

ISSN 0367-5203

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ И
ТЕХНИКИ

**Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ**

СЕРИЯ

**Математическое моделирование
физических процессов**

2012

ВЫПУСК 3

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 3

Издается с 1978 г.

Саров — 2012

Главный редактор Р. М. Шагалиев

Редакционная коллегия:

Ю. Г. Бартенов (ВНИИЭФ), Ю. А. Бондаренко (ВНИИЭФ) — зам. главного редактора,
А. Н. Быков (ВНИИЭФ), Н. Н. Залялов (ВНИИЭФ), А. Д. Зубов (ВНИИТФ),
Н. В. Иванов (ВНИИЭФ), В. Л. Ковалев (МГУ), М. Ю. Козманов (ВНИИТФ),
В. Е. Неуважаев (ВНИИТФ), Е. В. Соколовская (ВНИИЭФ) — ответственный секретарь,
А. А. Соловьев (ВНИИЭФ), В. Ф. Спиридонов (ВНИИЭФ),
В. Ф. Тишкин (ИММ РАН) — зам. главного редактора, А. А. Холостов (ВНИИЭФ),
А. Н. Чекалин (Казанский ГУ), В. Н. Чубариков (МГУ)

УДК 519.6

МОНОТОННЫЙ МЕТОД ЧАСТИЦ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУМЕРНЫХ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ

Ю. В. Янилкин, В. А. Шмелёв, В. Ю. Колобянин, С. П. Беляев
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Описывается развитие монотонного метода частиц для двумерных задач газовой динамики, реализованного в рамках комплекса ЭГАК. Приводятся алгоритмы взаимодействия частиц с компонентами, которые заданы без применения частиц, а также алгоритмы, позволяющие делать расчет, используя частицы только в окрестности контактных границ.

Ключевые слова: газовая динамика, многокомпонентная среда, монотонный метод частиц, смешанные ячейки, контактная граница.

Введение

Проблема корректного расчета движения многокомпонентной среды является наиболее серьезной для лагранжево-эйлеровых и эйлеровых методик, особенно в смешанных ячейках в окрестностях контактных границ (КГ). Имеются два основных подхода к решению уравнения адвекции для многокомпонентной среды.

Первый подход основан на выделении КГ и определении их положения на каждом счетном шаге. При этом КГ может выделяться явным образом или же восстанавливаться на каждом счетном шаге по полю концентраций. Последний алгоритм положен в основу методов типа метода концентраций [1], получивших широкое распространение.

Второй подход связан с применением методов частиц, или маркеров [2]. В этом случае потоки веществ из смешанных ячеек определяются частицами, с которыми связываются определенные массы веществ.

Оба подхода имеют свои достоинства и недостатки. Достоинства метода частиц определяются лагранжевым представлением частиц и возможностью "привязки" информации о среде к ним, что позволяет минимизировать погрешности эйлеровых методов, связанные с решением уравнения адвекции. Основным недостатком метода частиц является сильная немонотонность решения, вызванная дискретным переносом мас-

сы и величин, связанных с массой, из ячейки в ячейку.

В настоящей работе предлагается метод частиц, свободный от указанного недостатка. Монотонизация метода частиц производится путем дробления частиц, с тем чтобы объем вытекающего из ячейки вещества соответствовал объему, вычисляемому по стандартным схемам методики. Чтобы не породить бесконечную цепочку дробления, в дальнейшем раздробленные частицы вновь объединяются при выполнении определенных условий.

1. Постановка задачи

В коде ЭГАК для численного решения системы уравнений многокомпонентной газовой динамики в двумерном приближении основными величинами являются компоненты вектора скорости u_x , u_y , определенные в узлах сетки, а также термодинамические величины, определенные в ячейках, — плотности ρ_ξ , удельная (на единицу массы) внутренняя энергия e_ξ и объемные концентрации $\beta_\xi = V_\xi/V$ веществ — компонентов среды.

Дополнительно для некоторых компонентов, количество которых не ограничено (в частном случае это могут быть все компоненты), могут задаваться данные об их частицах. Каждая частица (с номером p) имеет пространственные координаты $x_p(t)$, $y_p(t)$, компоненты вектора ско-

рости $u_{xp}(t)$, $u_{yp}(t)$ (они используются лишь в промежуточных вычислениях на лагранжевом этапе), а также для всех частиц дублируется информация о термодинамическом состоянии вещества (плотность, удельная внутренняя энергия, объем): $\rho_{\xi p}$, $e_{\xi p}$, $V_{\xi p}$.

Замечание. Плотности и объемы позволяют находить и массы частиц. Отметим также, что в предлагаемом методе не хранятся скорости частиц, что отличает его от классического метода частиц, — скорости получаются интерполяцией по скоростям в узлах сетки.

Аппроксимация соответствующей системы уравнений производится с привлечением метода расщепления в два этапа. На первом (лагранжевом) этапе решаются уравнения газодинамики без конвективных членов, т. е. уравнения газодинамики в лагранжевых переменных. На втором (эйлеровом) этапе производится построение новой счетной сетки по заданному закону движения узлов сетки и пересчет величин на эту сетку. При этом в качестве начальных данных используются значения величин, полученные на первом этапе вычислений. Данный этап, в свою очередь, разбивается на два подэтапа, а именно аппроксимация уравнений адвекции производится с использованием расщепления по направлениям.

Ниже разностные уравнения приводятся лишь в объеме, необходимом для понимания алгоритмов, связанных с введением частиц; более полные сведения содержатся в [3]. Там, где это не вызывает разночтений, величины с нижнего временного слоя записываются без временного индекса или с индексом n , величины после первого этапа снабжаются индексом $n + 1/2$, а после второго — индексом $n + 1$.

2. Лагранжев этап

Аппроксимация уравнений для величин, определенных в ячейках. Аппроксимация уравнений лагранжевой газодинамики производится по стандартной схеме методики ЭГАК [3]. В результате на лагранжевом этапе вычислений для каждого вещества определяются новые значения скорости в узлах сетки, а также его плотность, энергия и объемная концентрация. Это касается и ячеек, содержащих частицы, причем не имеет значения, является ячейка *смешанной* (содержащей несколько веществ, часть которых описывается с помощью частиц) или *чистой* (со-

держащей только одно вещество, описываемое частицами).

Определение газодинамических величин для частиц. В дополнение к величинам, отнесенным к компонентам среды, в ячейках, содержащих частицы, определяются газодинамические величины и для частиц.

Определение новых координат частиц. Новые координаты частиц определяются за два шага:

Шаг 1. Полагается, что на лагранжевом этапе частицы движутся вместе с ячейкой и внутри ячейки, не выходя за ее границу. Относительное изменение положения частиц в ячейке происходит за счет различия дивергенций (сжатий) различных компонентов вследствие применения той или иной модели замыкания уравнений газодинамики в смешанных ячейках. В настоящей работе используется лишь одно предположение — о равенстве дивергенций компонентов. Это означает, что внутриячеечное движение частиц не меняет относительного положения частиц по отношению к узлам счетной ячейки.

Для определения новых координат $\tilde{x}_p^{n+1/2}$, $\tilde{y}_p^{n+1/2}$ частиц используется билинейная интерполяция по координатам узлов ячейки $x^{n+1/2}$, $y^{n+1/2}$.

Шаг 2. Легко показать, что при вычислении скоростей частиц с помощью билинейной интерполяции не выполняется закон сохранения импульса в содержащей частицу ячейке. Чтобы обеспечить его сохранение, полученные билинейной интерполяцией скорости частиц корректируются следующим образом:

1. Рассчитываются компоненты импульса ячейки

$$P_{cx} = \frac{1}{4} \left(u_{x0}^{n+1/2} + u_{x1}^{n+1/2} + u_{x2}^{n+1/2} + u_{x3}^{n+1/2} \right) M;$$

$$P_{cy} = \frac{1}{4} \left(u_{y0}^{n+1/2} + u_{y1}^{n+1/2} + u_{y2}^{n+1/2} + u_{y3}^{n+1/2} \right) M.$$

Здесь M — масса ячейки; u_{xi} , u_{yi} ($i = \overline{0, 3}$) — компоненты векторов скорости в четырех вершинах ячейки.

2. Рассчитываются компоненты суммарного импульса частиц, принадлежащих данной ячейке:

$$P_{px} = \sum_p \tilde{u}_{xp}^{n+1/2} m_p; \quad P_{py} = \sum_p \tilde{u}_{yp}^{n+1/2} m_p.$$

Здесь значения скоростей частиц получены с использованием координат частиц, найденных методом билинейной интерполяции, и старых координат частиц:

$$\tilde{u}_{xp}^{n+1/2} = \frac{\tilde{x}_p^{n+1/2} - x_p^n}{\tau}; \quad \tilde{u}_{yp}^{n+1/2} = \frac{\tilde{y}_p^{n+1/2} - y_p^n}{\tau}.$$

3. Вычисляются весовые коэффициенты $\lambda_x = P_{cx}/P_{px}$, $\lambda_y = P_{cy}/P_{py}$.

Скорости и координаты частиц пересчитываются с использованием полученных коэффициентов:

$$u_{xp}^{n+1/2} = \lambda_x \tilde{u}_{xp}^{n+1/2}; \quad u_{yp}^{n+1/2} = \lambda_y \tilde{u}_{yp}^{n+1/2};$$

$$x_p^{n+1/2} = x_p^n + u_{xp}^{n+1/2} \tau; \quad y_p^{n+1/2} = y_p^n + u_{yp}^{n+1/2} \tau.$$

Определение объема, плотности и энергии частиц. Полагаем, что относительные приращения плотности и энергии частиц данного компонента среды равны соответствующим относительным приращениям этих величин, вычисленных для этого компонента в среднем. Отсюда следующие формулы:

$$\rho_{\xi p}^{n+1/2} = \rho_{\xi p}^n + \left(\rho_{\xi}^{n+1/2} - \rho_{\xi}^n \right) \frac{\rho_{\xi p}^n}{\rho_{\xi}^n}; \quad (1)$$

$$e_{\xi p}^{n+1/2} = e_{\xi p}^n + \left(e_{\xi}^{n+1/2} - e_{\xi}^n \right); \quad (2)$$

$$V_{\xi p}^{n+1/2} = V_{\xi p}^n \frac{V_{\xi}^{n+1/2}}{V_{\xi}^n}. \quad (3)$$

Легко показать, что при использовании (1)–(3) суммарные массы частиц не меняются, а суммарные внутренние энергии частиц будут равны энергии, сосчитанной для данного компонента в целом, т. е. имеют место соотношения

$$\rho_{\xi}^{n+1/2} V_{\xi} = \sum_p \rho_{\xi p}^{n+1/2} V_{\xi p};$$

$$e_{\xi}^{n+1/2} m_{\xi} = \sum_p e_{\xi p}^{n+1/2} m_{\xi p}.$$

3. Эйлеров этап

Основные трудности при реализации метода частиц связаны с эйлеровым этапом, а именно с расчетом потоков массы и внутренней энергии из ячейки в ячейку. В классическом методе частиц Харлоу при переходе частицы в соседнюю

ячейку ее масса и энергия "переходят" вместе с ней. В связи с дискретным (и соответственно немонотонным) характером переноса массы и всех величин, определенных на единицу массы, этому методу свойственна большая немонотонность профилей величин. В разд. 4 подробно рассматривается алгоритм монотонизации метода частиц.

В расчетах задавать все компоненты среды с применением частиц не всегда рационально в силу необходимости использования дополнительных вычислений и памяти компьютера. Поэтому применение частиц должно быть ограничено. Целесообразно применять их для тех компонентов, для которых погрешности, связанные с решением уравнения адвекции, наиболее ощутимы, например, для тонких слоев или веществ, которые требуют хранения истории поведения лагранжевой частицы.

В рамках предлагаемого метода разработаны алгоритмы:

- 1) взаимодействия компонентов, описанных с применением частиц, и компонентов, расчет которых производится по стандартной схеме методики ЭГАК;
- 2) для поддержки существования, образования и удаления частиц только в окрестности КГ;
- 3) объединения частиц;
- 4) пересчета плотности и энергии с частиц на ячейку в целом.

Алгоритмы указаны в последовательности их выполнения на эйлеровом этапе. Перед выполнением алгоритма 1 производится монотонизация метода частиц.

4. Алгоритм монотонизации метода частиц

Одномерный случай. Рассмотрим идею алгоритма в случае одномерного течения для одной "переходящей" из ячейки в ячейку частицы (рис. 1, 2). На рисунках приводятся две счетные ячейки, в которых содержатся частицы, обозначенные точками; пунктиром указаны воображаемые границы их объемов¹.

Поток вещества направлен слева направо в соответствии с указанной скоростью движения u

¹В методике при вычислениях необходимы лишь численные значения объемов: их конфигурации не хранятся.

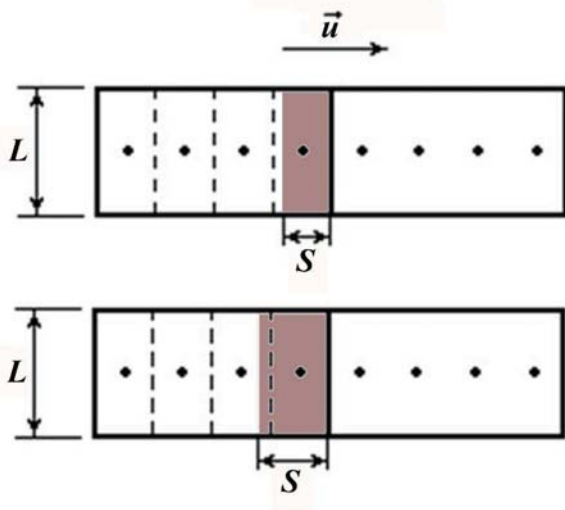


Рис. 1. Иллюстрация причины немонотонности: *a* — поток объема меньше объема частицы; *b* — поток объема больше объема частицы

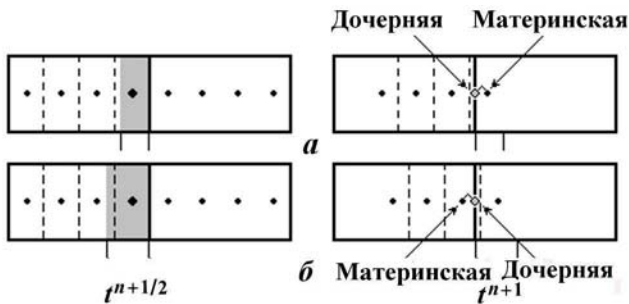


Рис. 2. Иллюстрация к алгоритму монотонизации в одномерном случае: *a* — $\delta V < 0$; *b* — $\delta V > 0$

(см. рис. 1). Тогда вытекающий из ячейки слева поток вещества объемом² ΔV (выделен чуть более темным цветом) равен произведению длины поперечного ребра ячейки L в поперечном сечении на величину $S = u\tau$, т. е.

$$\Delta V = Lu\tau. \quad (4)$$

Причиной немонотонности классического метода частиц является несовпадение реального потока объема (и соответственно массы вещества), сосчитанного по формуле (4), с объемом частицы, перешедшей через поперечное ребро ячейки. В одном случае (см. рис. 1, *a*) из ячейки слева перемещается объем, меньший объема частицы, в другом (см. рис. 1, *b*) — больший объема частицы.

²В дальнейшем для краткости будем использовать термин *поток объема*.

Замечание. В двумерном случае и при перемещении нескольких частиц суть дела не меняется.

Введем следующее обозначение:

$$\delta V = \Delta V - V_p, \quad (5)$$

где ΔV — поток объема, сосчитанный по формуле (4); V_p — объем частицы с номером p , перешедшей из одной ячейки в другую.

Приведем объяснение алгоритма монотонизации для обоих указанных случаев.

