы конечно-элементного анализа их состояния в условиях сложного эксплуатационного воздействия. При проведении таких численных экспериментов, особенно, если моделирование проводится в режиме реального времени для больших элементов конструкций, требующих мелкой пространственной и временной детализации математических моделей, возникают расчетные задачи сверхбольшой размерности (до 10^7 степеней свободы) или с большим объемом данных. Это обуславливает высокие требования к вычислительным ресурсам компьютера.

Важным фактором, также ресурсоемким, является обеспечение достоверности полученных компьютерных решений, которая определяется как размерностью дискретных моделей, так и погрешностями исходных данных. Решение задач математического моделирования в такой постановке ввиду нехватки вычислительных ресурсов современных персональных компьютеров и рабочих станций требует перехода к новейшим компьютерным технологиям — использованию программно-технических комплексов с параллельной организацией вычислений, в том числе компьютеров гибридной архитектуры (объединяющих MIMD-архитектуру многоядерных процессоров и SIMD-архитектуру графических процессоров). Для максимальной эффективности использования параллельных вычислений соответствующие алгоритмы должны учитывать как особенности постановки проблемно-ориентированных технологических задач, так и особенности архитектуры компьютера.

В настоящей статье предложены высокопроизводительные расчетные алгоритмы для компьютеров гибридной архитектуры применительно к характерным

задачам анализа работоспособности сварных трубопроводных элементов с дефектами несплошности металла коррозионной природы.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО И ПРЕДЕЛЬНОГО СОСТОЯНИЙ ТРУБОПРОВОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ДЕФЕКТАМИ

Трубопроводные элементы (ТЭ) относятся к числу наиболее распространенных конструкций промышленных систем в тяжелой и химической промышленности, энергетике, авиакосмической отрасли. Для их эксплуатации характерно сложное температурно-силовое воздействие и часто в агрессивных (коррозионных) средах. Наличие монтажных кольцевых швов предполагает локальную структурную неоднородность материала и его сниженную сопротивляемость коррозионному повреждению. Поэтому для прогнозирования работоспособности сварных ТЭ необходимо последовательное решение достаточно трудоемких задач прогнозирования кинетики температуры и напряженно-деформированного состояния (НДС) при сварке вплоть до остаточного состояния конструкции, а также оценка предельного состояния в условиях эксплуатационного нагружения.

Так, кинетика температурного поля T во времени t определяется процессами кондуктивного переноса тепла в сплошной среде. С учетом особенностей рассматриваемой конструкции (рис. 1) и технологии сварки процессы теплопередачи могут быть описаны в цилиндрических координатах (r, β, z) нестационарным уравнением теплопроводности с граничными условиями второго рода [1]. Расчетная кинетика температурного поля конструкции при сварке лежит в основе анализа временного и остаточного напряженно-деформированного и поврежденного состояний металла трубопроводного элемента. Компоненты тензора деформаций ε_{ij} (в цилиндрической системе координат $i, j = r, \beta, z$; рис. 1) в рассматриваемом случае представлены в виде суммы [2]:

$$d\varepsilon_{ij} = d\varepsilon_{ij}^e + d\varepsilon_{ij}^p + (d\varepsilon_{ij}^T + df/3)\delta_{ij}, \quad (1)$$

где $d\varepsilon_{ij}^e$, $d\varepsilon_{ij}^p$, $d\varepsilon_{ij}^T$ — компоненты приращения тензора деформаций, определяемые соответственно упругим механизмом деформирования, пластическим течением и температурным расширением; f — объемная концентрация равномерно распределенной докритической поврежденности материала, которая может

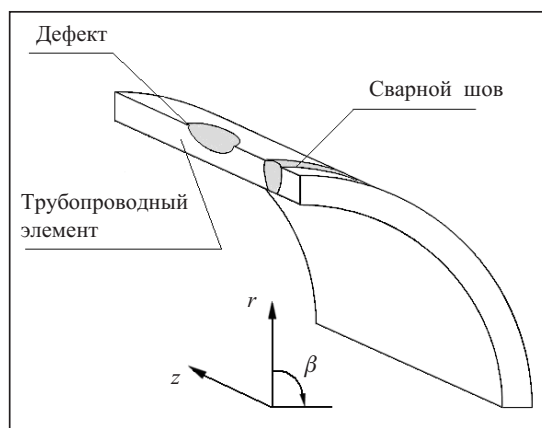


Рис. 1. Схема участка трубопровода с внешним полуэллиптическим дефектом локальной коррозионной потери металла

интерпретироваться как концентрация пор вязкого разрушения (ПВР). Такое допущение позволяет использовать достаточно апробированные методы анализа докритической поврежденности материала ответственных конструкций и сформулировать физически обоснованные критерии их предельного состояния.

Для оценки зарождения ПВР при пластическом течении материала в неизотермическом случае использовался модифицированный критерий Джонсона–Кука [3], согласно которому в некотором объ-

еме металла появляется начальная пористость с концентрацией f_0 при выполнении условия $\chi_k = \int \frac{d\varepsilon_i^p}{\varepsilon_c(T)} > 1$, где $d\varepsilon_i^p = \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{d\varepsilon_{ij}^p \cdot d\varepsilon_{ij}^p}$, $\varepsilon_c(T)$ — критическая величина пластических деформаций.

Рост концентрации ПВР в процессе пластического деформирования металла, в частности при эксплуатационном статическом или циклическом нагружении, подчиняется закону Райса–Грэйси [4].

