ИНФОРМАТИКА

2015 январь-март № 1

УДК 004.94: 004.9.032.26

П.К. Шалькевич[1], С.П. Кундас[2], И.А. Гишкелюк[1]

ТЕХНОЛОГИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОВЛАГОПЕРЕНОСА В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ SPS

Предлагается математическая модель, разработанная с учетом существующих численных моделей неизотермического влагопереноса в почве и адаптированная для конечно-элементного решения задачи тепловлагопереноса в природных дисперсных средах в трехмерной постановке. Разрабатывается программный комплекс SPS, позволяющий осуществлять долгосрочное прогнозирование для решения трехмерной задачи неизотермического тепловлагопереноса загрязняющих веществ в почве.

Введение

Для моделирования миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах необходимо решить проблему неизотермического тепловлагопереноса [1], в основе которой лежит математическая задача, эффективно решаемая с помощью метода конечных элементов (МКЭ). МКЭ применяется в большинстве современных программных комплексов, предназначенных для моделирования сложных физических процессов [2–5], однако они ввиду своей универсальности имеют сложности в адаптации к решению конкретной задачи и не всегда позволяют получать достоверное решение [1].

Задача моделирования неизотермического тепловлагопереноса в одномерном виде успешно реализована авторами в программном комплексе (ПК) SPS (Simulation of Processes in Soil) [1]. Для большего приближения результатов моделирования к реальным процессам актуальна разработка трехмерных моделей миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах, которая требует больших вычислительных ресурсов и времени выполнения вычислений, в особенности при долговременном прогнозировании. Эту задачу можно решить с помощью технологии параллельных вычислений [6]. Проведенный анализ показал, что применение параллельных вычислительных алгоритмов, выполняемых на базе стандартных инструкций, не дает требуемой эффективности [6]. Поэтому целью настоящей работы является реализация специализированных моделей и программных средств для решения поставленной задачи.

1. Численная модель неизотермического влагопереноса

Система уравнений тепловлагопереноса имеет следующий вид [1]:

$$\left| \begin{array}{c} C_{\mathrm{v}} \dfrac{\partial T}{\partial t} - L \dfrac{\partial \theta_{\mathrm{liq}}}{\partial t} + L \rho_{\mathrm{liq}} \nabla \upsilon_{\mathrm{liq}} - \nabla(\lambda \nabla T) \\ C_{\mathrm{hv}} \dfrac{\partial T}{\partial t} + C_{\mathrm{wp}} \dfrac{\partial P_{\mathrm{liq}}}{\partial t} - \nabla(K_{\mathrm{hv}} \nabla T) - \nabla\left(K_{\mathrm{wv}} \nabla P_{\mathrm{liq}} - K_{\mathrm{w}} \rho_{\mathrm{liq}} g \nabla D\right) \end{array} \right| = 0, \quad (1)$$

где коэффициенты находятся из выражений $C_{\mathrm{hv}} = \dfrac{\partial w}{\partial T}$, $C_{\mathrm{wp}} = \dfrac{\partial w}{\partial P_{\mathrm{liq}}}$, $K_{\mathrm{hv}} = \rho_{\mathrm{v}} \dfrac{K_0 K_{\mathrm{v}}}{\eta_{\mathrm{v}}} \dfrac{\partial P_{\mathrm{v}}}{\partial T}$, $K_{\mathrm{ww}} = \rho_{\mathrm{liq}} \dfrac{K_0 K_{\mathrm{liq}}}{\eta_{\mathrm{liq}}} + \rho_{\mathrm{v}} \dfrac{K_0 K_{\mathrm{v}}}{\eta_{\mathrm{v}}} \dfrac{\partial P_{\mathrm{v}}}{\partial P_{\mathrm{liq}}}$, $K_{\mathrm{w}} = \rho_{\mathrm{liq}} \dfrac{K_0 K_{\mathrm{liq}}}{\eta_{\mathrm{liq}}}$; C_{v} – объемная теплоемкость; λ – теплопроводность; w – полное влагосодержание; K_{liq} – коэффициент относительной фазовой проницаемости жидкости; K_{v} – коэффициент относительной фазовой проницаемости пара; P_{v} – давление водяного пара.