1. *Поток объема ΔV меньше объема переходящей частицы ($\delta V < 0$).* Данная ситуация отображена на рис. 2, *a*. Слева — состояние после лагранжева этапа вычислений — на момент $t^{n+1/2}$, справа — на момент t^{n+1} . В этом случае частица, перешедшая из донорной ячейки в акцепторную, делится на две части — материнскую и дочернюю. Материнская частица переходит в акцепторную ячейку, приобретая координаты в соответствии с ее скоростью и объемом, равный вытекающему из донорной ячейки объему вещества ΔV . Дочерняя частица получает объем, равный разности объема первоначальной частицы и потока объема ΔV , и помещается в донорную ячейку, приобретая координаты точки на стороне ячейки. Связь между материнской и дочерней частицами обозначена в виде ломаного отрезка.

2. *Поток объема ΔV больше объема переходящей частицы ($\delta V > 0$).* Данная ситуация отображена на рис. 2, *b*. В этом случае необходимо восполнить недостаток объема переходящей частицы за счет принудительного перемещения некоторых частиц или фрагментов частиц из донорной ячейки в акцепторную. Таким образом, дробится ближайшая к общему ребру этих ячеек частица из непорешенных в акцепторную ячейку. Она порождает дочернюю частицу объемом, равным разности объемов δV , которая помещается в акцепторную ячейку как точка с координатами на общем ребре донорной и акцепторной ячеек.

В случае перемещения из ячейки в ячейку не одной, а сразу нескольких частиц формула (5) примет вид

$$\delta V = \Delta V - \sum_p V_p,$$

где ΔV — поток объема, сосчитанный по формуле (4); V_p — объем частицы с номером p , перешедшей из ячейки в ячейку; суммирование ведется по всем перешедшим частицам.

В связи с этим приведем отличия от описанного выше алгоритма.

1. Поток объема ΔV меньше суммы объемов переходящих частиц ($\delta V < 0$). Данная ситуация отображена на рис. 3, а. В этом случае делятся все переходящие частицы. В акцепторную ячейку попадают материнские частицы с объемами

$$V_p^M = \frac{\Delta V}{\sum_p V_p}.$$

На границе донорной ячейки остаются дочерние частицы, каждая из которых имеет объем

$$V_p^D = V_p - V_p^M.$$

2. Поток объема ΔV больше суммы объемов переходящих частиц ($\delta V > 0$) — см. рис. 3, б. Чтобы заполнить оставшийся объем δV , делится ближайшая к границе частица из донорной ячейки. При этом, если $V_p < \delta V$, весь объем материнской частицы переходит к дочерней и делится следующая частица из донорной ячейки. Если донорная ячейка состоит из смеси нескольких компонентов, а акцепторная — чистая и заполнена компонентом, который присутствует в донорной ячейке, то делиться в первую очередь будут частицы этого компонента.

Во всем остальном в алгоритме ничего не меняется.

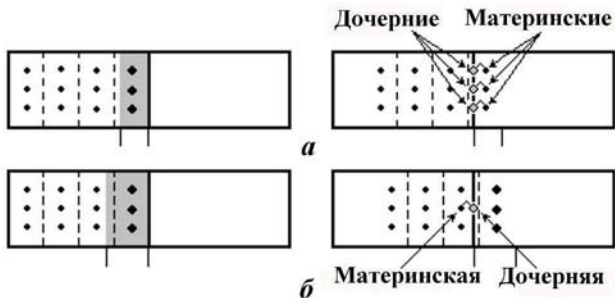


Рис. 3. Иллюстрация к алгоритму монотонизации в одномерном случае при переходе из ячейки в ячейку нескольких частиц: а — $\delta V < 0$; б — $\delta V > 0$

Обобщение на двумерный случай. Здесь прежде всего представляет интерес случай перехода частицы в соседнюю ячейку, расположенную по диагонали от донорной ячейки (рис. 4). Этот случай является особым из-за того, что в методике ЭГАК при решении уравнения адвекции и соответствующем расчете потоков используется расщепление по направлениям и не преду-

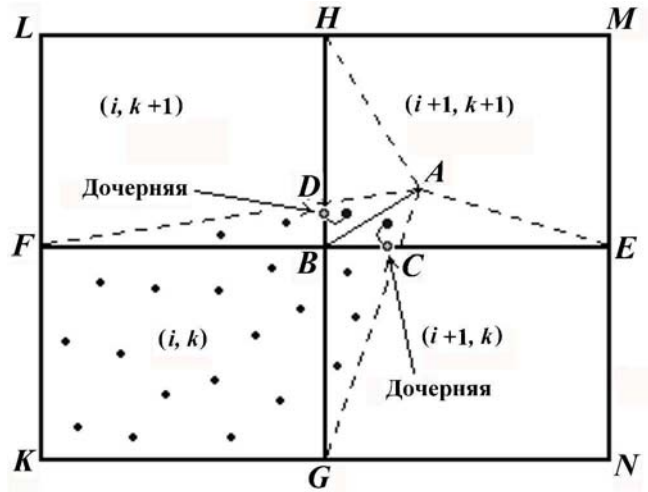


Рис. 4. Иллюстрация к вычислению потоков объема на эйлеровом этапе

смотрены потоки из ячейки в ячейку по диагонали.

Рассмотрим частный случай, изображенный на рис. 4. Пусть на эйлеровом этапе происходит перемещение лишь одного узла A в новое положение B . Пунктирными линиями на рисунке показано положение на момент времени $t^{n+1/2}$ (после лагранжева этапа вычислений) сторон ячеек, для которых данный узел сетки является общей вершиной. Точки C и D определяются как точки пересечения прямых AG с BE и AF с BH соответственно.

В соответствии с правилами методики ЭГАК потоки объема между ячейками определяются следующим образом. Объем вещества, который сопоставлен треугольнику ABG (для краткости — объем треугольника ABG), передается из ячейки (i, k) в ячейку $(i + 1, k)$, т. е.

$$V_{i,k}^{n+1} = V_{i,k}^{n+1/2} - V_{ABG};$$

$$V_{i+1,k}^{n+1} = V_{i+1,k}^{n+1/2} + V_{ABG}.$$

Исходя из этого для всех рассматриваемых ячеек с учетом всех потоков имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} V_{i,k}^{n+1} &= V_{i,k}^{n+1/2} - V_{ABG} - V_{ABF} = V_{BFKG}; \\ V_{i+1,k}^{n+1} &= V_{i+1,k}^{n+1/2} + V_{ABG} - V_{ABE} = V_{BGNE}; \\ V_{i,k+1}^{n+1} &= V_{i,k+1}^{n+1/2} - V_{ABH} + V_{ABF} = V_{BFLH}; \\ V_{i+1,k+1}^{n+1} &= V_{i+1,k+1}^{n+1/2} + V_{ABE} + V_{ABH} = V_{BGNE}. \end{aligned} \quad (6)$$

Заметим, что по формулам (6) объем треугольника ABC входит дважды в потоки объема для

ячейки $(i+1, k)$ — как часть треугольников ABG и ABE , но один раз — со знаком плюс, а второй раз — со знаком минус. Тем самым в новый объем этой ячейки он фактически не войдет, а войдет в объем ячейки $(i+1, k+1)$. Аналогично дело обстоит с объемом треугольника ABD , который так же войдет в объем ячейки $(i+1, k+1)$ и не войдет в объем ячейки $(i, k+1)$.

В соответствии с вышесказанным при рассмотрении вкладов частиц полагается, что частица, находящаяся в треугольнике ABC , при счете потоков между данной ячейкой (i, k) и ее недиагональными соседями переходит в ячейку $(i+1, k)$, а частица из треугольника ABD , переходит в ячейку $(i, k+1)$. Затем, при счете потоков между ячейками $(i+1, k)$, $(i+1, k+1)$ и $(i, k+1)$, $(i+1, k+1)$ эти частицы переходят в ячейку $(i+1, k+1)$. Поэтому при рассмотрении процесса с точки зрения монотонности потоков вводятся соответствующие дочерние частицы, как показано на рис. 4. Отметим, что при вычислении потоков положение материнской частицы тем не менее определяется в истинной акцепторной ячейке $(i+1, k+1)$.

Моделирование деления частиц основывается на следующих принципах:

- термодинамическое состояние делящейся частицы дублируется для обеих получаемых частиц (тем самым обеспечивается выполнение законов сохранения);
- в качестве номера дочерней частицы берется номер материнской частицы, который одновременно служит признаком того, что частица дочерняя;
- для материнской частицы никакой информации о дочерних частицах не имеется;
- у одной материнской частицы может быть несколько дочерних;
- у дочерней частицы может быть только одна материнская;
- дочерние частицы также могут делиться, однако всем последующим дочерним частицам будет присвоен номер первоначальной материнской частицы;
- дочерние частицы размещаются на общей стороне между донорной и акцепторной ячейками, чтобы максимально быстро обеспечить их слияние с соответствующими материнскими частицами.

5. Алгоритм взаимодействия частиц со средой, описываемой без частиц

В случае смешанных ячеек, содержащих вещества без частиц и с частицами, алгоритм расчета потоков объема видоизменяется.

Рассмотрим случай, когда ячейка заполняется разнотипными веществами, одно из которых описывается лишь сеточными величинами, а второе — частицами (соответственно 1 и 2 на рис. 5). Пусть необходимо распределить по компонентам поток, направленный слева направо (выделенный на рисунке более темным цветом).

Сначала поток объема заполняем объемом переходящих частиц. Если суммарный объем переходящих частиц превышает поток объема через граничное ребро, "работает" описанный выше алгоритм деления частиц (см. разд. 4, случай $\delta V < 0$).

В случае нехватки суммарного объема переходящих частиц для заполнения всего вытекающего объема выполняются следующие действия. Недостающая часть потока объема заполняется оставшимся компонентом без частиц. Если *бесчастичных* компонентов несколько, объем между ними распределяется по алгоритму метода концентраций [1]. Если и бесчастичных компонентов не хватает, то остаток потока объема заполняется частицами с использованием алгоритма деления для случая $\delta V > 0$ из разд. 4.

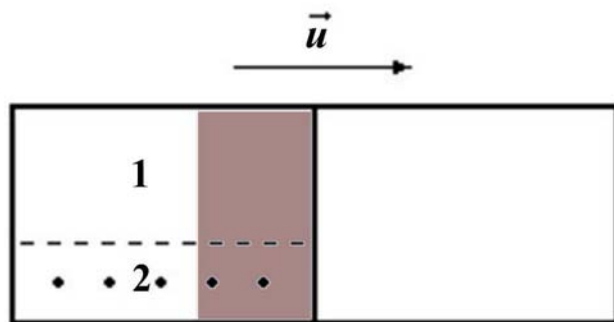


Рис. 5. Поток объема из смешанной ячейки

6. Алгоритмы счета в окрестности КГ

В рамках предлагаемого метода разработан способ счета с использованием частиц только в окрестностях КГ между веществами. Окрестностью КГ будем считать смешанные ячейки и по одному слою прилегающих к ним с обеих сторон чистых ячеек каждого вещества.

На рис. 6 изображены варианты расположения частиц относительно КГ. Темно-серым и светло-серым цветом закрашены чистые ячейки с различными веществами, серым (см. рис. 6, б) — смешанная ячейка. Частицы в ячейках выделены контрастным цветом. Рис. 6, а иллюстрирует задание обоих веществ частицами только в окрестности КГ на начальный момент времени, а рис. 6, б — расположение частиц в ходе счета.

Таким образом, если вещество описано частицами только в окрестности КГ, то одно и то же вещество присутствует в двух ипостасях: как с частицами, так и без них, в зависимости от геометрического положения конкретной ячейки. Отсюда главная сложность алгоритма — взаимодействие частиц и бесчастичного вещества для одного и того же компонента смеси.

Для упрощения алгоритма в рамках методики запрещается нахождение в одной ячейке вещества, описанного частицами, и того же вещества, но без частиц. Формально для каждой ячейки это требование выглядит так: либо $V_{\xi} = \sum_{\xi p} V_{\xi p}$, либо $\sum_{\xi p} V_{\xi p} = 0$.

Рассмотрим две причины возникновения ситуаций одновременного нахождения в ячейке вещества с разнотипным описанием. На рис. 7, а, б изображены ячейки, заполненные одним и тем же веществом. Но для каждого случая в одной из них вещество описано частицами (черные точки), а в другой — без частиц. Более темным цветом заштрихован поток объема относительно объема всей ячейки, стрелкой указано его на-

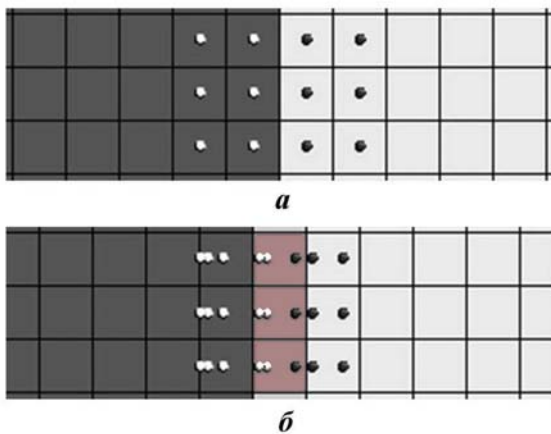


Рис. 6. Расположение частиц веществ относительно КГ : а — $t = 0$; б — $t > 0$

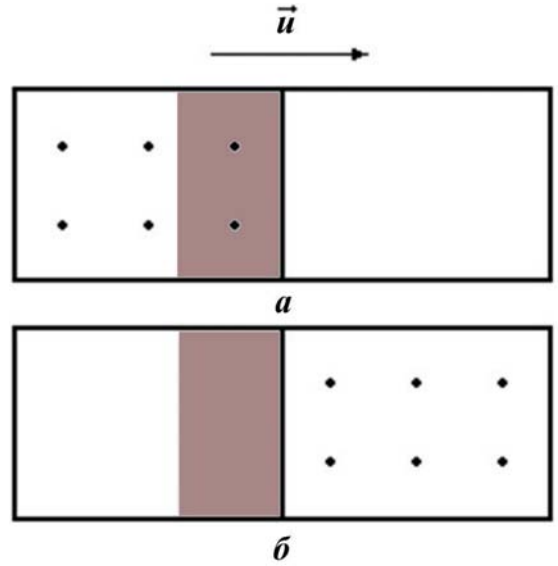


Рис. 7. Конфликтные ситуации при двух способах задания одного и того же вещества: а — поток объема из ячейки с частицами в ячейку без частиц; б — поток объема из ячейки без частиц в ячейку с частицами

правление. Далее приведены описания и способы исключения нежелательной ситуации.

1. На рис. 7, а представлен поток объема из ячейки с частицами в ячейку без частиц. В этом случае алгоритм деления частиц на две, описанный в разд. 4, для донорной ячейки не меняется, но при этом частица, которая должна была попасть в акцепторную ячейку, удаляется с пересчитыванием термодинамических параметров, а оставшаяся частица в донорной ячейке становится обычной (не дочерней).

2. На рис. 7, б представлен расчет потока объема из ячейки без частиц в ячейку с частицами. В этом случае в акцепторную ячейку добавляется частица с объемом, равным потоку объема, и с параметрами вещества донорной ячейки. При этом добавляемая частица сразу сливается с одной из частиц акцепторной ячейки. Правила объединения приведены ниже.

Для сохранения ситуации, при которой частицы присутствуют лишь в окрестности КГ, производится удаление частиц из ячеек вне ее окрестности и образование частиц в ячейках окрестности КГ.

7. Алгоритм объединения частиц

В противовес делению частиц (см. разд. 4) разработан алгоритм их объединения. Данная

процедура необходима для предотвращения бесконтрольного роста количества частиц при их дроблении.

Две частицы одного и того же вещества, находящиеся в пределах одной ячейки, подлежат объединению, если выполняется один из следующих критериев:

- одна из частиц является дочерней по отношению к другой;
- две дочерние частицы имеют одну и ту же материнскую;
- частицы имеют близкие (с точностью до константы) координаты;
- количество частиц превышает установленное максимальное их количество в ячейке;
- одна из частиц имеет относительно малый объем.