Наличие в металле конструкции определенной концентрации ПВР вызывает не только появление деформационной составляющей (см. (1)), но и соответствующее изменение поведения сплошной среды при ее пластическом течении. В частности, поверхность текучести металла с приобретенной пористостью может быть описана в рамках модели Гурсона, Твергаарда и Нидлмана [5]. Конечно-элементное решение краевой задачи нестационарной термопластичности проводится путем прослеживания совместного развития упругопластических деформаций, докритического и критического разрушений по вязкому механизму. Для этого через каждый временной промежуток dt на основе известной кинетики нестационарного температурного поля при сварке и условия циклического нагружения при эксплуатации определяется напряженно-деформированное состояние конструкции с учетом характерных свойств используемого материала и современных представлений математического описания деформирования и разрушения сплошных сред. Так, зависимость деформации от напряжения определяется законом Гука и ассоциированным законом пластического течения, исходя из следующего соотношения [6]:

$$\Delta\varepsilon_{ij} = \Psi(\sigma_{ij} - \delta_{ij}\sigma_m) - \frac{1}{2G}(\sigma_{ij} - \delta_{ij}\sigma_m)^* + \delta_{ij}(K\sigma_m + \Delta\varepsilon_T + \Delta f/3) + (K\sigma_m)^*,$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, $K = (1-2\nu)/E$ — модуль объемного сжатия, E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона, $G = 0,5E/(1+\nu)$ — модуль сдвига, Ψ — функция состояния материала, символ * относит переменную к предыдущему шагу прослеживания.

Напряжение σ_{ij} на каждом шаге итерирования определяется следующим образом (при повторяющихся индексах проводится суммирование):

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{\Psi} \left(\Delta\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \frac{\Psi - K}{K} \Delta\varepsilon \right) + J_{ij},$$

$$\text{где } \Delta\varepsilon = \frac{\Delta\varepsilon_{ij}}{3}, \quad J_{ij} = \frac{1}{\Psi} \left[b_{ij} - \delta_{ij}b + \delta_{ij} \left(K\sigma^* - \frac{\Delta\varepsilon_T + \Delta f/3}{K} \right) \right], \quad b = \frac{b_{ii}}{3}.$$

В качестве критерия предельного состояния конструкции используется условие зарождения макроразрушения по хрупковязкому механизму, которое заключается в выполнении одной из трех зависимостей [7]:

$$\Psi - \frac{1}{2G} \geq \frac{\varepsilon_f - \varepsilon_p^*}{1,5 \sigma_i} \approx \frac{\varepsilon_f - \varepsilon_p^*}{1,5 \sigma_s(\varepsilon_p, T)},$$

$$f^* \rightarrow f_d^* = 2(q_1/q_3) \cos h(1,5 q_2 \sigma_m / \sigma_T) \quad (2)$$

$$\text{или } \frac{3\sigma_1}{3-2f} > S_K,$$

где S_K — напряжение, при котором возникает микроскол.

Компоненты тензора напряжений удовлетворяют уравнениям статики для внутренних конечных элементов и граничным условиям для поверхностных конечных элементов. В свою очередь, компоненты вектора $\Delta U_i = (\Delta U, \Delta V, \Delta W)$ удовлетворяют соответствующим условиям на границе. Разрешающая система алгебраических уравнений относительно вектора приращений перемещений в узлах конечных элементов на каждом шаге прослеживания и каждой итерации по Ψ определяется из условий минимума функционала

$$E_I = -\frac{1}{2} \sum_V (\sigma_{ij} + J_{ij}) \Delta \varepsilon_{ij} V_{m,n,r} + \sum_{S_F} F_i \Delta U_i \Delta S_F^{m,n,r},$$

где \sum_V — оператор суммы по внутренним конечным элементам, \sum_{S_F} — оператор суммы по поверхностным конечным элементам, на которых заданы компоненты силового вектора F_i . Таким образом, система уравнений, позволяющая получить решение задачи в компонентах вектора приращений перемещений на каждом шаге прослеживания и итерирования в рамках конкретного конечного элемента, исходя из вариационного принципа Лагранжа, принимает следующий вид:

$$\frac{\partial E_I}{\partial \Delta U_{m,n,r}} = 0, \quad \frac{\partial E_I}{\partial \Delta V_{m,n,r}} = 0, \quad \frac{\partial E_I}{\partial \Delta W_{m,n,r}} = 0.$$

Далее путем линеаризации на каждой итерации по нелинейности решается система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$Ax = b. \quad (3)$$

Матрицы этих СЛАУ в общем случае являются несимметричными без диагонального преобладания и имеют разреженную структуру (как правило, являются ленточными). Их порядки составляют $O(10^5)$, а ширина ленты — $O(10^3)$.

Многочисленные решения СЛАУ (3) определяют значительную ресурсоемкость данного исследования (с учетом необходимости итерирования по нелинейным параметрам для рассмотренной задачи необходимо решение нескольких сотен таких систем с различными матрицами). Поэтому одним из рациональных способов повышения эффективности численного анализа в соответствии с изложенным алгоритмом является использование параллельных вычислений (в том числе на компьютерах гибридной архитектуры) именно для решения таких СЛАУ.

РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Параллельные алгоритмы решения СЛАУ с разреженными матрицами различной структуры для компьютеров с параллельной организацией вычислений различных архитектур рассматривались в [8–15].

Все прямые методы решения СЛАУ базируются на разложении матрицы задачи в произведение матриц стандартных видов. Так, решение СЛАУ (3) методом Гаусса можно разделить на три подзадачи: LU -разложение, т.е. приведение матрицы A к виду $A = PLU$ (P — матрица перестановок, L — нижняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали, U — верхняя треугольная матрица), и решение двух систем: $PLy = b$ и $Ux = y$ с треугольными матрицами.

Графические процессоры (GPU) предназначены, в первую очередь, для выполнения больших объемов однородных арифметических операций, причем наибольшая эффективность достигается при реализации матрично-матричных опера-

ций. Такие операции эффективно реализованы в библиотеках программ от разработчиков технических средств, например в библиотеке CUBLAS [16]. Поэтому классические методы и алгоритмы (например, Гаусса, Холецкого) целесообразно модифицировать, представив их в блочной форме.