Систему уравнений (1) целесообразно решать с помощью МКЭ относительно температуры и давления жидкости [1]. Таким образом, в указанном случае основная идея применения МКЭ состоит в том, что температура (T) и давление жидкости (P_{liq}) аппроксимируются полиномами [1, 7]:

$$T \approx \tilde{T} = \sum_{j=1}^{M} T_j N_j, \quad P_{\text{liq}} \approx \tilde{P}_{\text{liq}} = \sum_{j=1}^{M} P_{\text{liq}\,j} N_j, \tag{2}$$

где T_j и $P_{\text{liq}\,j}$ – значения температуры и давления жидкости в j-м узле; N_j – базисная функция в j-м узле (кусочно-непрерывная функция, определенная на конечном элементе); M – общее количество узлов.

Согласно методу взвешенных невязок в постановке Галеркина система уравнений (1) в общем виде запишется следующим образом [8]:

$$\begin{gathered}
\frac{1}{\Delta t_n}\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i C_{\text{v}} & 0 \\ N_i C_{\text{hv}} & N_i C_{\text{wp}} \end{vmatrix}\begin{vmatrix} T_j^{n+1} \\ P_{\text{liq}\,j}^{n+1} \end{vmatrix}\partial\Omega - \frac{1}{\Delta t_n}\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i C_{\text{v}} & 0 \\ N_i C_{\text{hv}} & N_i C_{\text{wp}} \end{vmatrix}\begin{vmatrix} T_j^{n} \\ P_{\text{liq}\,j}^{n} \end{vmatrix}\partial\Omega - \\
-\frac{1}{\Delta t_n}\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i L \theta_{\text{liq}}^{n+1} \\ 0 \end{vmatrix}\partial\Omega + \frac{1}{\Delta t_n}\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i L \theta_{\text{liq}}^{n} \\ 0 \end{vmatrix}\partial\Omega + (1-\gamma)\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i L \rho_{\text{liq}} \nabla \upsilon_{\text{liq}}^{n} \\ 0 \end{vmatrix}\partial\Omega + \\
+\gamma\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i L \rho_{\text{liq}} \nabla \upsilon_{\text{liq}}^{n+1} \\ 0 \end{vmatrix}\partial\Omega + (1-\gamma)\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i \nabla\lambda\nabla N_j & 0 \\ N_i \nabla K_{\text{hv}} \nabla N_j & N_i \nabla K_{\text{wv}} \nabla N_j \end{vmatrix}\begin{vmatrix} T_j^{n} \\ P_{\text{liq}\,j}^{n} \end{vmatrix}\partial\Omega + \\
+\gamma\int_{\Omega}\begin{vmatrix} N_i \nabla\lambda\nabla N_j & 0 \\ N_i \nabla K_{\text{hv}} \nabla N_j & N_i \nabla K_{\text{wv}} \nabla N_j \end{vmatrix}\begin{vmatrix} T_j^{n+1} \\ P_{\text{liq}\,j}^{n+1} \end{vmatrix}\partial\Omega - \int_{\Omega}\begin{vmatrix} 0 \\ \nabla N_i K_{\text{w}} \rho_{\text{liq}} g \nabla D \end{vmatrix}\partial\Omega - \\
-\int_{\Gamma}\begin{vmatrix} N_i \alpha T_{\infty} \\ 0 \end{vmatrix}\partial\Gamma + (1-\gamma)\int_{\Gamma}\begin{vmatrix} N_i \alpha N_j & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} T_j^{n} \\ P_{\text{liq}\,j}^{n} \end{vmatrix}\partial\Gamma + \gamma\int_{\Gamma}\begin{vmatrix} N_i \alpha N_j & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} T_j^{n+1} \\ P_{\text{liq}\,j}^{n+1} \end{vmatrix}\partial\Gamma - \\
-\int_{\Gamma}\begin{vmatrix} N_i q_h \\ N_i\left(q_{\text{v}} + q_{\text{liq}}\right) \end{vmatrix}\partial\Gamma - \int_{\Gamma}\begin{vmatrix} N_i \varepsilon\sigma T_{\infty}^4 \\ 0 \end{vmatrix}\partial\Gamma + (1-\gamma)\int_{\Gamma}\begin{vmatrix} N_i \varepsilon\sigma N_j{}^4 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} \left(T_j^{n}\right)^4 \\ P_{\text{liq}\,j}^{n} \end{vmatrix}\partial\Gamma + \\
+\gamma\int_{\Gamma}\begin{vmatrix} N_i \varepsilon\sigma N_j{}^4 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} \left(T_j^{n+1}\right)^4 \\ P_{\text{liq}\,j}^{n+1} \end{vmatrix}\partial\Gamma = 0.
\end{gathered} \tag{3}$$