Правила объединения частиц следующие:

- если объединяются дочерняя и материнская частицы, то полученная частица получает координаты материнской;
- если объединяются две дочерние частицы (p_1 и p_2), то координаты полученной частицы (p) выбираются пропорционально массам исходных частиц:

$$\tilde{x}_p = x_{p_1} + (x_{p_2} - x_{p_1}) \frac{m_{p_2}}{m_{p_1} + m_{p_2}};$$

$$\tilde{y}_p = y_{p_1} + (y_{p_2} - y_{p_1}) \frac{m_{p_2}}{m_{p_1} + m_{p_2}};$$

- термодинамические параметры полученной частицы вычисляются с обеспечением законов сохранения:

$$\tilde{e}_p = \frac{e_{p_1} \rho_{p_1} V_{p_1} + e_{p_2} \rho_{p_2} V_{p_2}}{\rho_{p_1} V_{p_1} + \rho_{p_2} V_{p_2}};$$

$$\tilde{\rho}_p = \frac{\rho_{p_1} V_{p_1} + \rho_{p_2} V_{p_2}}{V_{p_1} + V_{p_2}};$$

$$\tilde{V}_p = V_{p_1} + V_{p_2}.$$

8. Алгоритм пересчета плотности и энергии с частиц на ячейку в целом

Для каждой ячейки, содержащей частицы, происходит пересчет величин по следующим формулам:

$$\rho_\xi^{n+1} = \frac{\sum_p \rho_{\xi p} V_{\xi p}}{\sum_p V_{\xi p}}; \quad e_\xi^{n+1} = \frac{\sum_p e_{\xi p} \rho_{\xi p} V_{\xi p}}{\sum_p \rho_{\xi p} V_{\xi p}},$$

где суммирование ведется по частицам компонента ξ в рассматриваемой ячейке.

9. Тестирование метода

Задача 1. О движении скачка уплотнения в форме креста. В области $0 < x < 12$; $0 < y < 12$ заданы два вещества (0 и 1). Для вещества 0 $\rho_0 = 1$, $e_0 = 0$, $u_x = 1$, $u_y = 1$, частицы не заданы; для вещества 1 $\rho_0 = 10$, $e_0 = 0$, $u_x = 1$, $u_y = 1$, задана одна частица на ячейку. Во всей области $P = 0$, т. е. в данной задаче газодинамика фактически отсутствует, имеется лишь конвективный перенос.

Расчеты проводились на неподвижной сетке 60×60 .

Результаты расчетов по ММЧ и по методике ЭГАК³ приведены в форме растровых картин плотности на момент времени $t = 7,08$ (рис. 8). Из рисунка видно, что при решении линейного уравнения переноса ММЧ дает точный результат.

Задача 2. Одномерная стационарная ударная волна. Рассматривается одномерная задача в следующей постановке. В области $0 < x < 50$; $0 < y < 4$ имеется идеальный газ с параметрами $\rho = 1$; $P = 0$; $u = 0$; $\gamma = 3$. По веществу слева направо движется плоская ударная волна с параметрами за фронтом $\rho = 2$; $e = 2$; $P = 8$; $u = 2$.

Расчеты проводились на неподвижной сетке 100×4 . В расчетах по МЧ и ММЧ задавалось по 4 частицы на ячейку.

На рис. 9 приводятся графики зависимости плотности от координаты на момент времени $t = 10$, полученные в расчетах по ММЧ и МЧ, а также по методу РРМ [4]. Видно, что ММЧ дает примерно такой же результат, что и РРМ, и лучший результат по сравнению с МЧ. Точное положение ударной волны — $x = 40$.

Задача 3. Точечный взрыв. В области $0 < x < 20$, $0 < y < 20$ имеются два вещества (рис. 10, а): в круге радиусом 0,1 с центром

³Здесь и далее ММЧ — монотонный метод частиц, МЧ — метод частиц (классический), термин ЭГАК используется для обозначения одноименной методики, основанной на сеточном подходе.

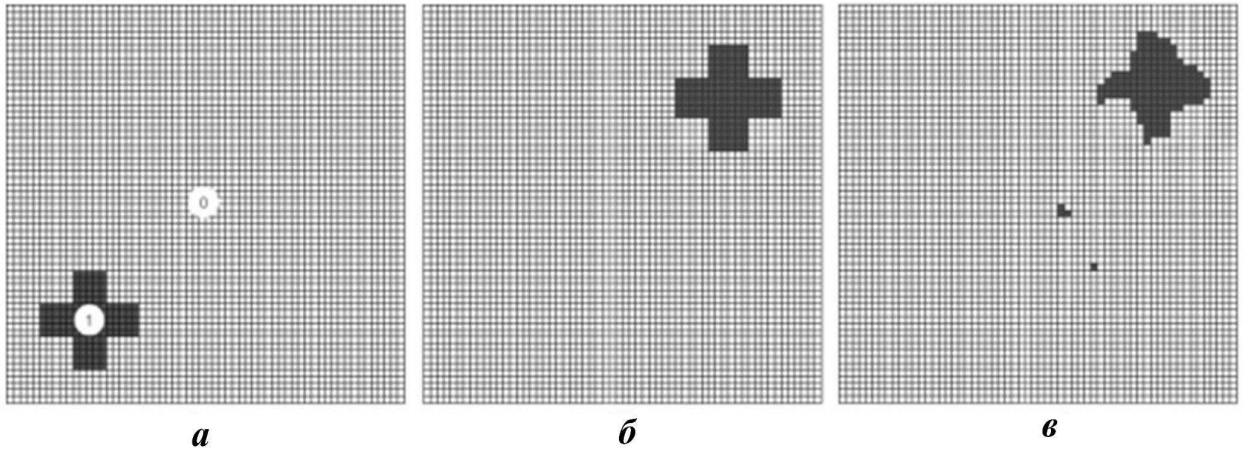


Рис. 8. Задача 1. Растровые картины плотности: $a - t = 0$; $б - t = 7,08$, ММЧ; $в - t = 7,08$, ЭГАК

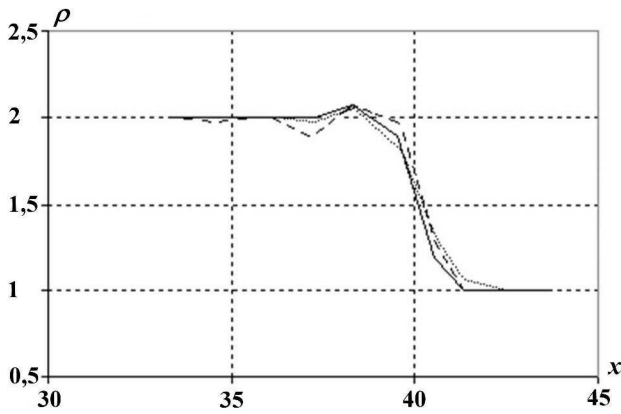


Рис. 9. Задача 2. Графики зависимости плотности от координаты, $t = 10$: - - - МЧ; — — ММЧ; ... — РРМ

в начале координат помещен идеальный газ с параметрами $\rho = 1, e = 1, P = 0, \gamma = 1,4$ (вещество 0); в остальной части области — идеальный газ с параметрами $\rho = 1, e = 0, P = 0, \gamma = 1,4$ (вещество 1).

Проведены расчеты методом РРМ, ММЧ и МЧ на неподвижной прямоугольной сетке. Расчеты по МЧ и ММЧ проводились с заданием в начальный момент времени по 4 частицы на ячейку. В данной задаче в расчете по ММЧ происходит увеличение количества частиц в области вещества 0 из-за его сильного расширения.

Результаты расчета по ММЧ представлены на рис. 10, б в виде растровой картины плотности на момент времени $t = 100$.

На рис. 11 приводятся графики зависимости плотности от радиуса для всех ячеек части счет-

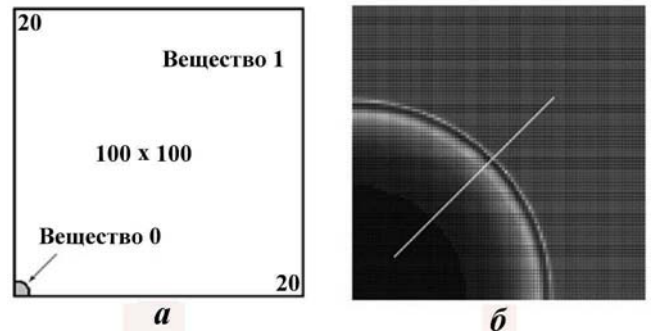


Рис. 10. Схема постановки задачи 3 (а) и растровая картина плотности на момент $t = 100$ (б)

ной области, где в момент $t = 100$ находится ударная волна. Они демонстрируют степень сохранения сферической симметрии рассматриваемого течения различными методами.

На рис. 12 приводятся профили плотности в зависимости от радиуса в сечении, отмеченном на рис. 10, б отрезком белого цвета.

Из представленных рисунков видно, что и в этой задаче точность ММЧ близка к точности РРМ и заметно выше точности МЧ.

Задача 4. Сферическое схождение оболочки. Начальная геометрия задачи взята из работы [5] и показана на рис. 13 ($R_1 = 0,8; R_2 = 1; L = 1,1; Ox$ — ось симметрии).

В области 1 $\rho_0 = 0,01, e_0 = 0, U_0 = 0$; уравнение состояния — для идеального газа с $\gamma = 5/3$. В области 2 $\rho_0 = 10, e_0 = 0, U_0^R = -1$; уравнение состояния — *трехчлен* с константами $\rho_0 = 10, c_0 = 4, n = 5, \gamma = 2$. На границе $R_2 = 1$ давле-

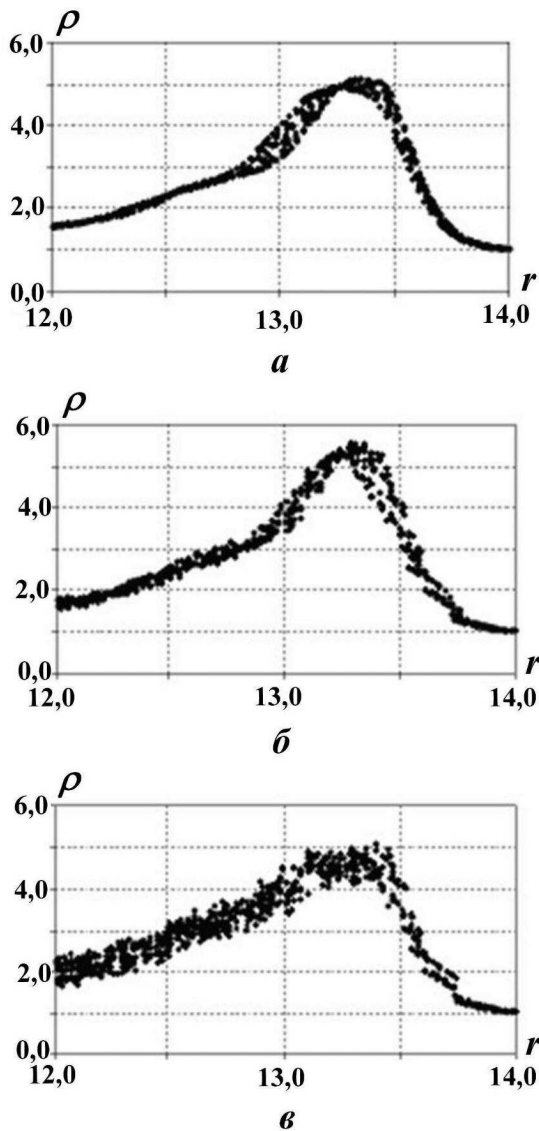


Рис. 11. Задача 3. Плотность вещества по всем ячейкам в зависимости от радиуса, $t = 100$: a — РРМ; $б$ — ММЧ; $в$ — МЧ

ние $P = 0$. В области 3 — вакуум с $P = 0$. Единицы измерения величин: ρ — г/см³, t — 10 мкс, L — см.

Расчеты проводились на неподвижной равномерной сетке 110×110 .

В расчете по ММЧ частицы задавались как в области с газом, так и в оболочке (1 частица на ячейку; ограничение на количество частиц — 4). Сравнение результатов проводилось с расчетом по методике ЭГАК. Данная задача интересна тем, что в ней количество частиц постоянно уменьшается в процессе счета из-за сжатия обоих веществ.

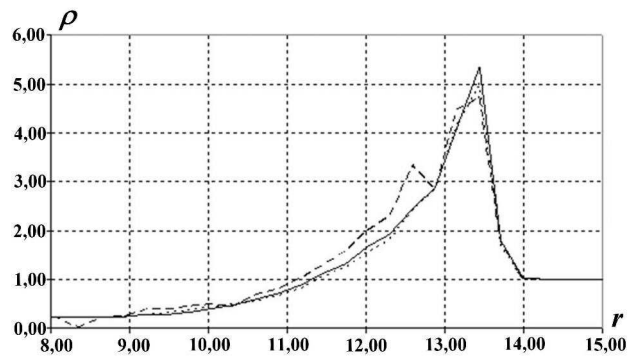


Рис. 12. Задача 3. Графики зависимости плотности от радиуса в выбранном сечении, $t = 100$: \cdots — РРМ; $---$ — МЧ; $---$ — ММЧ

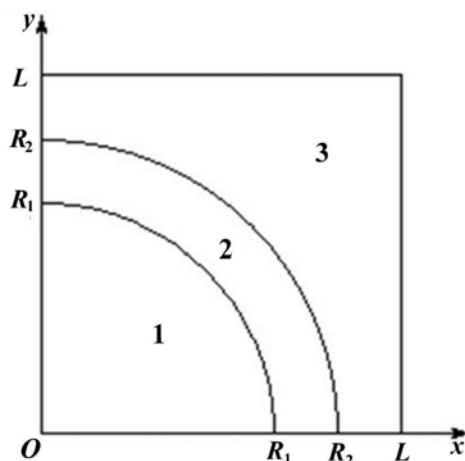


Рис. 13. Геометрия задачи 4

Основной оцениваемый результат в этой задаче — максимальное сжатие газа. Отметим, что эталонное значение плотности, полученное в расчетах на сходимость по одномерной методике [6], составляет ~ 25 . Максимальная средняя плотность газа и соответствующее ей время для каждого из расчетов равны: для ММЧ — 16,03 при $t = 0,368$; для ЭГАК — 16,49 при $t = 0,369$. Для наглядности на рис. 14, a приводится фрагмент счетной области с частицами на момент $t = 0,368$. Также приведены значения плотности для всех ячеек области сжатого газа при расчете по ММЧ (рис. 14, $б$) и по стандартной методике ЭГАК (рис. 14, $в$).