Блочный алгоритм LU-разложения квадратной матрицы. Разобьем матрицу на блоки размера $s \times s$. После $K-1$ шага ($K = 1, 2, \dots, n/s$, где n/s — целое число) блоки модифицированной матрицы $A^{(K-1)}$ можно схематически представить в виде, изображенном на рис. 2 (слева). Здесь $A_f^{(K-1)}$ — квадратный диагональный блок порядка $Ks-s$; $A_u^{(K-1)}$ — наддиагональный прямоугольный блок размера $(Ks-s) \times (r+s)$; $A_l^{(K-1)}$ — поддиагональный прямоугольный блок размера $(r+s) \times (Ks-s)$; $A_R^{(K-1)}$ — диагональный блок порядка $r+s$, где $r = n - Ks$. В подматрице $A_R^{(K-1)}$ выделяются четыре блока (на рис. 2 верхние индексы опущены): $A_{11}^{(K)}$ — диагональный блок порядка s ; $A_{12}^{(K)}$ — прямоугольный блок размера $s \times r$; $A_{21}^{(K)}$ — прямоугольный блок размера $r \times s$; $A_{22}^{(K)}$ — диагональный блок порядка r .

На K -м шаге выполняется разложение (модификация) блока $A_R^{(K-1)}$ по формулам

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11}U_{11} & L_{11}U_{12} \\ L_{21}U_{11} & L_{21}U_{12} + A_R^{(k)} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Для вычисления блока $A_R^{(K)}$ используется s -ранговая модификация (рис. 2, справа):

$$A_R^{(K)} = A_{22}^{(K)} - L_{21}^{(K)}U_{12}^{(K)}. \quad (5)$$

В случае разреженной матрицы системы A также остаются разреженными матрицы разложения L и U , хотя в общем случае количество ненулевых элементов увеличивается. Поэтому при выполнении разложения (4) целесообразно проводить вычисления только с ненулевыми элементами соответствующих блоков матрицы. Так, элемент с индексами i и j матрицы (блока) $A_{22}^{(K)}$ модифицируется только в том случае, если скалярное произведение i -й строки матрицы $L_{21}^{(K)}$ и j -го столбца матрицы $U_{12}^{(K)}$ не равно нулю, т.е. s -ранговая модификация (5) выполняется только с подматрицей матрицы $L_{21}^{(K)}U_{12}^{(K)}$, которая состоит из ее ненулевых элементов или из ненулевых блоков. Поэтому количество арифметических опе-

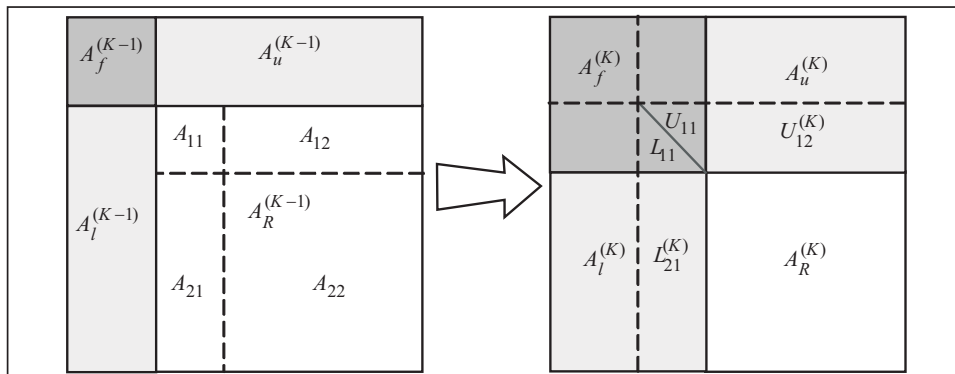


Рис. 2. Схема одного шага блочного алгоритма LU-разложения

раций для решения СЛАУ (3) с разреженной матрицей определяется количеством и расположением ненулевых элементов (т.е. структурой) матриц разложения (L и/или U) матрицы A .

Количество арифметических операций и объем обменов данными между вычислительными устройствами, которые используются при реализации алгоритма, также во многом зависят от стратегии выбора главного элемента. Например, выбор главного элемента только в пределах диагонального блока $A_{11}^{(K)}$ позволяет все другие вычисления свести к матрично-матричным операциям. В случае разреженных матриц такой метод также позволяет уменьшить возможное количество ненулевых элементов в верхней треугольной матрице U , уменьшая тем самым общее количество арифметических операций. Так, для ленточных матриц возможное количество наддиагоналей уменьшается до $m_u + s$.

Структурная регуляризация разреженных матриц. Структура разреженных матриц определяется нумерацией неизвестных. В целях уменьшения количества арифметических операций для решения СЛАУ (3) с разреженной матрицей структурной регуляризацией — перестановкой строк и столбцов (т.е. перенумерацией неизвестных) — такую матрицу приводят к одному из стандартных видов: ленточному, профильному или другому виду.

Существует несколько алгоритмов оптимизации структуры разреженной матрицы и приведения ее к соответствующему стандартному виду [11, 17], например:

- к ленточной или профильной матрице, используя алгоритм фактор-деревьев или алгоритм Катхилл–Макки;
- к блочно-диагональной матрице с окаймлением, используя алгоритм параллельных сечений;
- к матрице «небоскребной» структуры [11], используя алгоритм минимальной степени, который позволяет сократить общее количество ненулевых элементов в матрицах разложения (и, следовательно, арифметических операций при разложении).

При использовании блочных алгоритмов целесообразно определить нулевые блоки (все их элементы тождественно равны нулю) и ненулевые (блок имеет хотя бы один ненулевой элемент). Целесообразно также, чтобы ненулевые блоки были максимально заполненными. Порядок блоков s определяется, исходя из требований эффективного использования GPU.

Далее необходимо оптимизировать такую блочно-разреженную структуру матрицы, используя один из названных выше алгоритмов. При этом элементы матрицы в алгоритмах заменяются блоками. Целесообразно объединять расположенные рядом (в строке или столбце) ненулевые блоки оптимизированной структуры матрицы в один прямоугольный блок (плитку), который в дальнейшем обрабатывать как целое.

Декомпозиция и распределение между процессорными устройствами разреженных матриц. Достаточно хорошую сбалансированность загрузки процессов обеспечивают параллельные алгоритмы разложения матрицы задачи в произведение матриц стандартных видов. В этих алгоритмах используются так называемые циклические схемы распределения и обработки матриц [18].