2. Адаптация трехмерной математической модели для конечно-элементной реализации

Численное решение системы уравнений (3) в общем виде осуществляется методом Ньютона – Рафсона посредством подстановки аппроксимаций (2), что подробно рассматривается в [1]. Таким образом, практическая реализация математической модели (1) в трехмерной постановке сводится к расчету значений соответствующих параметров в каждом конечном элементе сетки, где в качестве элемента дискретизации берется тетраэдр с четырьмя узлами [7]. Матрица теплопроводности элемента будет иметь следующий вид:

$$\left[k^{(e)}\right] = \int_{V^{(e)}} \left[N^{(e)}\right]^T [D] \left[N^{(e)}\right] dV + \int_{S^{(e)}} h \left[B^{(e)}\right]^T \left[B^{(e)}\right], \tag{4}$$

где D – матрица, описывающая коэффициенты теплопроводности; B – матрица, содержащая функции формы.

Функции формы в трехмерном случае будут иметь вид

$$B_\beta = a_\beta + b_\beta x + c_\beta y + d_\beta z, \quad \beta = i, j, k, l. \tag{5}$$

Подставив (5) в (4), получим

$$[k^{(e)}] = \frac{K_{xx}}{36V}\begin{bmatrix} b_{ii} & b_{ij} & b_{ik} & b_{il} \\ b_{ij} & b_{jj} & b_{jk} & b_{jl} \\ b_{ik} & b_{jk} & b_{kk} & b_{kl} \\ b_{il} & b_{jl} & b_{kl} & b_{ll} \end{bmatrix} + \frac{K_{yy}}{36V}\begin{bmatrix} c_{ii} & c_{ij} & c_{ik} & c_{il} \\ c_{ij} & c_{jj} & c_{jk} & c_{jl} \\ c_{ik} & c_{jk} & c_{kk} & c_{kl} \\ c_{il} & c_{jl} & c_{kl} & c_{ll} \end{bmatrix} +$$

$$+ \frac{K_{zz}}{36V}\begin{bmatrix} d_{ii} & d_{ij} & d_{ik} & d_{il} \\ d_{ij} & d_{jj} & d_{jk} & d_{jl} \\ d_{ik} & d_{jk} & d_{kk} & d_{kl} \\ d_{il} & d_{jl} & d_{kl} & d_{ll} \end{bmatrix} + \frac{hS_{jkl}}{12}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

3. Архитектура программного модуля ПК SPS для параллельного решения задачи неизотермического влагопереноса

Решение уравнений математической физики с помощью МКЭ включает три этапа [9]:

– описание геометрии области решения, задание физических характеристик, генерация конечно-элементной сетки;

– решение с помощью МКЭ дифференциальных уравнений;

– визуализацию и интерпретацию полученных результатов.

Все эти этапы на программном уровне выполняются с помощью отдельных модулей (препроцессора, процессора и постпроцессора) (рис. 1). Для реализации параллельных алгоритмов, описанных в работах [10, 11], необходимо использовать несколько модулей процессоров.

Рис. 1. Параллельная архитектура программных средств, базирующихся на МКЭ

Особенность параллельных вычислительных алгоритмов неизотермического переноса [9] заключается в том, что количество процессоров в программной архитектуре соответствует количеству процессоров в компьютерной архитектуре. Программная реализация модулей препроцессора и постпроцессора при решении задач неизотермического переноса влаги и растворимых веществ не имеет принципиальных отличий от реализации этих модулей для решения других конечноэлементных задач по причине унификации ввода исходных данных и визуализации полученных результатов путем применения стандартных интерфейсов.