Максимальные сжатия газа, а также времена их достижения в ЭГАК и ММЧ близки, однако максимальные сжатия значительно ниже по сравнению с эталонным решением, что объясня-

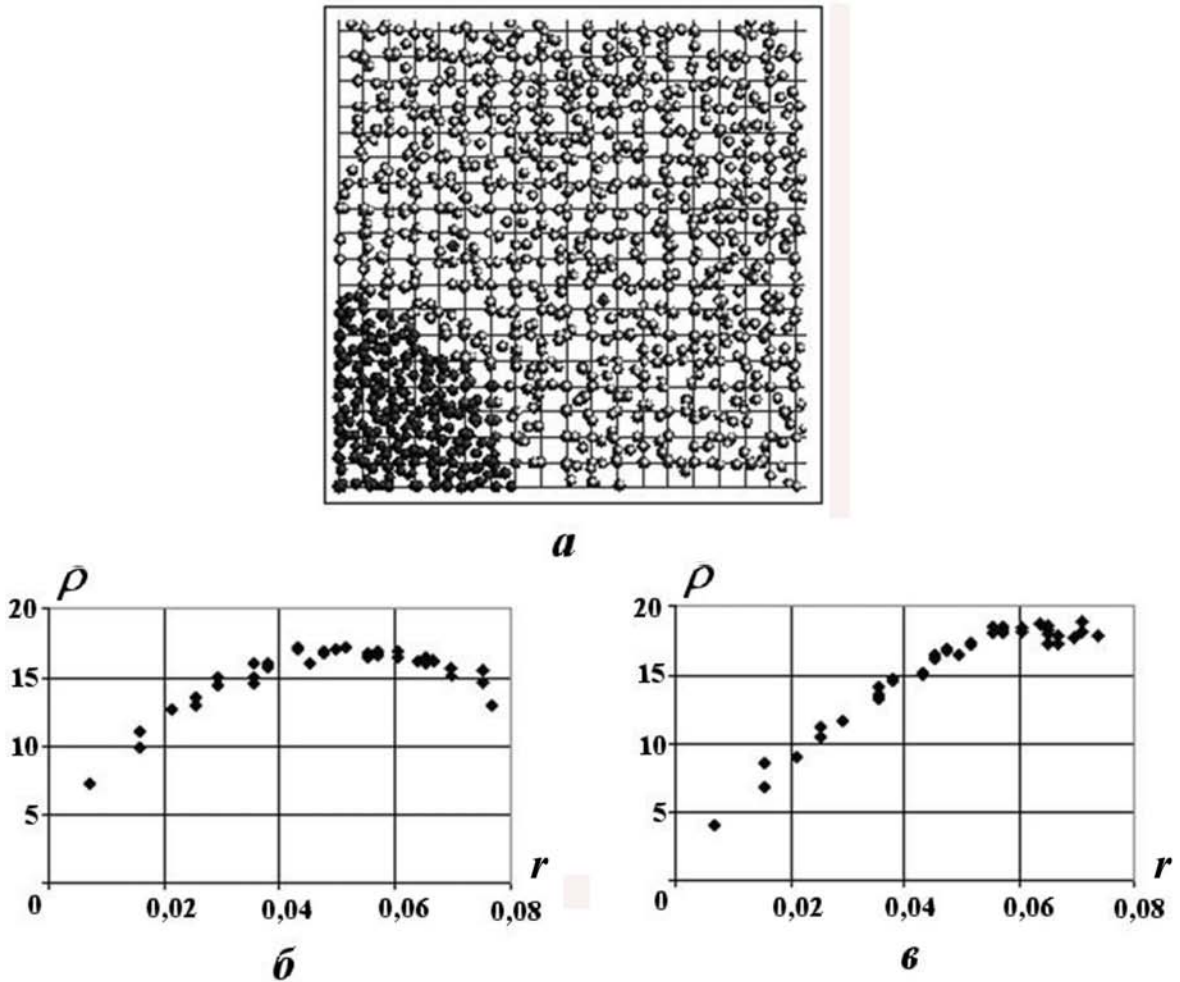


Рис. 14. Расположение частиц в центральной области (а). Значения плотности для всех ячеек газа, рассчитанные по ММЧ (б) и по стандартной методике ЭГАК (в)

ется малым количеством ячеек в этих расчетах (при увеличении количества ячеек решение приближается к эталонному [5]). Меньшее сжатие в расчете ММЧ по сравнению с ЭГАК объясняется наличием пятен газа, "оторвавшихся" от основной области в расчете ММЧ. С точки зрения сохранения симметрии течения ММЧ дает результат примерно с той же точностью, что и методика ЭГАК (см. [7]).

Заключение

В работе дано описание ММЧ. Метод разработан для моделирования газодинамических течений многокомпонентной среды при совместном использовании сеточных методов методики ЭГАК без частиц, основанных на методе РРМ, и ММЧ для некоторых слоев. Проведены методические исследования метода.

Расчеты показали, что ММЧ имеет близкую с методом РРМ точность в задачах с ударно-волновыми течениями и существенно большую точность, как и классический МЧ, в задачах конвективного переноса. В то же время ММЧ свободен от основного недостатка МЧ, а именно сильной немонотонности решения, связанной с дискретным переносом массы.

Дальнейшие перспективы ММЧ авторы связывают с его применением в задачах, требующих хранения истории процесса для лагранжевых точек. Такие задачи возникают при использовании кинетик выгорания ВВ, в моделях разрушения материалов и др.

Список литературы

1. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С. и др. Расчет газодинамических

- течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566—569.
2. Харлоу Ф. Х. Численные методы частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 316—342.
 3. Янилкин Ю. В., Шанин А. А., Ковалев Н. П. и др. Комплекс программ ЭГАК для расчетов двумерных течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 4. С. 69—75.
 4. Янилкин Ю. В., Колобянин В. Ю., Чистякова И. Н., Егужова М. Ю. Применение метода РРМ в расчетах по методикам ЭГАК и ТРЭК // Там же. 2005. Вып. 4. С. 69—79.
 5. Янилкин Ю. В., Топорова О. О. Двумерная скалярная и искусственная вязкость методики ЭГАК в сферических системах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 3. С. 46—54.
 6. Бондаренко Ю. А. Порядок аппроксимации, порядок численной сходимости и экономичность счета многомерной газовой динамики в переменных Эйлера на примере расчетов задачи "blast waves" // Там же. 2004. Вып. 4. С. 51—61.
 7. Дарова Н. С., Дибиров О. А., Жарова Г. В. и др. Комплекс программ ЭГАК. Лагранжево-эйлерова методика расчета двумерных газодинамических течений многокомпонентной среды // Там же. 1994. Вып. 2. С. 51—58.
5. Янилкин Ю. В., Топорова О. О. Двумерная скалярная и искусственная вязкость методи-

Статья поступила в редакцию 19.09.11.

УДК 519.6

ПРОГНОЗ ПАРАМЕТРОВ ПОДСИСТЕМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ЭКСАФЛОПСНОГО КЛАССА

Ю. Г. Бартенев, Ю. А. Бондаренко, В. Ф. Спиридонов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Приводятся оценки возрастных пропускной способности коммуникационной сети в целом, объема памяти всех уровней и производительности графической подсистемы в зависимости от увеличения числа вычислительных узлов (серверов) и роста их производительности. В качестве модели вычислительного алгоритма использованы явные разностные схемы для трехмерных задач газовой динамики. Предполагается, что при переходе от существующей ЭВМ к проектируемой вычислительной системе эксафлопсного класса время счета одной задачи на всем вычислительном поле не меняется.

Ключевые слова: суперЭВМ, параметры вычислительной системы, масштабирование вычислительной системы, пропускная способность системы межпроцессорных обменов, быстродействие и объем оперативной и внешней памяти, быстродействие системы графической обработки, трехмерные нестационарные задачи, явные разностные схемы.

Введение

Определению параметров подсистем (коммуникационной, оперативной и внешней памяти, графической обработки) ЭВМ при росте ее производительности всегда уделялось достаточное внимание [1–4]. Предлагаемый в данной работе прогноз строится на основе формул для задач трехмерного моделирования, отражающих возрастание количества вычислений на расчет газодинамического процесса по явной схеме при повышении подробности сетки. Отметим, что подход к оценке характеристик перспективной ЭВМ, основанный на модели вычислений, аналогичен подходу И. Д. Софронова [1].

Цель данной работы — дать разработчикам вычислительной системы (суперЭВМ) эксафлопсного класса ориентиры на длительную перспективу по необходимым параметрам: пропускной способности коммуникационной подсистемы, быстродействию подсистем памяти, объему подсистем памяти и других подсистем в зависимости от быстродействия суперЭВМ и ее вычислительных компонентов. Ожидается, что использование таких ориентиров в виде математических соотношений позволит при проектировании мощной суперЭВМ более точно определить задачи по ее разработке.

Обычно считается, что указанные характеристики зависят линейно от производительности вычислителя. Но это оправданно при небольшом возрастании производительности. Практика показывает, что такая простая зависимость тем больше завышает достаточный для эффективного использования суперЭВМ уровень требований, чем более мощная суперЭВМ создается.

При решении задачи в одной и той же геометрической области в одном и том же интервале физического времени исходная математическая модель (модель явной газовой динамики на структурированных сетках, например, построенная по методике ЛЭГАК [5]) дает сверхлинейные (нелинейные в степени $k > 1$) зависимости количества вычислений от объема обрабатываемых данных с $k = 4/3$ (кубическая сетка), $k = 5/3$ (цилиндрическая сетка) и $k = 6/3 = 2$ (сферическая сетка) при линейной зависимости шага по времени от минимального диаметра ячейки сетки (он уменьшается линейно, квадратично, кубично при сгущении указанных сеток во всех направлениях). Модель отражает характерную для сеточных методов декомпозицию трехмерной счетной сетки на подобласти (параобласти), преимущественную схему обмена данными меж-

ду соседними параобластями, при которой объем передаваемой на каждом временном шаге информации пропорционален числу ячеек (и количеству вычислений) параобласти в степени $2/3$.

По-видимому, подобные (выше линейной) зависимости количества вычислений от объема обрабатываемой информации присущи не только методикам явной газовой динамики, но и связанным с ними методикам (модели теплопроводности, переноса частиц), использующим аппроксимацию исходных дифференциальных уравнений на сетках. Одновременное с увеличением области увеличение числа ячеек в газодинамической задаче, увеличение числа частиц при молекулярно-динамическом моделировании ослабляют указанные зависимости, вплоть до линейной зависимости шага по времени от шага по сетке (или от числа частиц). Ряд других факторов, наоборот, усиливают степень нелинейности. Например, использование неявных схем, приводящих к решению сеточных уравнений, даст дополнительный множитель нелинейности, по-видимому, не меньше, чем логарифм от отношения числа ячеек двух сеток.

Все эти случаи, включая ориентацию суперЭВМ на специфику превалирующих классов задач, расчетные технологии и их изменение в перспективе, учесть затруднительно. Поэтому грубые оценки параметров суперЭВМ должны уточняться на этапах средне- и краткосрочных заданий на проектирование.

Предлагаемые ниже оценки представлены в виде формул, которые дают диапазон выбора зависимости между количеством вычислений (в флопах), и объемом данных задачи (в байтах). Их можно назвать соотношениями подобия при переходе от одной ЭВМ к другой, сохраняющем подсистемы второй ЭВМ настолько же сбалансированными, насколько они сбалансированы в первой ЭВМ. В этом диапазоне из определенных соображений указываются наиболее надежные с точки зрения авторов соотношения, которые далее применяются для оценки параметров суперЭВМ с повышенной производительностью.

Неформально, *сбалансированными* характеристиками подсистем (вычислительной, коммуникационной, памяти и др.) суперЭВМ будем называть такие характеристики, которые позволяют считать в многозадачном режиме все целевые классы задач (и обрабатывать результаты расчетов), в том числе основные классы задач с использованием не менее половины вычислительного ресурса, за некоторое допустимое время с

достаточной для потребителя эффективностью распараллеливания. Для большей определенности можно сказать, что на представительных с точки зрения потребителя тестовых задачах характерного размера должна достигаться производительность не ниже заданной.

Более подходящим показателем является *относительная сбалансированность*, учитывающая опыт счета на некоторой существующей ЭВМ. Если ее характеристики принять за приемлемый эталон эффективности счета задач¹, то новую ЭВМ будем считать сбалансированной, если эффективность счета задач, соответствующая увеличенной вычислительной емкости, будет такой же, как на существующей (*старой*) ЭВМ.

Применяя предлагаемые формулы, можно проектировать новую ЭВМ *сбалансированным образом*, используя параметры старой ЭВМ, если параметры ее подсистем сбалансированы. Для проверки применимости формул для эксафлопсной ЭВМ прогнозируемые параметры сравниваются с другими существующими прогнозами.

Математическая модель

Математическая модель базируется на следующих положениях:

- при увеличении объема данных задачи на новой ЭВМ относительно старой ЭВМ в D раз возрастание количества вычислений A определяется формулой $A = D^k$ (рассматриваются случаи $k = 1, 4/3, 5/3, 2$);
- суперЭВМ состоит из множества связанных коммуникационной сетью (без учета структуры) вычислительных узлов (без учета их структуры), на каждом из которых размещаются данные одной параобласти задачи;
- объем *обменной* информации одного занимаемого задачей вычислительного узла суперЭВМ (данных граничных ячеек параобласти, которыми он обменивается с другими узлами) увеличивается, как объем обрабатываемых этим узлом данных в степени $2/3$;

¹Вообще говоря, усложняя и удорожая машину, формально можно получать более высокую эффективность счета, однако затраты на ее создание могут не окупить прирост реальной производительности, который ограничен, в том числе и алгоритмической эффективностью распараллеливания реальных задач. Поэтому всегда приходится останавливаться на каком-то приемлемом уровне эффективности распараллеливания.

- физическая модель не меняется, количество вычислений в одной ячейке на одном шаге по времени не зависит от числа ячеек сетки; соответственно количество вычислений (в флопах) на одном шаге по времени возрастает пропорционально D (увеличению числа ячеек сетки), а общее количество вычислений в задаче возрастает за счет D и увеличения числа временных шагов (для рассматриваемой модели в D^{k-1} раз);
- размер одной записи в файловую систему новой ЭВМ увеличивается в D раз; задача на новой ЭВМ делает такое же число записей (считаем, что это число определяется характерными точками эволюции моделируемого процесса и не зависит от подробности сетки) и за то же время счета, что на старой ЭВМ;
- графическая система новой ЭВМ обрабатывает в D раз увеличенный объем данных за то же время, что на старой ЭВМ;
- одна соответственно увеличенная большая задача решается на всем вычислительном поле новой ЭВМ за то же время, что на старой ЭВМ (считаем, что это относится и к случаю одновременного счета множества задач — каждая соответственно увеличенного объема).

Пусть

T — возрастание времени счета на новой ЭВМ относительно старой;

n — увеличение числа вычислительных узлов (серверов) вычислительного поля на новой ЭВМ относительно старой;

p — возрастание производительности вычислительного узла;

$P = np$ — возрастание производительности новой ЭВМ относительно старой;

s — необходимое возрастание быстродействия памяти вычислительного узла (сервера);

b — необходимое возрастание пропускной способности внешнего коммуникационного интерфейса вычислительного узла (сервера);

$B = nb$ — возрастание пропускной способности коммуникационной сети в целом²;

V — необходимое увеличение объема памяти всех уровней: оперативной, внешней (файловой подсистемы);

S — необходимое возрастание быстродействия всех уровней файловой подсистемы;

G — необходимое возрастание производительности графической подсистемы.

Проведя выкладки (подробно они даны в Приложении), получим соотношения, отраженные в табл. 1.

Естественное предположение о неизменности времени счета задачи ($T = 1$, что принимается далее) при возрастаниях A и P соответствует тому, что более мощная суперЭВМ нужна для решения более вычислительноемких задач, которые невозможно решить за разумные сроки на старой ЭВМ. Кроме того, указанные в табл. 1 соотношения обеспечивают сохранение достигнутой эффективности счета.

Каждым из указанных соотношений можно пользоваться в зависимости от того, какой класс задач будет превалировать на суперЭВМ. Случаи $k = 1$ и $k = 2$ дают крайние значения в этих

Таблица 1

Параметры ЭВМ в зависимости от увеличения производительности и числа вычислительных узлов

Параметр	$k = 1$	$k = 4/3$	$k = 5/3$	$k = 2$
$b = \frac{p^{1-1/(3k)} n^{1/3-1/(3k)}}{T^{1/(3k)}}$	$\frac{p^{2/3}}{T^{1/3}}$	$\frac{p^{3/4} n^{1/12}}{T^{1/4}}$	$\frac{p^{4/5} n^{2/15}}{T^{1/5}}$	$\frac{p^{5/6} n^{1/6}}{T^{1/6}}$
$B = \frac{p^{1-1/(3k)} n^{4/3-1/(3k)}}{T^{1/(3k)}}$	$\frac{p^{2/3} n}{T^{1/3}}$	$\frac{p^{3/4} n^{5/4}}{T^{1/4}}$	$\frac{p^{4/5} n^{17/15}}{T^{1/5}}$	$\frac{p^{5/6} n^{7/6}}{T^{1/6}}$
$S = (TP)^{1/k}$	TP	$(TP)^{3/4}$	$(TP)^{3/5}$	$(TP)^{1/2}$
$V = (TP)^{1/k}$	TP	$(TP)^{3/4}$	$(TP)^{3/5}$	$(TP)^{1/2}$
$G = (TP)^{1/k}$	TP	$(TP)^{3/4}$	$(TP)^{3/5}$	$(TP)^{1/2}$

²Предполагаем, что коммуникационная система новой ЭВМ обеспечивает такое же отношение реальной пропускной способности к пиковой, как на старой ЭВМ.