Примером циклической схемы распределения между процессорными устройствами элементов матрицы является одномерная блочно-циклическая схема. Согласно этой схеме l -й столбец (l -я строка) блоков хранится в центральном процессоре (CPU) с логическим номером $(l + l) \bmod p$ (p — количество используемых CPU; $l(-1 \leq l \leq p-2)$ — сдвиг, обычно $l = -1$; результат операции $k \bmod j$ — остаток от деления k на j). Параметр s (число строк или столбцов) выбирается так,

чтобы каждый CPU имел хотя бы один столбец (одну строку) блоков, который модифицируется согласно (5) на данном этапе. При ленточных, профильных и матрицах небоскребной структуры параллельные алгоритмы, в которых используется одномерная блочно-циклическая схема распределения элементов матриц, позволяют достичь приблизительно равного объема вычислений и обменов, выполняемых каждым процессорным устройством в каждый момент времени. Это, в первую очередь, относится к ленточным матрицам при очевидном условии $m_u > sp$. В случае профильной матрицы системы, варьируя значения s и p , можно практически сбалансировать загрузку процессорных устройств в каждый момент времени, если $c_e / n > sp$ (m_l, m_u — количество под- и наддиагоналей, c_e — максимальное количество поддиагональных или наддиагональных элементов в профиле матрицы).

Параллельный блочный циклический алгоритм LU -разложения разреженной несимметричной матрицы. Рассмотрим алгоритм LU -разложения разреженной матрицы СЛАУ (3) A порядка n на компьютерах гибридной архитектуры [12]. Используем архитектуру, состоящую из p CPU (MPI-процессов) и p GPU, причем каждый MPI-процесс также может инициировать несколько потоков на свободных ядрах многоядерных процессоров.

Матрица разбивается на квадратные блоки порядка s (для упрощения будем считать $n = Ns$). Столбцы блоков циклически распределены между CPU. MPI-процесс, содержащий на K -м шаге алгоритма K -й столбец блоков (блоки $A_{11}^{(K)}$ и $A_{21}^{(K)}$), далее называется ведущим CPU (как и связанный с ним GPU). В памяти GPU на каждом шаге гибридного алгоритма достаточно хранить только ненулевые блоки подматрицы, которые обрабатываются (они также циклически распределены).

В случае выбора главного элемента в столбцах диагонального блока $A_{11}^{(K)}$ для $K = 1, \dots, N$ выполняются следующие макрооперации (ниже тильдой отмечены блоки матрицы после перестановок (см. рис. 2, справа).

1. Для $K > 1$ с использованием s -ранговой модификации (5) вычисляется диагональный блок $A_{11}^{(K)} = \tilde{A}_{K,K} - L_{K,K-1}U_{K-1,K}$. Операции выполняются ведущим GPU I -го шага, используя модули библиотеки CUBLAS.

2. Для $K > 1$ происходит пересылка ведущему CPU K -го шага вычисленного блока $A_{11}^{(K)}$.

3. Выполняется LU -разложение с частичным выбором главного элемента диагонального блока

$$A_{11}^{(K)} = L_{11}^{(K)}U_{11}^{(K)}. \quad (6)$$

Разложение (6) целесообразно выполнить на ведущем CPU, используя высокопроизводительные программные модули многопоточной библиотеки Intel MKL [19] с частичным выбором главных элементов в столбцах подматрицы $A_{11}^{(K)}$.

4. Для $K < N - 1$ проводится s -ранговая модификация (5) ненулевых блоков $\tilde{A}_{I,J}$ ($K \leq I \leq N, K \leq J \leq N$, исключая диагональный блок $\tilde{A}_{K,K}$) подматрицы $\tilde{A}_{22}^{(K)}$:

$$A_{I,J} \leftarrow \tilde{A}_{I,J} - L_{I,K}U_{K,J}. \quad (7)$$

Макрооперации (7) выполняются на GPU, используя модули библиотеки CUBLAS, при условиях $L_{I,K} \neq 0, U_{K,J} \neq 0$ в соответствии с распределением блоков $A_{I,J}$.

5. Для $K < N - 1$ выполняется рассылка вычисленных блоков $L_{11}^{(K)}$, $U_{11}^{(K)}$ и информации о перестановках всем CPU, а затем GPU.

6. Для $K < N - 1$ проводится вычисление ненулевых блоков $L_{I,K}$ ($K + 1 \leq I \leq N$) подматрицы $L_{21}^{(K)}$ решением матричных СЛАУ с нижней треугольной матрицей:

$$(U_{11}^{(K)})^T (L_{I,K})^T = (\tilde{A}_{I,K})^T. \quad (8)$$

Макрооперации (8) выполняются на ведущем GPU K -го шага, используя модули библиотеки CUBLAS.

7. Для $K < N - 1$ проводится рассылка всем CPU, а затем GPU вычисленных ненулевых блоков $L_{I,K}$ ($K + 1 \leq I \leq N$) подматрицы $L_{21}^{(K)}$.

8. Для $K < N - 1$ вычисляются ненулевые блоки $U_{K,J}$ ($K + 1 \leq J \leq N$) подматрицы $U_{12}^{(K)}$ решением матричных СЛАУ с нижней треугольной матрицей:

$$L_{11}^{(K)} U_{K,J} = \tilde{A}_{K,J}. \quad (9)$$

Макрооперации (9) выполняются (с учетом перестановок строк) на GPU, используя модули библиотеки CUBLAS, в соответствии с распределением блоков $\tilde{A}_{K,J}$.

Этот алгоритм предусматривает асинхронное выполнение операций на CPU и GPU, а также одновременное выполнение вычислений и обменов данными между различными процессорными устройствами. Так, выполнение на CPU LU -разложения (6) (п. 3) и рассылка блоков разложения (п. 5) происходит одновременно с завершением на GPU макроопераций (7) (п. 4). Обмены данными (пп. 2, 7) также выполняются на фоне вычислений.