При программной реализации модуля, ответственного за решение уравнений неизотермического переноса влаги и растворимых веществ в соответствии с алгоритмом параллельных вычислений [10], необходимо решить следующие задачи:

– вычислить базисные функции и их производные в соответствии с выбранной квадратурной формулой;

– вычислить длину, площадь и объем для соответствующих типов конечных элементов;

– вычислить значения физических свойств в конечных элементах;

– создать распределенные массивы для вычисления локальных матриц конечных элементов;

– создать распределенные массивы для вычисления локального вектора невязки и якобиана;

– масштабировать и распределить части массива по *N* процессорам;

– реализовать сборку глобальных матриц;

– реализовать учет граничных условий.

Кроме того, необходимо иметь алгоритмы и подпрограммы для решения систем алгебраических уравнений, а для облегчения реализации вышеперечисленных задач – средства для выполнения алгебраических и вычислительных операций над матрицами.

Для решения приведенных выше задач создан программный модуль (рис. 2). Реализация программных средств осуществляется в среде Microsoft Visual Studio 2008 на языке C++ с использованием современных технологий объектно-ориентированного программирования.

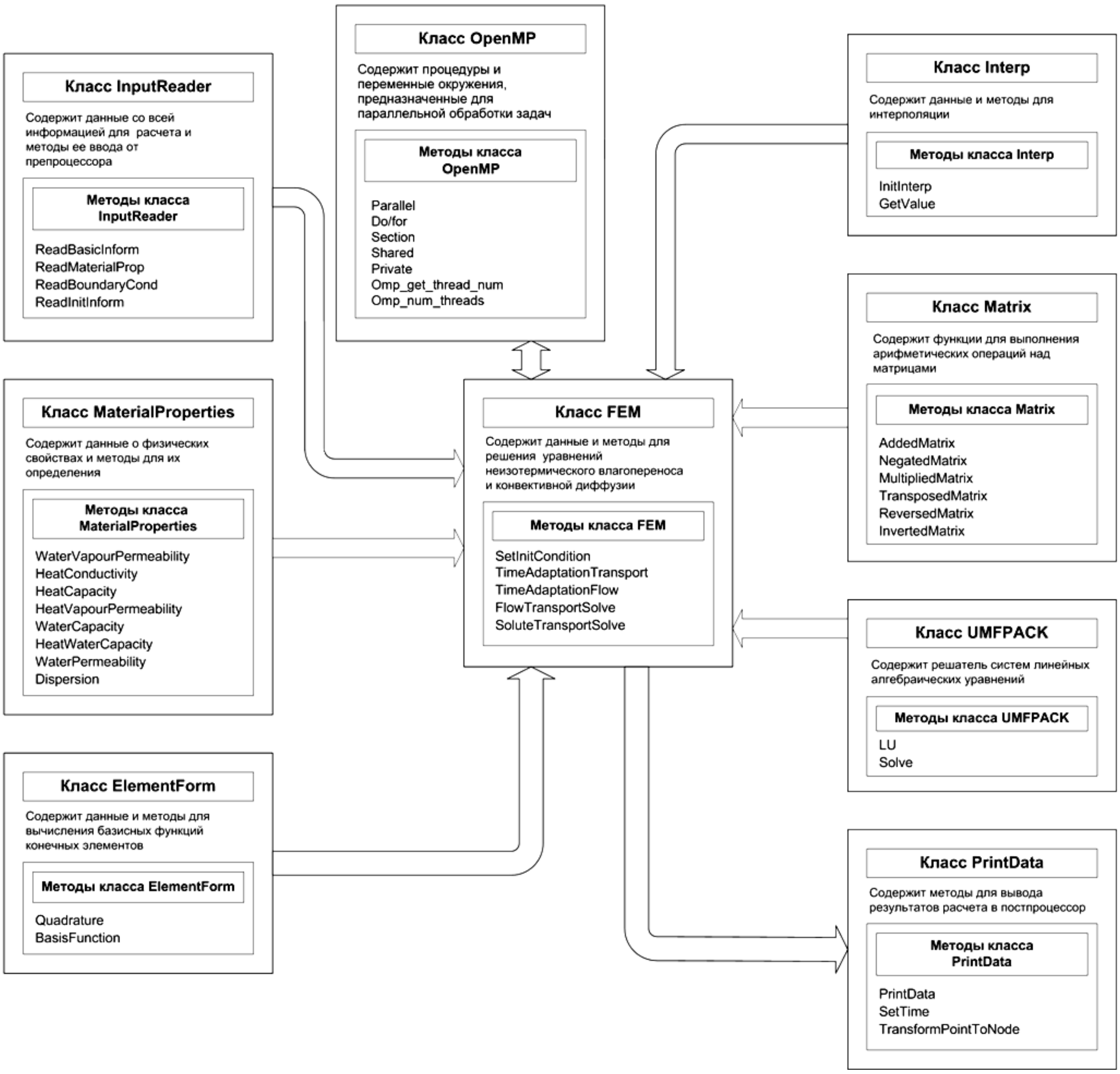

Рис. 2. Структура программного модуля для решения уравнений неизотермического переноса влаги и растворимых веществ

Разработанный программный модуль, реализующий алгоритм параллельного решения задачи неизотермического переноса влаги и растворимых веществ [11, 12], основан на следующей иерархии классов:

класс `FEM` – содержит методы для инициализации начальных условий, вычисления шага по времени в соответствии с разработанным алгоритмом [6], решения уравнений неизотермического переноса влаги и растворимых веществ на текущем временном шаге [6];

класс `InputReader` – содержит методы для передачи необходимых для решения задачи неизотермического переноса влаги и растворимых веществ данных от препроцессора в соответствующие объекты процессора;

класс `MaterialProperties` – содержит физические константы, информацию о количестве сред и их свойствах, методы для вычисления физических свойств в зависимости от температуры и давления жидкости и производных этих зависимостей;

класс `ElementForm` – включает данные и методы для вычисления базисных функций и их производных в соответствии с выбранной квадратурной формулой, а также вычисления длины, площади и объема для определенных типов конечных элементов;

класс `Interp` – содержит реализацию различных методов интерполяции: линейной и квадратичной интерполяции, интерполяции эрмитовыми полиномами и кубическими сплайнами;