неравенствах. Тем не менее ряд задач может удовлетворять этим условиям. Например, $k = 1$ при увеличении числа ячеек одновременно с увеличением размеров расчетной области; $k = 2$ при кубической зависимости шага по времени от шага регулярной сетки. Эти случаи отбрасываем, не считая характерными для общей массы задач.

Тогда следует придерживаться следующего "коридора" значений характеристик при переходе от старой ЭВМ к новой:

$n^{1/12}p^{3/4} < b < n^{2/15}p^{4/5}$ и наиболее надежные $b = n^{2/15}p^{4/5}$ и $B = n^{1/3}P^{4/5}$;

$P^{3/5} < V < P^{3/4}$ и наиболее надежное $V = P^{3/4}$;

$P^{3/5} < G < P^{3/4}$ и наиболее надежное $G = P^{3/4}$;

$P^{3/5} < S < P^{3/4}$ и наиболее надежное $S = P^{3/4}$;

$s \geq p$ (скорость выполнения ряда алгоритмов ограничивается быстродействием памяти).

Прокомментируем соотношения, которые представляются авторам наиболее надежными. Формально они соответствуют наиболее сильному условию (максимизирующему параметр) в указанном диапазоне. Равенство $b = n^{2/15}p^{4/5}$ формально соответствует соотношению $A = D^{5/3}$, которое (не говоря уже о большей степени $A = D^2$) из-за "дороговизны" вряд ли можно ожидать от методов и прикладных программ, предназначенных для суперЭВМ эксафлопсного класса. Можно было бы придерживаться соотношения $A = D^{4/3}$, к которому приводят некоторые методики счета. Однако здесь не учтен ряд факторов, несколько усиливающих коммуникационный поток, как то: коллективные операции с небольшим объемом данных, обмен данными по ребрам и вершинам ячеек параобластей, многократный обмен данными граничных ячеек на одном шаге по времени в итерационных решателях СЛАУ и обмен данными (не только граничными) параобластей при построении некоторых предобусловливателей, обмен данными при вычислительной балансировке и др. Поэтому для надежности прогноза поднимаем коммуникационные требования до уровня $A = D^{5/3}$.

С другой стороны, для требуемого быстродействия и объема периферийных систем не следует ориентироваться на снижающее параметр соотношение $A = D^{5/3}$ ввиду "аддитивных" добавок. Например, распределенная по вычислительным узлам оперативная память должна содержать в каждом узле данные системы управления и буфера обмена информации, объем которых не уменьшится на новой ЭВМ; наряду с

большими задачами на новой суперЭВМ будут считаться задачи класса старой ЭВМ с таким же объемом памяти, число которых, как правило, не уменьшается; с увеличением числа вычислительных узлов снижается надежность, вызывающая повышение нагрузки на файловую систему для записи контрольных точек; также она повышается из-за увеличения количества записей для более детального исследования процесса в характерных точках. Поэтому для надежности прогноза поднимаем требования к объемам памяти до уровня $A = D^{4/3}$.

Сделаем некоторые пояснения и выводы.

1. Отношения возрастаний объема памяти, производительности файловой и графической подсистем к возрастанию производительности ЭВМ с увеличением производительности ЭВМ уменьшаются (при $P > 1$ получаем $S/P < 1$, $V/P < 1$, $G/P < 1$).

2. Отношение B/P возрастания пропускной способности коммуникационной системы ЭВМ к увеличению производительности ЭВМ, а также отношение b/p возрастания пропускной способности коммуникационного интерфейса вычислительного узла к увеличению производительности узла возрастают при увеличении числа узлов без повышения их производительности (при $p = 1$, $n > 1$ и $k = 5/3$ получаем $B/P = b/p = n^{2/15} > 1$).

При возрастании производительности ЭВМ за счет возрастания производительности узлов и неизменном их количестве эти отношения уменьшаются (при $p > 1$, $n = 1$ и $k = 5/3$ получаем $B/P = b/p = p^{-1/5} < 1$).

В общем случае

$$B/P = b/p = p^{-1/(3k)}n^{1/3-1/(3k)},$$

$$\text{и } B/P = b/p = 1 \text{ при } p = n^{k-1}.$$

Для $k = 5/3$ получаем

$$B/P = b/p = (n/p^{3/2})^{2/15},$$

$$\text{и } B/P = b/p = 1 \text{ при } n = p^{3/2}.$$

Если алгоритм распараллеливания требует обмена данными всей параобласти (что не свойственно геометрической декомпозиции), а не только относящимися к границе, то нужно брать $b = p$. Не менее сильное соотношение требуется в случае ускорения счета в P раз задач класса старой ЭВМ, основанных на геометрической декомпозиции ($b = pn^{1/3}$). Является ли актуальным счет таких задач на всей суперЭВМ эксафлопсного класса и в каком объеме — вопрос открытый. Можем только сказать, что рассмотренные более слабые зависимости пригодны для прогнозирования параметров ЭВМ, ориентиро-

ванной на массовый счет широкого класса актуальных задач, требующих экзафлопсной производительности.

Предлагаемые зависимости b и B на самом деле не такие уж слабые, и их достижение требует больших усилий.

Во-первых, для массы задач достаточна более слабая зависимость.

Во-вторых, если коммуникационные требования обеспечивают эффективный счет задачи на всем вычислительном поле ЭВМ, то они обеспечат не менее эффективный счет более мелких задач на части ЭВМ. Например, проведение одного и того же числа расчетов задач класса старой ЭВМ на новой ЭВМ, имеющей в p раз меньше узлов, будет более эффективным, чем на старой ЭВМ³. Вычислительно менее сложная задача (на более грубой сетке) на пропорционально меньшем ресурсе считается быстрее⁴.

В-третьих, десятилетнее движение от терафлопса к петафлопсу (увеличение производительности суперЭВМ в 1000 раз) дало ускорение двухпроцессорных узлов приблизительно в 100 раз и рост пропускной способности их коммуникационного интерфейса примерно в 40–50 раз. Согласно формулам предстоящее ускорение в 100 раз вычислительных узлов и в 1000 раз всей ЭВМ требует не меньшего ускорения коммуникации ($b = 50$).

Отметим, что рассматривается именно внешний интерфейс узлов. Если узел — *составной*, т. е. состоит из m связанных внутренней сетью узлов с суммарным возрастанием их производительности $p_0 = pm$ и суммарным возрастанием пропускной способности их коммуникационного интерфейса $b_m = bm$, и как целое имеет внешний интерфейс с другими такими же составными узлами, то возрастание пропускной способности внешнего интерфейса b_0 составного узла связано с b_m , как

$$b_0 = b_m^{2/3},$$

если данные составных параобластей располагать строго компактно на составных узлах. Отметим, что это не зависит от k в формуле $A =$

³Объемы данных параобластей возрастут в p раз, их границ — в $p^{2/3}$, а скорость обмена — более чем в $p^{4/5}$ раз при $n > 1$.

⁴При уменьшении в 8 раз сетки задачи (в 16 раз — вычислений) и в 16 раз — числа вычислительных узлов время вычислений на временном шаге возрастает в 2 раза, а время обмена — только в $2^{2/3}$ раза.

$= D^k$, что следует из $P = \text{const}$ в формуле

$$b = p^{2/3} P^{1-1/3k}, \quad (1)$$

которая получается при исключении n из формулы для b в табл. 1.

Это дает основание для разработки иерархической структуры коммуникационной системы суперЭВМ, где более крупные вычислители имеют меньшую удельную (относительно производительности) пропускную способность, чем более мелкие вычислители.

Конечно, лучше, если коммуникационная сеть будет иметь большую пропускную способность, чем по формулам. Но ввиду неполного распараллеливания вычислений, дисбаланса вычислений в реальных задачах повышение скорости сверх достаточной не всегда оправданно (дороже, сложнее без должной отдачи).

Сравнение с другими прогнозами

Сравним прогноз на основе рассмотренных соотношений с прогнозами характеристик экзафлопсной ЭВМ, сделанными Ж. Донгарра [2] и А. Гейстом [3], путем рассмотрения в качестве старой суперЭВМ вычислительной системы Jaguar, установленной в ANL США.

Как видно из табл. 2, предлагаемые формулы в основном дают значения, попадающие в коридор значений авторов работ [2, 3]. "Выбивается" из него объем внешней памяти, потребность в которой оба автора оценивают ниже, чем авторы данной статьи. Возможно, внешняя память Jaguar реализована "с запасом". Прогноз, предлагаемый в данной статье, наиболее близок прогнозу Донгарра.

Предложение параметров экзафлопсной ЭВМ

Прогноз на 2020 г. — довольно реалистичный срок возможного создания экзафлопсной ЭВМ (рассматриваем вариант 1,3 Эфлопс, чтобы получить 1 Эфлопс на тесте Linpack) — в России вряд ли должен опираться на более чем двукратное увеличение производительности вычислительного узла каждые 2 года. Это приводит в 2020 г. к 15–30 Тфлопс с двойной точностью для *легкого* узла, если с указанным темпом масштабировать производительность самого производного — гибридного варианта узла.

Сравнение предлагаемого прогноза с прогнозами Донгарра и Гейста

Параметр	Jaguar	Прогноз		
		Донгарра	Гейста	предлагаемый
Пиковая производительность ЭВМ	2,34 Пфлопс	1 Эфлопс	1 Эфлопс	1,33 Эфлопс
Объем оперативной памяти ЭВМ	0,3 Пбайт	32–64 Пбайт	10 Пбайт	35 Пбайт
Производительность узла	125 Гфлопс	1,2–15 Тфлопс	1–10 Тфлопс	15 Тфлопс
Быстродействие памяти узла	25 Гбайт/с	2–4 Тбайт/с	0,2–0,4 Тбайт/с	≥ 3 Тбайт/с
Пропускная способность коммуникационного интерфейса узла	3,5 Гбайт/с	200–400 Гбайт/с	50 Гбайт/с*	198 Гбайт/с
Число узлов в ЭВМ	18 700	$\sim 10^5$ – 10^6	$\sim 10^6$	88 887
Объем внешней памяти ЭВМ	15 Пбайт	500–1 000 Пбайт	300 Пбайт	1 750 Пбайт
Быстродействие ввода-вывода ЭВМ	0,2 Тбайт/с	60 Тбайт/с	20 Тбайт/с	24 Тбайт/с

* Возможно, Гейст имел в виду быстродействие одного из шести каналов коммутатора узла, так как указал аналогичный параметр в Jaguar 2009 г. равным 1,5 Гбайт/с.

В настоящее время легкий гибридный узел ($\sim 0,6$ – $1,1$ Тфлопс) — это один универсальный многоядерный микропроцессор и один сопроцессор-ускоритель; легкий универсальный узел ($\sim 0,15$ Тфлопс) — это два универсальных многоядерных микропроцессора.

Надежнее рассчитывать в 2020 г. на максимальную производительность вычислительного узла, достигаемую в 2018 г., — 15 Тфлопс⁵. Это приводит приблизительно к 90 000 узлам, что сопоставимо с самыми большими по числу узлов суперЭВМ настоящего времени — Jaguar (~ 19 000) и Blue Gene (~ 70 000), и значит, конструкция такой сложности вполне реализуема.

На основании этих выводов, выведенных формул, опыта разработки и эксплуатации ЭВМ, проведения расчетов и с учетом мнения ряда зарубежных специалистов можно дать следующие ориентиры для параметров подсистем отечественной эксафлопсной ЭВМ:

- быстродействие оперативной памяти узла ~ 2 – 4 Тбайт/с;
- пропускная способность коммуникационного интерфейса узла ~ 100 – 400 Гбайт/с⁶;
- объем оперативной памяти ЭВМ ~ 30 Пбайт, узла ~ 350 – 700 Гбайт;

⁵ По прогнозам [4, 5] производительность вычислительного узла в 2018 г. составит 10 Тфлопс.

⁶ 400 Гбайт/с, вероятно, "покрывает" весь мыслимый набор приложений эксакласса 2020 г.

- объем параллельной файловой системы ~ 600 Пбайт;
- объем системы долговременного хранения не более 5 000 Пбайт;
- производительность графической подсистемы ~ 2 Пфлопс.

Указанные значения представляются доступными технически и достаточными для эффективного счета больших задач — примерно с 10^{12} – 10^{13} ячеек сетки и несколькими килобайтами данных для каждой ячейки. По-видимому, число ячеек порядка $O(10^6)$ на одном узле будет являться нижним пределом для эффективного распараллеливания на всем множестве узлов.

Создание эксафлопсной ЭВМ из *тяжелых* вычислительных узлов, например составных узлов, содержащих 16 универсальных микропроцессоров и их сопроцессоров-ускорителей, объединенных внутренней сетью, позволяет поднять производительность узла до ~ 250 Тфлопс. Это приводит к следующим изменениям:

- число узлов ~ 5 000;
- быстродействие оперативной памяти ~ 40 Тбайт/с;
- пропускная способность коммуникационного интерфейса узла $\sim 0,75$ – 1 – 3 Тбайт/с;
- объем памяти узла 6 Тбайт.

Полезное свойство *укрупнения* узлов связано со снижением пропускной способности коммуникационного интерфейса узла относительно еди-

ницы производительности вычислительного узла и снижением объема оборудования коммуникационной сети. Например, при повышении производительности узла в 16 раз пропускную способность интерфейса достаточно поднять в 6,34 раза (согласно формуле (1)).

Однако вариант создания суперЭВМ из тяжелых узлов приводит не к решению проблемы, а к ее переформулировке, и как ее решать проще — сейчас окончательно не ясно. По-видимому, более целесообразно снижать требования на элементы суперЭВМ за счет повышения ее сложности, чем наоборот.

Кроме того, такой вариант суперЭВМ до сих пор приводил к их удорожанию, после 2005 г. такие суперЭВМ с рекордной производительностью не строились. Одна из последних суперЭВМ на тяжелых узлах ASCII White (100 Тфлопс) стоила ~200 млн долларов. Это обусловлено повышением стоимости разработки таких вычислительных узлов (серверов) и меньшей востребованностью их на рынке (штучный товар).

Заключение

Рассмотренные ориентировочные оценки для параметров суперЭВМ экзафлопсного класса не претендуют на завершенность, и хотелось бы надеяться на отклик в виде их анализа на базе иных моделей вычислений экзафлопсного класса. Это способно привести к уточнению параметров суперЭВМ или их разнообразию благодаря ориентации на разные классы алгоритмов.

Приложение. Вывод формул подобия

Поясним подробнее вывод формул, приведенных в табл. 1.

В основе приводимых здесь рассуждений лежит предположение, что на узле (вычислительном сервере с большим числом процессоров на общей памяти) рассчитывается связный кусок задачи, так что все межузловые обмены информацией можно рассматривать, не вникая в особенности алгоритмов распараллеливания (на общей памяти) внутри узла. Узел рассматривается как независимый вычислитель. Коммуникационная сеть взаимодействует с узлом только как с неделимой единицей и тем самым обеспечивает обмен информацией между узлами.

Рассматривается явный алгоритм, типичный для нестационарных задач трехмерной газовой

динамики, в предположении, что используется метод геометрической декомпозиции с нарезкой на подобласти (параобласти) с топологией соседства типа трехмерной решетки (если пренебрегать взаимодействием по ребрам и вершинам ячеек — потоки информации в диагональных направлениях через ребра и вершины считаем пренебрежимо малыми по сравнению с потоками информации через грани ячеек).