Если памяти GPU недостаточно для хранения всех данных, распределяемых данному процессорному устройству, то п. 5 дополняется операциями пересылки на CPU вычисленных ранее ненулевых блоков $U_{K-1,J}$ подматрицы $U_{12}^{(K-1)}$ и операциями пересылки на GPU блоков исходной матрицы, необходимых для K -го шага, в соответствии с их распределением. Копирование в память CPU блоков $U_{K-1,J}$ выполняется также для сохранения матриц LU -разложения в целях их многократного использования.

Данный алгоритм может быть реализован как на одноузловых компьютерах с несколькими GPU, используя POSIX Threads, OpenMP и т.п., так и на многоузловых компьютерах, используя MPI.

Если необходимо выбирать главные элементы в столбцах подматриц $A_{11}^{(K)}$ и $A_{21}^{(K)}$, то в изложенный выше алгоритм необходимо внести следующие изменения: в пп. 1–3 заменить диагональный блок $A_{11}^{(K)}$ прямоугольной подматрицей, состоящей из диагонального блока $A_{11}^{(K)}$ и поддиагонального прямоугольного блока $A_{21}^{(K)}$, а п. 6 исключить.

Эффективность алгоритма LU -разложения ленточной несимметричной матрицы. Эффективность распараллеливания решения СЛАУ (3) определяется эффективностью алгоритмов разложения матрицы системы, так как количество арифметических операций, выполняемых при разложении (3), во много раз больше количества операций, выполняемых при решении систем $PLy = b$ или $Ux = y$.

Исследуем эффективность блочного циклического алгоритма LU -разложения (с выбором главного элемента в пределах диагонального блока) ленточной несимметричной матрицы порядка n с m_l поддиагоналями и m_u наддиагоналями.

Обозначим O_k количество арифметических операций, выполняемых при реализации k -й макрооперации алгоритма. Справедливы следующие оценки: $O_{4a} \approx 2s^3/3$, $O_{4b} \approx m_l s^2$, $O_6 \approx 2m_l m_u s/p$, $O_9 \approx m_u s^2/p$ (операции п. 1 ведущего GPU учтены в O_6). Введем также обозначения: t_C , t_G — средние времена выполнения одной арифметической операции на CPU и на GPU соответственно, n_0 — количество арифметических операций, которое GPU может выполнять одновременно. Поскольку GPU реализует архитектуру SIMD, то среднее время, затраченное одним GPU на выполнение O однородных арифметических операций, оценивается величиной $t_G O / n_0$.

Макрооперации пп. 2, 3, 5, 7, 8 содержат операции обмена данными между процессорными устройствами или внутри их. В большинстве случаев временем обменов между CPU и GPU, а также временем перестановки строк можно пренебречь. Если для рассылки данных от одного GPU всем остальным используется алгоритм «дерева» [18], то общее время мультирассылки (из одного GPU в p CPU или из одного CPU в p GPU, включая синхронизации) массива q двойных слов можно в среднем оценить величиной $q(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)$. Здесь t_{CC} — среднее время пересылки одного двойного слова между двумя CPU; t_{CG} — время обмена одним двойным словом между CPU и GPU;

Для рассматриваемого варианта гибридного алгоритма справедливы следующие оценки: T_k — время выполнения алгоритма на k CPU и k GPU, $S_p = T_1 / T_p$ — коэффициент ускорения, $E_p = S_p / p$ — коэффициент эффективности [18].

Теорема 1. Если $2ps \leq m_u$, $t_{CG} \leq \frac{2}{3} \frac{ps^2}{m_u} t_C$, $t_{CG} + \frac{s}{3} t_C \leq \frac{m_l m_u - ps^2}{ps} \frac{t_G}{n_0}$, то

для гибридного блочно-циклического алгоритма LU -разложения ленточной несимметричной матрицы справедливы следующие оценки:

$$\begin{aligned} T_1 &\approx ((2m_u + s)m_l + sm_u) s \frac{t_G}{n_0}, \quad T_p \approx ((2m_u + ps)m_l + \tau) \frac{s}{p} \frac{t_G}{n_0}, \\ S_p &\approx p \left(1 - \frac{(p-1)sm_l - sm_u + \tau}{((2m_u + ps)m_l) + \tau} \right), \quad E_p \approx 1 - \frac{(p-1)sm_l - sm_u + \tau}{((2m_u + ps)m_l) + \tau}, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\tau = \begin{cases} sm_u, & \text{если } \frac{n_0(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G} \leq \frac{s}{p} \frac{m_u}{m_l}, \\ pm_l \frac{n_0(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G}, & \text{если } \frac{n_0(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G} \leq m_l. \end{cases}$$

Заметим, что условия теоремы могут быть выполнены подбором количества процессорных устройств p и размера блоков s .

Оценки (10) свидетельствуют, что эффективность алгоритма не зависит от порядка матрицы, а при некоторых условиях определяется количеством ненулевых блоков в строке блоков и их размерами. На эффективность алгоритма также может влиять отношение времени мультирассылки одного двойного слова и значения t_G / n_0 .

Решение СЛАУ с треугольными ленточными матрицами. Вычислительные схемы алгоритмов решения систем $PLy = b$ и $Ux = y$ с треугольными матрицами во многом аналогичны вычислительной схеме алгоритма факторизации. Между собой эти алгоритмы отличаются лишь тем, что решение системы $PLy = b$ на-

чинается с первого блока, а решение системы $Ux = y$ — с последнего. В случае однократного решения СЛАУ вида (3) решение системы $PLy = b$ может быть совмещено с разложением матрицы СЛАУ (3).