в классе `Matrix` – используется свободно распространяемая библиотека NEWMAT, в которой реализованы функции для выполнения арифметических операций над матрицами;

класс `UMFPACK` – содержит свободно распространяемую библиотеку UMFPACK, в которой реализованы процедуры хранения разряженных матриц больших систем алгебраических уравнений, а также прямые методы их решения. При этом в зависимости от вида правой матрицы системы алгебраических уравнений: симметричная, диагональная, комплексная и т. п. – автоматически выбирается и осуществляется оптимальный прямой метод решения;

класс `PrintData` – содержит методы для передачи результатов решения задачи неизотермического переноса влаги и растворимых веществ в соответствующие объекты постпроцессора;

класс `OpenMP` – описывает совокупность директив компилятора, библиотечных процедур и переменных окружения, которые предназначены для программирования многопоточных приложений на многопроцессорных системах с общей памятью.

Управление расчетом и передача данных между задачами неизотермического движения влаги и переноса растворимых веществ осуществляются путем взаимодействия головной программы femHWStransport и класса OpenMP.

Особенностью предложенной иерархии классов является возможность использования:

– широкого класса методов интерполяции функциональных зависимостей [8];

– различных квадратурных формул численного интегрирования [8];

– параллельных методов решения систем алгебраических уравнений, наилучшим образом соответствующих получаемому типу матриц.

На основании разработанной иерархии классов и вычислительных алгоритмов [5, 11] создан соответствующий программный модуль, который позволяет получать конечно-элементную сетку с решением с помощью центрального процессора, совместимую с ПК Comsol Multiphysics [4]. Однако полученное решение является более устойчивым, чем решение, найденное в ПК Comsol Multiphysics [2, 13].

Заключение

Разработана трехмерная численная модель миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах, основой которой является решение задачи неизотермического тепловлагопереноса. Компьютерная реализация модели осуществлена в ПК SPS с применением технологии параллельных вычислений. Для этих целей разработаны структура программного модуля и иерархия классов, особенностями которых являются:

– возможность реализации параллельных вычислений на максимально возможном количестве ядер процессора;

– наличие различных квадратурных формул численного интегрирования;

– автоматический выбор метода решения системы алгебраических уравнений, наилучшим образом соответствующего получаемому типу матрицы.