Введем обозначения, описывающие параметры трехмерной задачи:

N — полное число точек сетки в задаче;

N_1, N_2 — полные числа точек в трехмерной задаче для старой и новой ЭВМ соответственно;

N_{par} — полное число точек сетки в параобласти, рассчитываемой на одном узле (сервере);

n_1, n_2 — полные числа узлов для старой и новой ЭВМ соответственно;

$n = n_2/n_1$ — увеличение числа узлов (серверов);

p — возрастание производительности одного узла (сервера);

$P = np$ — возрастание полной производительности ЭВМ;

$C = N^k$ ($k = 4/3, 5/3, 2$) — условная стоимость трехмерного расчета (число арифметических операций с точностью до коэффициента пропорциональности равно произведению числа точек сетки N на число шагов по времени; число шагов по времени прямо пропорционально $N^{1/3}$ для кубической сетки, $N^{2/3}$ для полистовой сетки с квадратной сеткой в листах и $N^{3/3} = N$ для сетки сферического типа)⁷;

$T = \frac{C_2/P_2}{C_1/P_1} = \frac{(N_2/N_1)^k}{P_2/P_1} = \frac{(N_2/N_1)^k}{P}$ — возрастание астрономического времени на расчет.

Отсюда получаем:

$D = N_2/N_1 = (TP)^{1/k} = (Tnp)^{1/k}$ — увеличение полного числа точек сетки в трехмерной задаче, или объема данных;

$A = C_2/C_1 = (N_2/N_1)^k = D^k$ — возрастание количества вычислений на расчет;

$\frac{N_{par(2)}}{N_{par(1)}} = \frac{N_2/n_2}{N_1/n_1}$ — увеличение числа точек сетки трехмерной задачи на одном узле.

Отсюда

⁷Такие зависимости связаны с тем, что в явных схемах обычно шаг по времени прямо пропорционален минимальному геометрическому размеру ячейки сетки и в случае полистовой сетки и сферической сетки вблизи центра и оси симметрии зависит дополнительно от угла между листами и между сферическими столбцами соответственно.

$$\frac{N_{par(2)}}{N_{par(1)}} = \frac{N_2/n_2}{N_1/n_1} = \frac{N_2/N_1}{n} = \frac{(Tnp)^{1/k}}{n} =$$

$$= \frac{(Tp)^{1/k}}{n^{1-1/k}} - \text{увеличение полного числа точек}$$
 сетки трехмерной задачи в одной параобласти (на одном узле);

$$\left(\frac{N_{par(2)}}{N_{par(1)}}\right)^{2/3} = \left[\frac{(Tp)^{1/k}}{n^{1-1/k}}\right]^{2/3} = \frac{(Tp)^{2/(3k)}}{n^{2/3-2/(3k)}} -$$
 увеличение площади поверхности параобласти, т. е. количества информации, пересылаемой на одном шаге по времени от одного узла к другому;

$N_t = C/N = N^{k-1}$ — полное число шагов по времени в одном трехмерном расчете;

$t = N_{t2}/N_{t1} = (N_2/N_1)^{k-1} = [(Tnp)^{1/k}]^{k-1} =$
 $= (Tnp)^{1-1/k} - \text{увеличение полного числа шагов}$
 по времени в одном трехмерном расчете;

$$\left(\frac{N_{par(2)}}{N_{par(1)}}\right)^{2/3} t = \frac{(Tp)^{2/(3k)}}{n^{2/3-2/(3k)}} (Tp)^{1-1/k} n^{1-1/k} =$$
 $= (Tp)^{1-1/(3k)} n^{1/3-1/(3k)} - \text{увеличение количества}$
 информации, пересылаемой от одного узла к другому за все время проведения одного трехмерного расчета;

b_1, b_2 — пропускные способности межузловых каналов связи для старой и новой ЭВМ соответственно;

$b = b_2/b_1$ — возрастание пропускной способности каналов связи между узлами (внешнего коммуникационного интерфейса узлов).

Исходим из предположения, что при переходе к новой ЭВМ количество узлов, с которыми обменивается информацией данный узел, не меняется (это некоторая постоянная, равная числу геометрических соседей). Поэтому потери времени на межузловые обмены за все время счета одной трехмерной задачи возрастают в следующее число раз:

$$\frac{(N_{par(2)}/N_{par(1)})^{2/3} t}{b} = \frac{(Tp)^{1-1/(3k)} n^{1/3-1/(3k)}}{b}.$$

Потребуем, чтобы возрастание полного времени на межузловые обмены было равно возрастанию астрономического времени на полный счет задачи, т. е. T . Это требование можно назвать гипотезой о том, что новая ЭВМ так же самосогласованна, как и старая. Из него получаем уравнение

$$\frac{(N_{par(2)}/N_{par(1)})^{2/3} t}{b} = \frac{(Tp)^{1-1/(3k)} n^{1/3-1/(3k)}}{b} = T,$$

откуда следует оценка

$$(Tp)^{1-1/(3k)} n^{1/3-1/(3k)} = Tb,$$

или

$$b = \frac{p^{1-1/(3k)} n^{1/3-1/(3k)}}{T^{1/(3k)}}.$$

Пусть B_1, B_2 — пропускные способности коммуникационных сетей старой и новой ЭВМ соответственно; L_1, L_2 — полное число одновременно действующих каналов связи коммуникационных сетей старой и новой ЭВМ соответственно. Полагаем, что полная пропускная способность коммутационной сети равна произведению пропускной способности одного канала связи на полное число одновременно действующих каналов, т. е.

$$B_j = b_j L_j, \quad j = 1, 2.$$

Поэтому $B = B_2/B_1 = (b_2/b_1)(L_2/L_1) =$
 $= b(L_2/L_1) - \text{возрастание пропускной способности}$
 коммутационной сети в целом.

Для трехмерной задачи газовой динамики с геометрической декомпозицией в виде трехмерной решетки одновременно на одном шаге по времени задействованы каналы связи, соответствующие трехмерной решетке⁸. Количество таких каналов равно (с точностью до множителя, одинакового для старой и новой ЭВМ)

$$L_j = n_j, \quad j = 1, 2.$$

Поэтому

$$B = \frac{B_2}{B_1} = b \left(\frac{L_2}{L_1}\right) = b \left(\frac{n_2}{n_1}\right) =$$

$$= bn = \frac{p^{1-1/(3k)} n^{4/3-1/(3k)}}{T^{1/(3k)}}.$$

Пусть V — увеличение памяти всех уровней. Расходуемая память прямо пропорциональна полному числу точек сетки в задаче, независимо от увеличения числа шагов по времени. Поэтому

$$V = \frac{N_2}{N_1} = (Tnp)^{1/k} = (TP)^{1/k}.$$

Список литературы

1. Софронов И. Д. Оценка параметров вычислительной машины, предназначенной для решения задач механики сплошной среды // Числ. методы мех. спл. среды. 1975. Т. 6, № 3. С. 98—147.

⁸Это не надо понимать как топологию коммутационной сети, эта топология может быть любой, хоть *каждый с каждым*, но реально во время счета шага по времени используются только каналы, обеспечивающие трехмерную решетку или ее усложнение с учетом диагоналей.

2. *Dongarra J.* Architecture-aware algorithms for scalable performance and resilience on heterogeneous architectures // ASCAC Meeting. American Geophysical Union (AGU). Washington. August 24–25, 2010. <http://www.sc.doe.gov/ascr/ASCAC/Meetings/Aug10/Dongarra.pdf>.
3. *Geist A.* Paving the roadmap to exascale // SciDAC Review. Special Issue. 2010. P. 52–59. <http://www.scidacreview.org/1001/index.htm>.
4. *Местер Н. С.* Intel — путь к экзафлопсу // ПАВТ-2011. Москва, МГУ им. М. В. Ломоносова. Март 2011 г. <http://agora.parallel.ru/pavt2011>.
5. *Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. и др.* Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41–50.

Статья поступила в редакцию 20.02.12.

УДК 519.6

МЕТОДЫ МЕЛКОЗЕРНИСТОГО РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ В МЕТОДИКЕ ТИМ-2D

А. А. Воропинов, И. Г. Новиков, С. С. Соколов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Рассматриваются методы мелкозернистого распараллеливания, применяемые в методике ТИМ-2D. Мелкозернистое распараллеливание осуществляется в модели распределенной памяти с использованием интерфейса MPI. При этом применяются два подхода: 1) с наложением параобластей в один слой ячеек; 2) без наложения параобластей с расчетом взаимодействия между ними. Приводится сравнение методов по эффективности распараллеливания на одном из тестовых расчетов.

Ключевые слова: методика ТИМ-2D, распараллеливание в модели распределенной памяти, интерфейс MPI, неструктурированные сетки.

Введение

Методика ТИМ-2D [1] предназначена для решения нестационарных задач механики сплошной среды на неструктурированных многоугольных лагранжевых сетках произвольного вида. Ячейки сетки представляют собой несамопересекающиеся многоугольники произвольной конфигурации, в узлах сетки может сходиться произвольное количество ребер.

Для методики ТИМ-2D используется трехуровневое распараллеливание [2]. На первом уровне осуществляется распараллеливание счета по математическим областям. На втором уровне распараллеливается счет внутри математической области по параобластям (математическая область разбивается на фрагменты). На этих двух уровнях используется модель распределенной памяти и интерфейс передачи сообщений MPI. На третьем уровне осуществляется распараллеливание итераций счетных циклов внутри параобластей в модели общей памяти с использованием интерфейса OpenMP. При расчете одной задачи эти подходы могут использоваться как вместе в различных сочетаниях, так и раздельно.

Ранее для методики ТИМ-2D реализовано распараллеливание в модели общей памяти [3] и распараллеливание по областям [4]. Деление на математические области в методике производится исходя из начальных данных, таких как пара-

метры геометрии и распределения веществ. При этом не преследуется цель достижения высокой эффективности распараллеливания. В разных областях может быть задано различное количество точек (иногда отличие может достигать нескольких порядков), используются разные вещества и приближения. Это приводит к тому, что, во-первых, на реальных задачах эффективность оказывается не слишком высокой, во-вторых, использовать такое распараллеливание удается для небольшого количества процессоров. Дополнительное распараллеливание в модели общей памяти позволяет увеличить количество задействованных процессоров почти на порядок. Тем не менее в реальных расчетах удается использовать не более нескольких десятков процессоров. Все это показывает, что такого распараллеливания недостаточно, поэтому необходима реализация мелкозернистого распараллеливания.

В статье рассматриваются алгоритмы мелкозернистого распараллеливания (второй уровень).

Декомпозиция данных

Эффективное использование счетных программ методик на *параллельных* машинах требует выполнения декомпозиции таким образом, чтобы ядра вычислительной системы были за-

гружены равномерно, а взаимодействия между ними были минимальны. В модели распределенной памяти задача декомпозиции состоит в распределении данных между процессами (декомпозиция данных) таким образом, чтобы количество и объем обменов между ними были минимальны. В методике ТИМ-2D для распараллеливания в модели распределенной памяти используется декомпозиция по пространству.

Принципы декомпозиции для мелкозернистого распараллеливания следующие:

- декомпозиция осуществляется по ячейкам (ячейка — основной счетный элемент сетки в методике ТИМ-2D);
- все ячейки области распределяются по *компактам*,* при этом каждая ячейка принадлежит одному и только одному компакту;
- каждая математическая область разбивается на компакты независимо от других.

Задача декомпозиции для мелкозернистого распараллеливания сводится к решению задачи о разрезании графа на подграфы. При этом используется следующий алгоритм:

1. На основе неструктурированной сетки строится граф, отображающий ее структуру. При этом ячейкам сетки соответствуют вершины графа, а соседству между ячейками — ребра графа.
2. Вершинам графа присваивается вес, отражающий вычислительную нагрузку, связанную с соответствующей ячейкой. Веса ребер графа используются для вытягивания компактов вдоль границ с целью придания декомпозиции дополнительного свойства — уменьшения количества обменов при расчете контактного взаимодействия.
3. Непосредственно задача о разрезании графа на подграфы решается при помощи алгоритмов библиотек ParMeTiS или SCOTCH [5–7].

Для задач, состоящих из нескольких математических областей, используется алгоритм двухпроходной декомпозиции. На первом проходе каждая область разбивается независимо от других на большое количество компактов. На втором проходе строится макрограф, вершинами

* Распределение по компактам является дополнительной информацией, на основе которой в дальнейшем производится формирование параобластей для исходной области.

которого являются компакты первого прохода и границы между областями. Ребра макрографа отражают соседство между компактами первого прохода и соседство с границами области. Для макрографа решается задача о разрезании на подграфы, и в результате получается распределение ячеек на требуемое количество компактов.

Подробное описание алгоритмов декомпозиции для методики ТИМ-2D приведено в работе [8].

Методы мелкозернистого распараллеливания

В методике ТИМ-2D расчет газодинамических величин разделен на два основных этапа, на которых соответственно рассчитываются:

- 1) *узловые величины* — скорости, координаты (расчет уравнения движения). При расчете узловых величин (для краткости — узлов) используется информация из соседних узлов и окружающих ячеек с предыдущего момента времени;
- 2) *ячеечные величины* — плотность, давление, энергия (расчет уравнения энергии). При этом используется информация о новом положении узлов рассматриваемых ячеек.

Основной вопрос, который возникает при мелкозернистом распараллеливании — это способ расчета узлов сетки, которые окружают ячейки, отнесенные к разным компактам (*параграничные узлы*).

Рассмотрим фрагмент сетки, представленный на рис. 1, где ячейки белого цвета отнесены к компакту 1, серого цвета — к компакту 2.

В соответствии с разностной схемой методики [1] для расчета узла строится замкнутый контур интегрирования, проходящий через центры

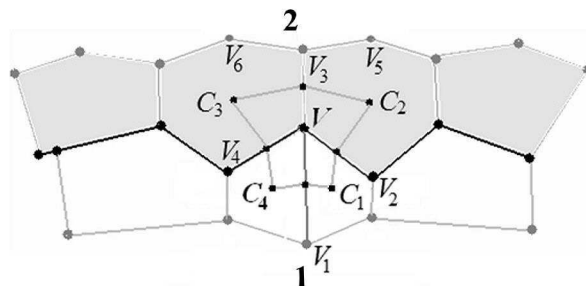


Рис. 1. Фрагмент сетки с разделением на компакты и с контуром интегрирования для узла

ячеек и *центры ребер* (центр ребра в цилиндрическом случае — точка, которая делит поверхность, образуемую вращением ребра вокруг оси симметрии, на две равные части; в плоском случае — это середина ребра). В контур интегрирования для узла V на рис. 1 включаются центры окружающих ячеек C_1, C_2, C_3, C_4 и центры ребер VV_1, VV_2, VV_3, VV_4 . Соответственно при расчете узла V используются величины, определенные в ячейках C_1, C_2, C_3, C_4 и узлах V, V_1, V_2, V_3, V_4 .

Если сохранять контур интегрирования для параграничного узла неизменным, то получается первый тип мелкозернистого распараллеливания — с наложением параобластей в один слой ячеек. При этом параобласть формируется из ячеек соответствующего компакта с добавлением прилегающего слоя ячеек из соседних компактов. Так, при формировании параобласти 1 (см. рис. 1) к компакт 1 добавляются ячейки серого цвета; аналогично, в параобласть 2 входят ячейки белого цвета. Для сохранения контура интегрирования со стороны первой параобласти не требуется полного формирования ячеек C_2, C_3 , т. е. не нужна информация об узлах V_5, V_6 . Однако если эти узлы не присоединять к первой параобласти, то сетка будет получаться не полной, нельзя будет выполнять некоторые операции с ячейками C_2, C_3 . В этом случае присоединенные ячейки придется особым образом описывать в структуре данных и учитывать в различных счетных алгоритмах. Поскольку одним из базовых принципов является максимальная прозрачность распараллеливания для счетных алгоритмов, то было решено включать в параобласти все узлы присоединенных ячеек (будем называть их также присоединенными). Таким образом, для параобласти 1 присоединенными являются узлы V_3, V_5, V_6 .

Совокупность ячеек, ребер и узлов слоя наложения двух соседних параобластей будем называть их *параллельной границей*.