Рассмотрим алгоритм решения СЛАУ $Ux = y$. Прямоугольные матрицы b , x и y размера $n \times q$ разбиты на блоки размера $s \times q$ (последние блоки могут содержать меньше строк), которые циклически распределены между CPU и соответствующим им GPU. На каждом шаге $K = N, N - 1, \dots, 1$ выполняются следующие операции, в результате которых вычисляется один блок решения:

1) проводится вычисление (при $K < N$) матричных произведений $U_{K,J}X_J$ ($K + 1 \leq J \leq N$) и их суммирование в пределах соответствующего процессорного устройства; эта макрооперация выполняется на GPU с использованием модулей библиотеки CUBLAS при условиях $U_{K,J} \neq 0$ в соответствии с распределением блоков X_J ;

2) происходит мультисборка ведущим CPU сумм матричных произведений — вычисление блока $Y_K^{(K)} = Y_K - \sum_{J=K+1}^N U_{K,J}X_J$;

3) решается СЛАУ $U_{K,K}X_K = Y_K^{(K)}$ с верхней треугольной матрицей $U_{K,K}$ (эта операция выполняется на ведущем CPU с использованием модулей библиотеки Intel MKL);

4) проводится пересылка из ведущего CPU вычисленного блока решения X_K соответствующему GPU.

Экспериментальное исследование гибридных алгоритмов. Описанный гибридный алгоритм решения СЛАУ с разреженной несимметричной матрицей реализован в программной среде MPI на компьютерах с многоядерными и графическими процессорами — семейства кластеров СКИТ Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины [20] и семейства Инпарком — совместная разработка Института кибернетики и ГП «Электронмаш» [21].

Для организации вычислений на GPU использована технология CUDA. При реализации гибридного алгоритма для матрично-векторных и матрично-матричных операций использованы функции библиотек Intel MKL (для вычислений на CPU) и CUBLAS (для GPU).

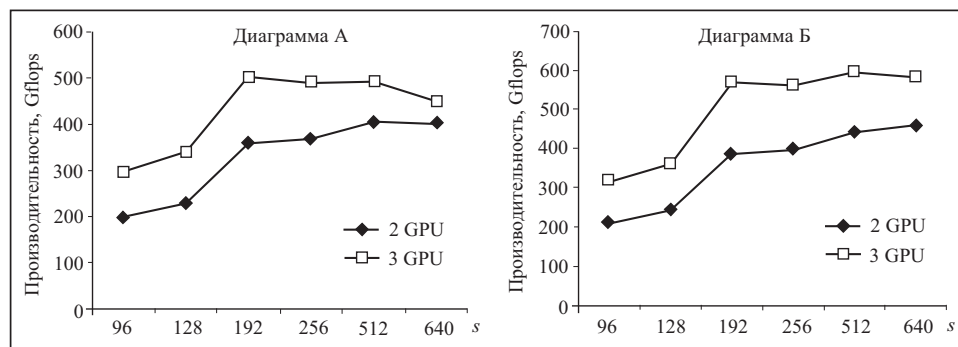


Рис. 3. Зависимость производительности гибридного алгоритма от количества GPU, а также от величины блока s

Проведены исследования зависимости производительности предложенных гибридных алгоритмов решения СЛАУ с ленточными матрицами от порядка блоков s и количества p используемых CPU и GPU. На рис. 3 графически представлены результаты исследований (производительность в Gflops — 10^9 арифметических операций с плавающей запятой в секунду) для двух задач:

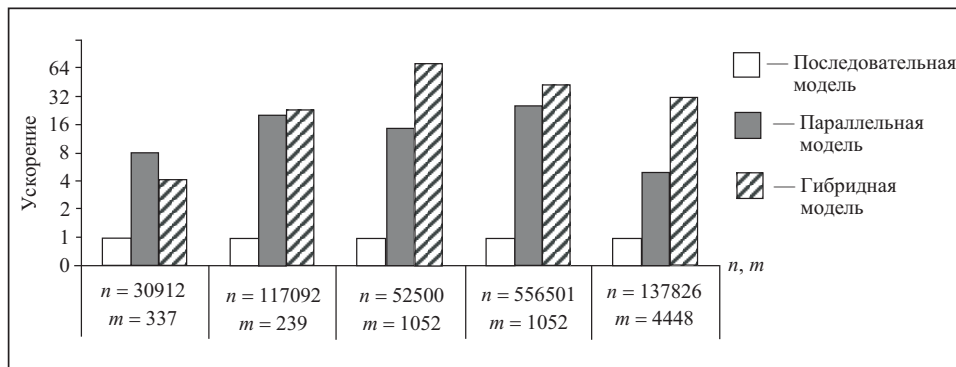


Рис. 4. Диаграммы полученных ускорений для моделей вычислений

- диаграмма А — для СЛАУ с параметрами $n = 1151112$, $m_l = m_u = 5357$, $q = 1$,

- диаграмма Б — для СЛАУ с параметрами $n = 1438890$, $m_l = m_u = 6693$, $q = 1$.

Эти исследования позволили экспериментально определить оптимальный размер блока $s = 192$, поскольку при дальнейшем увеличении размера блока наблюдается или незначительный рост производительности, или ее уменьшение.

Также проведено сравнение алгоритмов метода Гаусса решения СЛАУ с разреженными несимметричными матрицами, использующих последовательную, параллельную и гибридную модели вычислений. Последовательная модель реализована на персональном компьютере с процессором Intel Core i7 4 ядра. Параллельная модель реализовывалась на одном узле (8 ядер) компьютеров семейства Инпарк с многоядерными процессорами Intel Xeon 5606 4 ядра с использованием библиотеки Intel MKL. Гибридная модель реализована на персональном (одноузловом) суперкомпьютере Инпарк_pg (два процессора Intel Xeon E5520 и два графических сопроцессора Nvidia Tesla K40) с использованием предложенного гибридного алгоритма.

На рис. 4 представлены диаграммы достигнутых ускорений по отношению к последовательной модели вычислений. Результаты получены при решении пяти СЛАУ (показания параметров — под диаграммами; n — порядок матрицы, $m_l = m_u$ — количества под- и наддиагоналей матриц этих систем) и свидетельствуют о высокой эффективности предложенного гибридного алгоритма.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРЕДЕЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ТРУБОПРОВОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ОБНАРУЖЕННЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Использование разработанных математических моделей с применением высокоэффективных методов их компьютерной реализации позволило оценивать степень накопленной докритической поврежденности в условиях повторно-статического и малоциклового нагружения ответственных сварных конструкций с учетом особенностей сварочного процесса.