На основании предложенной иерархии классов и оригинальных алгоритмов создан программный модуль, позволяющий осуществлять долгосрочное прогнозирование для решения трехмерной задачи неизотермического тепловлагопереноса загрязняющих веществ в почве.

Список литературы

1. Компьютерное моделирование миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах / С.П. Кундас [и др.]; под общ. ред. С.П. Кундаса. – Минск : МГЭУ им. А.Д. Сахарова, 2011. – 212 с.

2. Кундас, С.П. Моделирование миграции примесей в почве с использованием математического пакета FEMLAB / С.П. Кундас, И.А. Гишкелюк, В.И. Коваленко // Инженерный вестник. – 2006. – № 1 (21) / 3. – С. 203–206.

3. ANSYS Theory Manual. ANSYS Release. – SAS IP, Inc., 2001. – 1266 p.

4. COMSOL Multiphysics. User’s Guide. – COMSOL AB, 2007. – 588 p.

5. MSC/NASTRAN Numerical Methods. User’s Guide. – MSC, 1998. – 297 p.

6. Шалькевич, П.К. Алгоритм параллельных вычислений задачи неизотермического влагопереноса в природных дисперсных средах / П.К. Шалькевич, С.П. Кундас, И.А. Гишкелюк // Доклады БГУИР. – 2014. – № 5 (83). – С. 90–94.

7. Шалькевич, П.К. Параллельное вычисление задачи взаимосвязанного тепловлагопереноса на суперкомпьютерах с различным числом ядер / П.К. Шалькевич, С.П. Кундас // Сахаровские чтения 2014 года: экологические проблемы XXI века : материалы 14-й Междунар. науч. конф., Минск, 29–30 мая 2014 г. – Минск, 2014. – С. 221–222.

8. Сегерлинд, Л. Применение метода конечных элементов / Л. Сегерлинд; пер. с англ. – М. : Мир, 1979. – 392 с.

9. Математическое моделирование процессов переноса вещества и влаги в почве / С.П. Кундас, И.А. Гишкелюк [и др.] // Экологический вестник. – 2007. – № 1. – С. 62–72.

10. Шалькевич, П.К. Реализация алгоритма параллельных вычислений задачи неизотермического влагопереноса в природных дисперсных средах / П.К. Шалькевич, С.П. Кундас, И.А. Гишкелюк // Информатика. – 2014. – № 4 (44). – С. 44–51.

11. Сабоннадьер, Ж.К. Метод конечных элементов и САПР / Ж.К. Сабоннадьер, Ж.Л. Кулон. – М. : Мир, 1989. – 190 с.

12. Kundas, S. Application of computer modeling for analysis and forecasting of radionuclide’s migration in soil / S. Kundas, V. Kovalenko, I. Gishkeluk // J. of the University of Applied Sciences Mittweida (Germany). – 2006. – № 10. – P. 44–49.

13. Моделирование процессов термовлагопереноса в капиллярно-пористых средах / С.П. Кундас [и др.]. – Минск : ИТМО НАН Беларуси, 2007. – 292 с.

Поступила 17.11.2014

[1]Международный государственный экологический университет им. А. Д. Сахарова,
Минск, ул. Долгобродская, 23
e-mail: pavel.shalkevich@gmail.com,
gishkeluk@iseu.by

[2]Белорусский национальный технический университет,
Минск, пр. Победителей, 65
e-mail: kundas@tut.by

P.K. Shalkevich, S.P. Kundas, I.A. Gishkeluk

PARALLEL COMPUTING IN THE HEAT AND MOISTURE TRANSFER USING SPS SOFTWARE

A numerical model of non-isothermal moisture transfer in soil is developed and adapted for the finite element solution of the three-dimensional heat and moisture transfer in natural dispersed media. An SPS software module which allows carrying out long-term forecasting for the solution of three-dimensional non-isothermal heat and moisture transfer of contaminants in soil is developed.