Другой возможный вариант — представить контур интегрирования как совокупность замкнутых контуров со стороны каждой из ячеек (такой способ используется в разностной схеме для определения массы узла). Аналогично, можно представить контур интегрирования как совокупность замкнутых контуров со стороны каждой параобласти. Такой вариант показан на рис. 2 (см. также цветную вкладку); линия раздела контура интегрирования выделена (красным цветом). При разделении контура интегри-

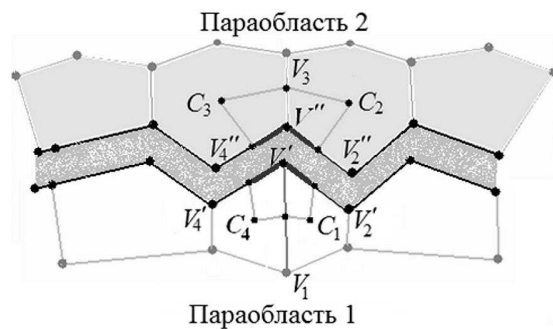


Рис. 2. Разрыв контура интегрирования для узла при мелкозернистом распараллеливании без наложения

рования каждый узел вдоль линии между параобластями разделяется на два (или на большее число узлов — по количеству параобластей, сходящихся в этом узле), например, узел V — на V' и V'' . Для каждого из узлов используется свой контур интегрирования для определения массы и ускорения — полученные значения в совокупности необходимы для расчета единой скорости.

Такое разделение контура интегрирования при расчете позволяет не использовать наложение между параобластями. Подобная схема используется при расчете контактной границы (КГ) *без скольжения*. Данная КГ в этом случае является и параллельной границей. Для мелкозернистого распараллеливания был использован программный блок расчета КГ [9] с небольшими доработками.

Формирование параобластей

При выполнении декомпозиции для каждой математической области формируется свое распределение ячеек по компактам. В результате декомпозиции создается целочисленный массив с числом элементов, равным количеству ячеек математической области. Значением элемента массива для соответствующей ячейки является номер компакта, к которому она относится. На основе этой информации формируются параобласти, т. е. происходит распределение ячеек, ребер и узлов по параобластям, введение новой нумерации элементов сетки в параобласти, подготовка информации для выполнения обменов. Параобласть, в отличие от компакта, предназначена для выполнения расчетных алгоритмов.

Формирование параобластей является головным процессом для математической области. Этот процесс выполняется в четыре основных

этапа. Первый этап — формирование структуры параобластей в рамках исходной математической области — затрагивает нумерацию элементов сетки, используемую в математической области. Вторым этапом — формирование параллельных границ между параобластями — также выполняется на уровне нумерации элементов математической области. На третьем этапе производится переход от глобальной нумерации к локальной нумерации в параобластях и соответствующих параллельных границах. На этом этапе производится непосредственное формирование параобластей. На последнем, четвертом этапе сформированные параобласти передаются процессам, которые будут их рассчитывать, где они сохраняются как обычные математические области с некоторой дополнительной информацией. При этом области присваивается сквозной номер в задаче, т. е. на разных процессах не может быть области (или параобласти) с одним и тем же номером.

Пример построения параобластей на примере сетки смешанного типа, изображенной на рис. 3, показан на рис. 4, 5. Здесь указаны номера ячеек, номера узлов и номера ребер. Жирными линиями выделен слой ячеек для режима мелкозернистого распараллеливания с наложением параобластей, пунктирными линиями — ребра, разделяющие ячейки из разных компактов. К первому компакту относятся ячейки с номерами от 1 до 9, ко второму — от 10 до 19. В результате построения получаются две параобласти: в режиме распараллеливания с наложением — такие, как на рис. 4, без наложения — как на рис. 5.

На рис. 4, 5 указана локальная нумерация ячеек и узлов рассматриваемых параобластей.

Алгоритмы мелкозернистого распараллеливания с наложением параобластей

Первый метод мелкозернистого распараллеливания основан на сохранении контуров интегрирования для параграничных узлов. В результате возникает необходимость наложения между параобластями в один слой ячеек. При этом параграничные узлы могут рассчитываться любым из процессов, рассчитывающих окружающие параобласти.

Расчет узлов является относительно дешевой операцией в методике ТИМ-2D, поэтому для дополнительного контроля расчет параграничных узлов дублируется. Вторым важным моментом — обновление информации для присоединенных элементов сетки (ячеек и узлов). Это обновление производится путем асинхронных обменов информацией для параграничных, приграничных и присоединенных элементов. Вызовы процедур выполнения обменов расположены в программе так, чтобы необходимая информация обновлялась до ее использования.

Блок-схема расчета шага с учетом мелкозернистого распараллеливания с наложением приведена на рис. 6. Серым цветом выделены этапы обращения к процедурам выполнения асинхронных обменов; пунктирными линиями изображены фактические потоки передаваемых данных

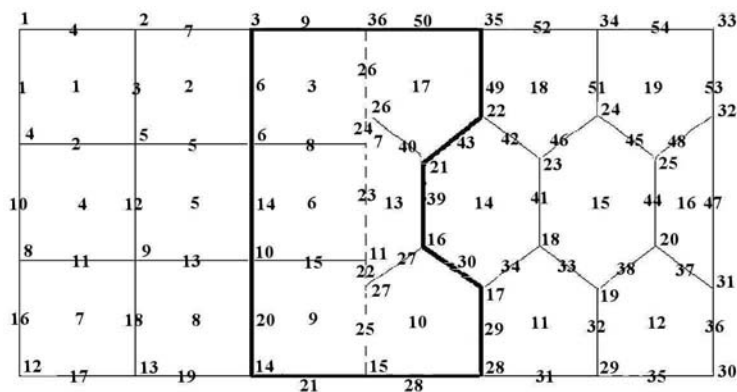


Рис. 3. Пример сетки для построения параобластей

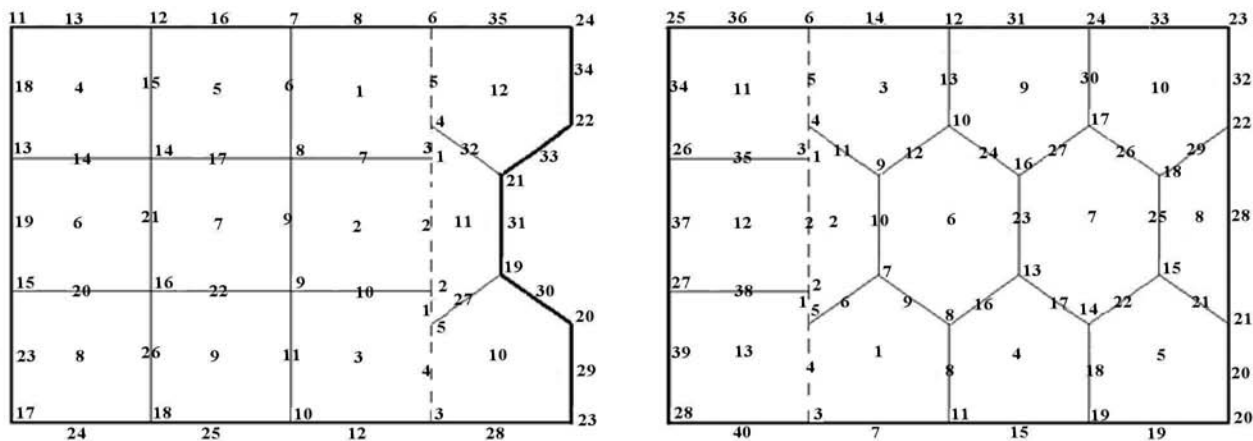


Рис. 4. Параобласти для мелкозернистого распараллеливания с наложением

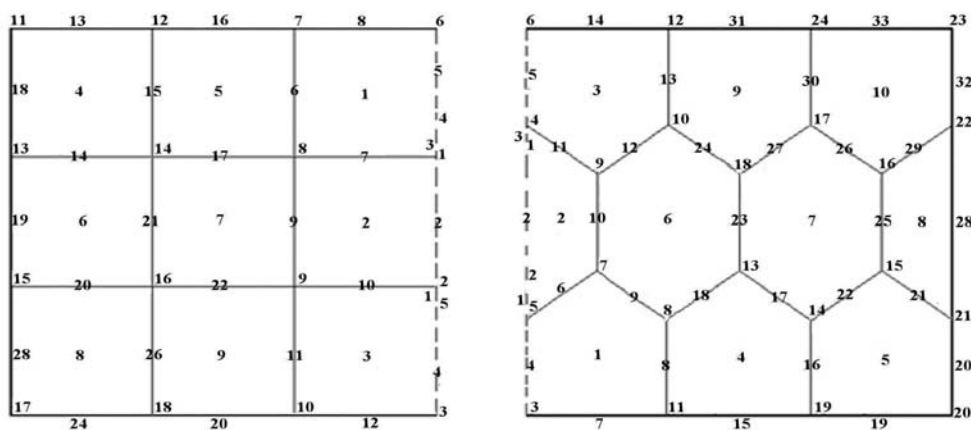


Рис. 5. Параобласти для мелкозернистого распараллеливания без наложения

между процессами. Как видно из блок-схемы, обмены выполняются одновременно с расчетом внутренних ячеек и узлов. При выполнении обменов используются упаковка и распаковка значений величин в буферный массив.

Алгоритмы мелкозернистого распараллеливания без наложения параобластей

Второй метод мелкозернистого распараллеливания основан на разбиении контуров интегрирования параграничных узлов. В результате между параобластями не требуется наложения по ячейкам. При разрыве контура интегрирования в каждой параобласти появляется свой параграничный узел со своим контуром интегрирования. Для восстановления исходного контура интегрирования необходимо их объединение.

В этом алгоритме для каждого из появившихся параграничных узлов должно рассчитываться ускорение, после чего производится обмен рассчитанными ускорениями и массами и расчет единой скорости. Получение единой скорости является относительно дешевой операцией, поэтому для уменьшения количества обменов она дублируется процессами.

Скорость узлов определяется следующим образом. Для узла i_0 (рис. 7)

$$u_{i_0}^{n+1} = u_{i_0}^n + \left((a_x)_{i_0} m_{i_0} + \sum_{\xi=1}^k (a_x)_{l_\xi} dm_{l_\xi} \right) \tau \frac{1}{M_{i_0}};$$

$$v_{i_0}^{n+1} = v_{i_0}^n + \left((a_y)_{i_0} m_{i_0} + \sum_{\xi=1}^k (a_y)_{l_\xi} dm_{l_\xi} \right) \tau \frac{1}{M_{i_0}};$$

$$M_{i_0} = m_{i_0} + \sum_{\xi=1}^k m_{l_\xi},$$

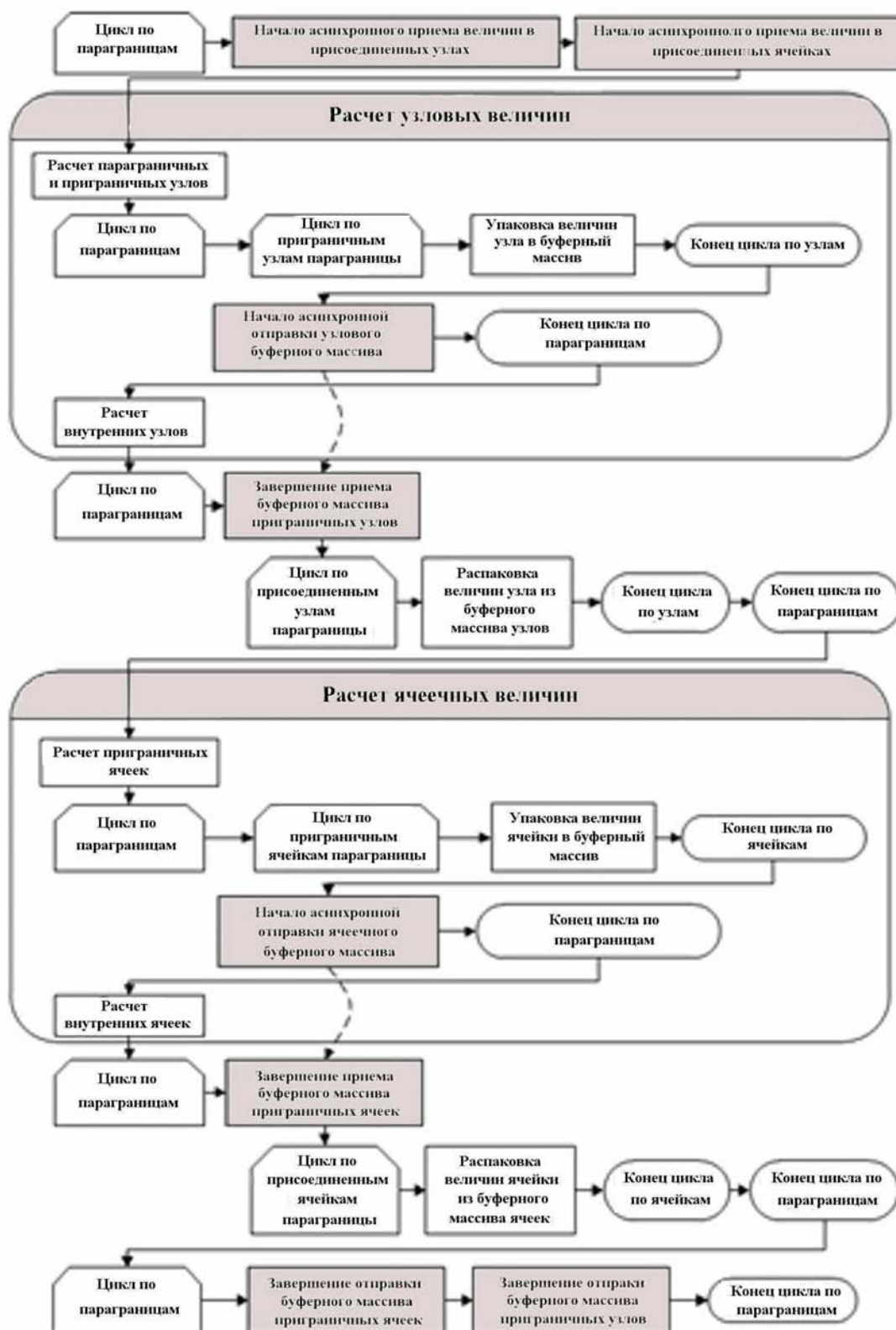


Рис. 6. Блок-схема расчета узловых и ячейочных величин в режиме мелкозернистого распараллеливания с наложением



Рис. 7. Фрагмент контактной границы

где k — количество точек с другой стороны границы, попавших на поверхность, относящуюся к узлу i_0 (в осесимметричном случае она ограничена серединами поверхностей вращения i_0i_1 и i_0i_2 , а в плоском случае — серединами отрезков i_0i_1 и i_0i_2); $(dm)_{i_1}, \dots, (dm)_{i_k}$ — доли масс узлов l_1, \dots, l_k , попавших в окрестность узла i_0 ; a_x, a_y — компоненты векторов ускорений узлов, вычисленные по формуле, согласованной с формулой для внутренних узлов [1, 9], в предположении, что на границе задан нулевой тензор напряжений с каждой из сторон КГ.

После вычисления скорости движения КГ определяется ее положение на новый, $(n + 1)$ -й, момент времени по известным координатам на предыдущий, n -й, момент времени:

$$x_{k_0}^{n+1} = x_{k_0}^n + u_{k_0}^{n+1} \tau; \quad y_{k_0}^{n+1} = y_{k_0}^n + v_{k_0}^{n+1} \tau.$$

Перед описанием алгоритмов расчета контактного взаимодействия в параллельном режиме необходимо определить, каким образом распределяется расчет контуров между процессами. Основной принцип: КГ между двумя областями рассчитывается одним из двух процессов, к которым отнесены области, формирующие эту границу.

Расчет контактного взаимодействия в параллельном режиме производится по следующему алгоритму (распараллеленные шаги отмечены звездочкой):

1. Для каждого контура формируются *свои* стороны (в последовательном режиме все стороны — свои).
- 2.* Производится обмен информацией о сторонах контуров (свои отправляются, чужие принимаются).

Все последующие операции выполняются только для тех контуров, которые рассчитываются текущим процессом.

3. Совмещение сторон контура.
4. Формирование основного и вспомогательного слоя узлов на контуре.