На примере ТЭ с дефектами локальной коррозионной потери металла на периферии кольцевого монтажного сварного шва рассмотрены характерные особенности зарождения и развития докритической поврежденности под действием циклических нагрузок. В качестве характерного ТЭ был рассмотрен участок магистрального трубопровода диаметром 1420 мм и толщиной стенки 20 мм с одним окружным монтажным сварным швом, сваренным в один проход, с учетом дальнейшего формирования на периферии шва дефекта (полуэллиптической формы глубиной $a = 10$ мм и длиной $2c = 40$ мм). Без ограничения общности рассматривалось повторное статическое нагружение ТЭ циклически изменяющимся по синусоидальному закону внутренним давлением со средним значением $P_0 = 8$ МПа

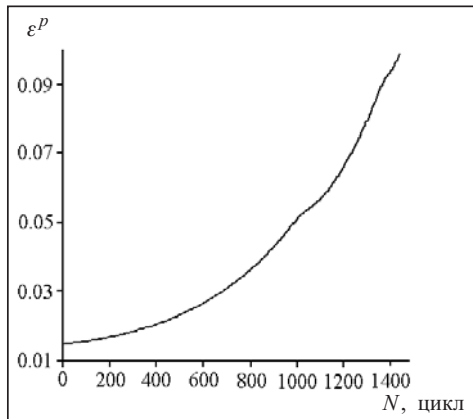


Рис. 5. Зависимость накопления пластических деформаций ε^P от количества циклов нагружения N

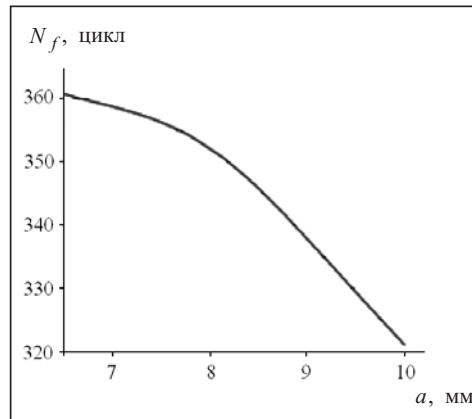


Рис. 6. Зависимость предельного количества циклов нагружения N_f от глубины дефекта a

и амплитудой $dP = 2,6$ МПа. Для прослеживания относительно небольших изменений в металле необходимо обеспечить достаточно мелкое пространственное разбиение (линейный размер конечного элемента прямоугольной формы не превышает 0,5 мм), а также разбиение по времени dt согласно правилу Панова ($\sim 0,0001$ с для моделирования сварочных процессов и 1 с при моделировании циклической нагрузки).

Использование эффективных средств компьютерной реализации изложенных выше моделей позволило с высокой степенью точности проводить прогнозирование состояния металла сварной конструкции с учетом взаимодействия эксплуатационных напряжений в области дефекта локальной потери металла и полей остаточных послесварочных напряжений. Так, моделирование накопления пластических деформаций ε^P в зависимости от количества циклов N нагружения трубопровода (рис. 5) позволило оценить степень развития докритической поврежденности во времени. Такие расчеты наряду с критериями предельного состояния (2) дают возможность определять предельное количество циклов N_f , в результате чего в конструкции с эксплуатационной дефектностью появляются первые макронесплошности.

На рис. 6 приведена зависимость N_f от глубины дефекта a коррозионной потери металла. При рассматриваемом цикле внутреннего давления, когда реализуются условия ультрамалоциклового усталости (количество циклов не более 10^3), зависимость N_f от глубины дефекта a квазилинейна в диапазоне значений $N_f = 320\text{--}360$ циклов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе современных положений механики докритического разрушения конструкционных материалов построены математические совместные модели зарождения и развития равномерно распределенной несплошности металла сварных конструкций под действием статического, переменного-статического и ультрамалоциклового нагружения применительно к ответственным трубопроводным элементам. Предложены критерии предельного состояния сварных конструкций с неоднородным напряженно-деформированным и поврежденным состоянием материала, основанные на различных сценариях возможного макроскопического разрушения, а именно по хрупкому механизму и пластической неустойчивости.

Согласно результатам, полученным при конечно-элементном решении задач нестационарной термопластичности при сварке, а также ввиду накопления докритической поврежденности (пор вязкого разрушения) в условиях циклического нагру-

жения внутренним давлением, показана достаточная для прослеживания состояния материала точность разработанных моделей. На примере фрагмента магистрального трубопровода с дефектом локальной коррозионной потери металла в области кольцевого монтажного шва продемонстрированы особенности процесса развития пластических деформаций металла, а также показано влияние геометрии дефекта на предельное количество циклов нагружения до макроразрушения конструкции.

Для решения методом Гаусса на компьютерах гибридной архитектуры (с многоядерными и графическими процессорами) систем линейных алгебраических уравнений с разреженными несимметричными матрицами, характерных для рассматриваемого класса задач, разработаны высокопроизводительные гибридные блочно-циклические алгоритмы. Эти алгоритмы обеспечивают существенное сокращение времени решения (до 60 раз) задач численного прогнозирования работоспособности сварных конструкций с дефектами. Общая схема предложенных гибридных алгоритмов (разбиение на блоки, распределение их между процессорными устройствами, обработка блоков, соответствующих ненулевым блокам матрицы разложения, и т.д.) может успешно применяться для решения СЛАУ с различными структурами разреженных матриц — ленточной, профильной, блочно-диагональной с окаймлением и т.п.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tsirkas S.A. Numerical simulation of the laser welding process for the prediction of temperature distribution on welded aluminium aircraft components. *Optics & Laser Technology*. 2018. Vol. 100. P. 45–56.
2. Махненко В.И. Проблемы экспертизы современных сварных конструкций ответственного назначения. *Автоматическая сварка*. 2013. № 5. С. 22–29.
3. Великоиваненко Е.А., Розынка Г.Ф., Миленин А.С., Пивторак Н.И. Оценка работоспособности магистрального трубопровода с локальным утонением стенки при ремонте дуговой наплавкой. *Автоматическая сварка*. 2015. № 1. С. 22–27.
4. Карзов Г.П., Марголин Б.З., Швецова В.А. Физико-механическое моделирование процессов разрушения. Спб.: Политехника, 1993. 391 с.
5. Xue L. Constitutive modeling of void shearing effect in ductile fracture of porous materials. *Engineering Fracture Mechanics*. 2008. Vol 75, Iss. 11. P. 3343–3366.
6. Махненко В.И. Ресурс безопасной эксплуатации сварных соединений и узлов современных конструкций. Киев: Наук. думка. 2006. 618 с.
7. Великоиваненко Е.А., Розынка Г.Ф., Миленин А.С., Пивторак Н.И. Моделирование процессов зарождения и развития пор вязкого разрушения в сварных конструкциях. *Автоматическая сварка*. 2013. № 9. С. 26–31.
8. Попов А.В., Химич А.Н. Параллельный алгоритм решения системы линейных алгебраических уравнений с ленточной симметричной матрицей. *Компьютерная математика*. 2005. № 2. С. 52–59.
9. Галба Е.Ф., Молчанов И.Н., Скопецкий В.В. Итерационные методы для вычисления взвешенной псевдообратной матрицы с вырожденными весами. *Кибернетика и системный анализ*. 1999. № 5. С. 150–169.
10. Galba E.F. Weighted singular decomposition and weighted pseudoinversion of matrices. *Ukrainian Mathematical Journal*. 1996. Vol. 48, Iss. 10. P. 1618–1622.
11. Химич А.Н., Попов А.В., Полянюк В.В. Алгоритмы параллельных вычислений для задач линейной алгебры с матрицами нерегулярной структуры *Кибернетика и системный анализ*. 2011. № 6. С. 159–174.
12. Баранов А.Ю. Гібридний алгоритм факторизації стрічкових несиметричних матриць. *Теорія оптимальних рішень*. 2015. С. 22–28.
13. Хімич О.М., Сидорук В.А. Плитковий гібридний алгоритм факторизації розріджених блочно-діагональних матриць з обрамленням. *Комп'ютерна математика*. 2016. № 1. С. 72–79.
14. Попов О.В., Рудич О.В. До розв'язування систем лінійних рівнянь на комп'ютерах гібридної архітектури. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер.: Фізико-математичні науки*. 2017. Вип. 15. С. 158–164.

15. Сидорук В.А. Одноузловый гибридный алгоритм факторизации разреженных матриц. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер.: Фізико-математичні науки.* 2017. Вип. 15. С. 194–200.
16. CUBLAS Linear Algebra. URL: https://developer.download.nvidia.com/compute/DevZone/docs/html/CUDALibraries/doc/CUBLAS_Library.pdf.
17. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. Москва: Мир, 1984. 334 с.
18. Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов А.В., Чистякова Т.В., Яковлев М.Ф. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. Киев: Наук. думка, 2008. 248 с.
19. The Fastest and Most-Used Math Library for Intel®-Based Systems. URL: <https://software.intel.com/en-us/mkl>.
20. Суперкомп'ютер ІК НАН України. URL: <http://icybcluster.org.ua>.
21. Интеллектуальные параллельные компьютеры «Инпарком». http://www.geopoisik.com/inparcom/ru/index_ru.htm.

Надійшла до редакції 07.08.2018

О.А. Великоіваненко, О.С. Міленін, О.В. Попов, В.А. Сидорук, О.М. Хіміч
МЕТОДИ ЧИСЕЛЬНОГО ПРОГНОЗУВАННЯ РОБОТОЗДАТНОСТІ ЗВАРНИХ
КОНСТРУКЦІЙ НА КОМП'ЮТЕРАХ ГІБРИДНОЇ АРХІТЕКТУРИ

Анотація. Розглянуто високопродуктивні розрахункові алгоритми для комп'ютерів гібридної архітектури з метою розв'язання задач прогнозування напружено-деформованого стану відповідальних зварних конструкцій з урахуванням зародження і розвитку докритичного руйнування металу за механізмом малоциклової втоми. Запропоновано алгоритми для характерних задач аналізу роботоздатності зварних трубопровідних елементів з дефектами несущільності металу корозійної природи.

Ключові слова: математичне моделювання, високопродуктивні обчислення, гібридні алгоритми, напружено-деформований стан, в'язке руйнування, зварні конструкції.

E.A. Velikoivanenko, A.S. Milenin, A.V. Popov, V.A. Sidoruk, A.N. Khimich
METHODS OF NUMERICAL FORECASTING OF THE WORKING
PERFORMANCE OF WELDED STRUCTURES ON COMPUTERS
OF HYBRID ARCHITECTURE

Abstract. The authors consider high-performance computational algorithms for computers of hybrid architecture to solve problems of predicting the stress-strain state of critical welded structures with regard for initiation and development of subcritical fracture of metal in accordance with the characteristic problems of analyzing the operability of welded pipeline elements with corrosive defects of metal discontinuity according to mechanism of low-cycle fatigue.

Keywords: mathematical modeling, high-performance computing, hybrid algorithms, stress-strain state, ductile fracture, welded structures.

Великоіваненко Елена Андреевна,

кандидат физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института электросварки им. Е.О. Патона НАН Украины, Киев, e-mail: d34@paton.kiev.ua.

Миленин Алексей Сергеевич,

кандидат техн. наук, старший научный сотрудник Института электросварки им. Е.О. Патона НАН Украины, Киев, e-mail: asmilenin@ukr.net.

Попов Александр Владимирович,

кандидат физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, Киев, e-mail: alex50porov@gmail.com.

Сидорук Владимир Антонович,

кандидат физ.-мат. наук, научный сотрудник Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, Киев, e-mail: wolodymyr.sydoruk@gmail.com.

Химич Александр Николаевич,

чл.-кор. НАН Украины, доктор физ.-мат. наук, профессор, заместитель директора Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, Киев, e-mail: khimich505@gmail.com.