5. Расчет расстояний между соседними точками на контуре.
6. *Посадка* узлов вспомогательного слоя на основной слой.
- 7.* Обмен информацией о сформированных контурах между процессами.
8. Расчет ускорений и скоростей для граничных узлов своих областей.
- 9.* Получение процессом, рассчитывающим контур, информации о чужой стороне контура. (Соответственно эта сторона подготавливается и отправляется процессом, рассчитывающим соседнюю область).
10. Расчет взаимодействия сторон контура. Вычисление новых координат и скоростей точек контура.
- 11.* Пересылка рассчитанного контура.

Заметим, что обмены информацией производятся только для тех контуров, которые разделяют области, рассчитываемые разными процессами. Если разделяемые области рассчитываются одним и тем же процессом, то и контур рассчитывается этим же процессом. Аналогично, внешний контур области задачи (типа *свободная граница* или *жесткая стенка*) рассчитывается процессом, рассчитывающим эту область.

Исследование эффективности распараллеливания

В качестве характеристик эффективности распараллеливания использовались следующие функции: $S_p = t_1/t_p$ — ускорение счета; $E_p = t_1/pt_p \cdot 100\%$ — эффективность распараллеливания, где t_1 — время расчета на одном процессоре используемой *параллельной* машины (последовательный режим), t_p — время счета на p процессорах.

Для исследования эффективности мелкозернистого распараллеливания использовалась задача о плоской волне в однообластной постановке. Размеры области — 1×1 . Все границы области, кроме левой, являются жесткими стенками. Вещество — идеальный газ с параметрами $\gamma = 3$, $\rho_0 = 1$. На левой границе задано постоянное по времени давление $P_{гр} = 5$.

Использовалась сетка диаграммы Вороного из 1 млн ячеек со случайной расстановкой центров. Фрагмент сетки приведен на рис. 8. Виды декомпозиций для различного количества процессов приведены на рис. 9 (см. также цветную вкладку).

В табл. 1, 2 приведены значения ускорения и эффективности распараллеливания. Расчеты проводились в модели смешанной памяти. За единицу принят счет на одном узле с использованием OpenMP-распараллеливания. Сравнение эффективности режимов мелкозернистого распараллеливания приведено на рис. 10.

Как видно из представленных результатов, методы дают близкую эффективность распараллеливания. Однако при мелкозернистом распараллеливании без наложения параобластей пока нет совмещения обменов и вычислений. Можно ожидать, что при реализации такого совмещения для этого метода будет достигаться более высо-

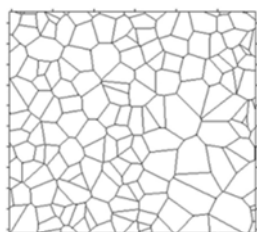


Рис. 8. Фрагмент сетки диаграммы Вороного

Таблица 1

Характеристики эффективности мелкозернистого распараллеливания с наложением параобластей

Кол-во ядер (MPI×OpenMP)	S_p	$E_p, \%$
8(1×8)	1	100
64(8×8)	6,8	85
80(10×8)	8,26	82
128(16×8)	11,5	72
256(32×8)	18,7	58
400(50×8)	24,5	49

Таблица 2

Характеристики эффективности мелкозернистого распараллеливания без наложения параобластей

Кол-во ядер (MPI×OpenMP)	S_p	$E_p, \%$
8(1×8)	1	100
64(8×8)	6,9	86
80(10×8)	8,4	84
128(16×8)	12,3	77
256(32×8)	17,5	54
400(50×8)	22,1	44

кая эффективность распараллеливания за счет меньшего объема передаваемой информации.

Тестовый расчет

Для тестирования смешанных режимов распараллеливания была выбрана задача о полете несферической оболочки [10]. Начальная геометрия задачи представлена на рис. 11. Начальная форма оболочки: $R(t=0, \theta) = 7 + 0,875 \cos^3 \theta - 0,525 \cos \theta$; толщина $\Delta R = 0,16$. Материал — свинец: $\rho_0 = 11,4$. Оболочка имеет скорость, направленную к центру: $v = 5\,706\,860$. Давление на наружной поверхности оболочки $P_e = 0$; давление на внутренней поверхности зависит от времени: $P_i = 3,495 \cdot 10^6 (V(t))^{-5/3}$, где $V(t)$ — объем внутренней части полости.

Результаты расчетов приведены на рис. 12, 13 (см. также цветную вкладку). Во всех расчетах получено полное совпадение результатов. Сравнение формы оболочки, полученной при расчетах в последовательном и параллельном режимах, показано на рис. 12.

Заключение

В статье дано описание двух методов мелкозернистого распараллеливания, применяемых в методике ТИМ-2D. Первый подход заключается в сохранении контура интегрирования для узлов и использовании наложения в один слой ячеек между параобластями. В слое наложения производится обмен информацией об узлах и ячейках. Второй подход заключается в разделении контура интегрирования для узлов и расчете взаимодействия между параобластями.

Методы дают близкую эффективность распараллеливания. Однако при мелкозернистом распараллеливании без наложения параобластей не реализовано совмещение обменов и вычислений. Можно ожидать, что при реализации такого совмещения мелкозернистое распараллеливание без наложения параобластей даст более высокую эффективность распараллеливания за счет меньшего объема передаваемой информации.

Разработанные алгоритмы дополняют распараллеливание по областям и OpenMP-распараллеливание, реализованные для методики ТИМ-2D ранее.



Рис. 9. Виды декомпозиций для фрагмента сетки диаграммы Вороного

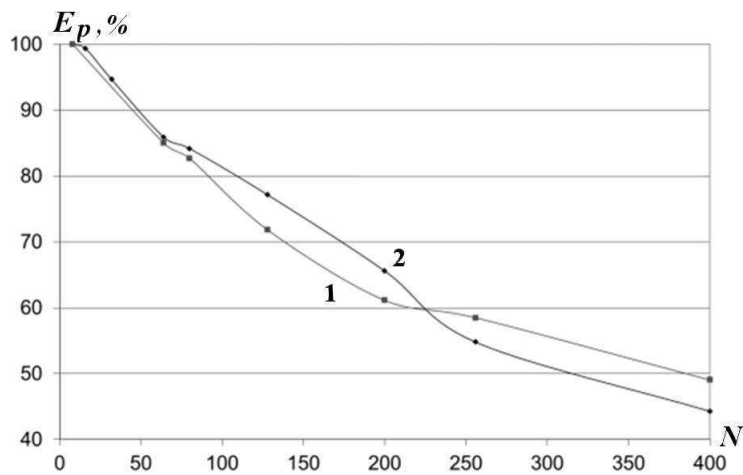


Рис. 10. Эффективность мелкозернистого распараллеливания: 1 — с наложением параобластей; 2 — без наложения параобластей (N — количество процессоров)

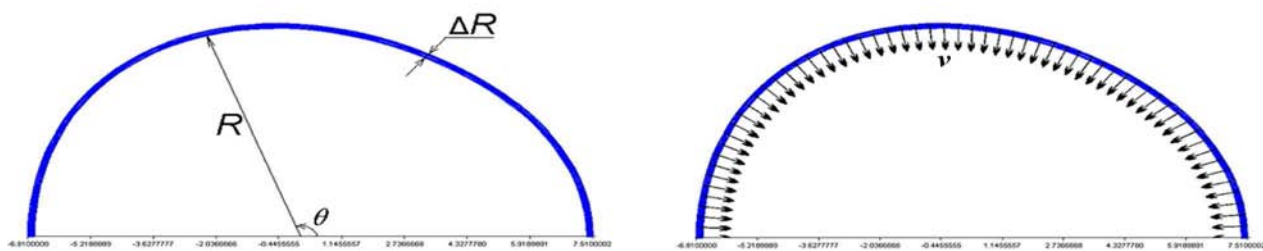


Рис. 11. Начальные форма и скорость оболочки в тестовой задаче



Рис. 12. Вид расчетной сетки на момент времени $t = 1,1$ и сравнение формы оболочки, полученной при расчетах в последовательном (\blacklozenge) и параллельном (—) режимах

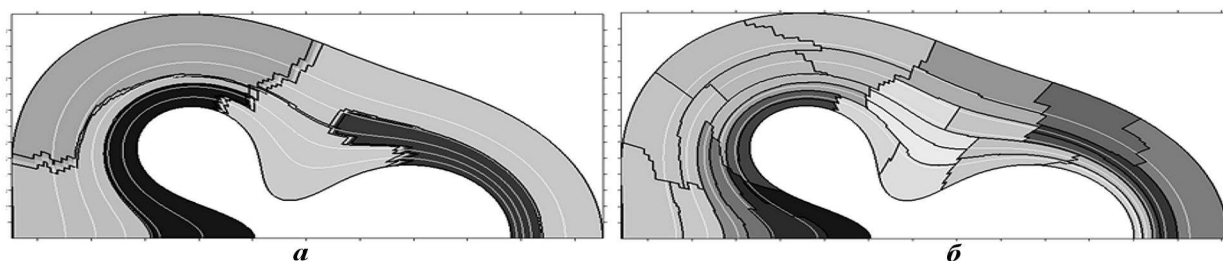


Рис. 13. Форма области и разделение на параобласти: *a* — с наложением; *б* — без наложения

Список литературы

1. Соколов С. С., Воропинов А. А., Новиков И. Г. и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 4. С. 29—43.
2. Воропинов А. А., Соколов С. С., Новиков И. Г. Распараллеливание в модели смешанной памяти для расчета задач газодинамики в методике ТИМ-2D // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2008): Тр. межд. науч. конф. (Санкт-Петербург, 28 января — 1 февраля 2008 г.). Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2008. С. 69—79.
3. Воропинов А. А., Новиков И. Г., Соболев И. В. и др. Распараллеливание методики ТИМ в модели общей памяти с использованием интерфейса OpenMP // Вычислительные методы и программирование. 2007. Т. 8, № 1. С. 134—141.
4. Воропинов А. А., Соколов С. С., Новиков И. Г. Двухуровневое распараллеливание в модели смешанной памяти для расчета задач газодинамики в методике ТИМ-2D // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 1. С. 51—59.
5. Половникова Т. Н., Воропинов А. А. Опыт использования библиотек SCOTCH и MeTiS для декомпозиции неструктурированных сеток в методике ТИМ // Супервычисления и математическое моделирование. Тр. XII межд. семинара / Под ред. Р. М. Шагалиева. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 282—288.
6. ParMETIS — Parallel Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview>.
7. Pellegrini F. SCOTCH: Static Mapping, Graph, Mesh and Hypergraph Partitioning, and Parallel and Sequential Sparse Matrix Ordering Package. <http://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch/>.
8. Воропинов А. А. Декомпозиция данных для распараллеливания методики ТИМ-2D и критерии оценки ее качества // Вестник ЮУрГУ. Сер. Математическое моделирование и программирование. 2009. № 37(170). Вып. 4. С. 40—50.
9. Воропинов А. А., Новиков И. Г., Соколов С. С. Расчет контактного взаимодействия между счетными областями в методике ТИМ-2D // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 2. С. 5—20.
10. Sofronov I. D., Rasskazova V. V., Nesterenko L. V. The use of nonregular nets for solving two-dimensional nonstationary problems in gas dynamics // Numerical Methods in Fluid Dynamics / Ed. by N. N. Yanenko, Ju. I. Shokin. Moscow: Mir Publishers, 1984. С. 82—121.

Статья поступила в редакцию 05.12.11.

УДК 519.6

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРОГРАММНО-ТЕХНИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ИСКЕНДЕР

В. М. Конюхов, И. В. Конюхов, С. В. Краснов
(КФУ, г. Казань; НПЦ "Нефте-Газ", г. Саров)

Дано описание математического обеспечения программно-технического комплекса ИСКЕНДЕР, разработанного на основе методов математического и численного моделирования взаимосвязанных термо- и гидродинамических процессов, происходящих при движении многофазных потоков в трубах наклонно-направленной скважины, проточных каналах погружного электроцентробежного насоса и пористой среде нефтяного пласта сложной структуры. Пакет предназначен для экспресс-анализа эксплуатационных режимов работы добывающих скважин с вертикальным или горизонтальным окончанием, решения задач оптимизации таких режимов, ведения хранилища данных по нефтяным месторождениям и подземному оборудованию скважин. Приведены примеры решения некоторых задач, иллюстрирующие работу модулей пакета.

Ключевые слова: математическое обеспечение, пакет программ, численное моделирование, многофазные потоки, нефтяной пласт, добывающая скважина, электроцентробежный насос, хранилище данных.

Введение

Математическое и численное моделирование сложных процессов тепломассопереноса при течении многофазных сред в трубах нефтедобывающих скважин, оборудованных установками электроцентробежных насосов (УЭЦН), представляют собой один из наиболее эффективных и экономичных способов исследования таких скважин, оптимизации и подбора подземного оборудования. При этом скважина и нефтяной пласт образуют единую систему, что требует учета взаимосвязанности происходящих в них процессов при решении задач нефтедобычи, разработки и оптимизации. Ситуация еще более осложняется, если скважина с вертикальным окончанием вскрывает многопластовую нефтяную залежь и необходимо получить расчетные оценки дебитов каждого из пропластков либо если горизонтальный ствол наклонно-направленной скважины проходит через неоднородный по структуре пласт и требуется оценить эффективность работы отдельных участков ствола.

Программно-технический комплекс (ПТК) ИСКЕНДЕР разработан на основе методов математического и численного моделирования процессов, происходящих при движении многофазных потоков в трубах скважины, проточных каналах погружного электроцентробежного насоса (ЭЦН) и пористой среде нефтяного пласта. ПТК представляет собой компьютерную систему для хранения данных по месторождениям и подземным скважинам, оборудованным УЭЦН, экспресс-анализа эксплуатационных режимов работы добывающих наклонно-направленных скважин с вертикальным или горизонтальным окончанием, решения задач оптимизации таких режимов на основе общей математической модели взаимосвязанных термо- и гидродинамических процессов в единой системе *пласт—скважина—УЭЦН*.

ПТК ИСКЕНДЕР имеет систему подготовки исходных данных (препроцессор), предназначенную для систематизации, накопления и хранения в базах данных (БД) физико-химических свойств фаз добываемой продукции, инклинометрии наклонно-направленных скважин, характеристик ступеней ЭЦН и погружных электродвигателей, фильтрационно-емкостных параметров пластов, параметров

разгазирования нефти и другой информации. Вычислительным модулем пакета является процессор, реализующий расчет основных характеристик общей системы *пласт—скважина—УЭЦН* (полей давления, водо- и газосодержания и т. д.) с использованием реальных промысловых данных. Визуализация результатов расчетов осуществляется с помощью постпроцессора — набора программных модулей, позволяющих строить зависимости различных характеристик процессов в каждом из отдельных элементов системы (в скважине, ЭЦН и пласте), а также интегральные характеристики насосной установки *напор—подача, КПД—подача, мощность—подача* с указанием на них текущей рабочей точки ЭЦН.

Математическое обеспечение

Для расчета характеристик двухфазного фильтрационного потока несмешивающихся жидкостей (воды и нефти) в вертикальном разрезе плоскорадиального слоисто-неоднородного пласта, вскрытого вертикальным окончанием наклонно-направленной скважины, используются уравнения [1–3]

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = 0, \quad \mathbf{V} = -K K^* \cdot \nabla \bar{P}, \quad K^* = \frac{K_1^*}{\mu_1} + \frac{K_3^*}{\mu_3}, \quad (1)$$

где \bar{P} — давление; \mathbf{V} — вектор суммарной скорости фильтрации; μ_i — вязкость i -й фазы ($i = 1$ — нефть; $i = 3$ — вода); $K_i^*(S)$ — относительная фазовая проницаемость i -й фазы, зависящая от водонасыщенности S ; K — абсолютная проницаемость пористой среды. Закачка воды осуществляется на проницаемой поверхности контура $\Gamma_{\text{п}}$ питания. Уравнения (1) решаются при заданных значениях давления $\bar{P}|_{\Gamma_{\text{п}}} = P_{\text{к}}$ на контуре $\Gamma_{\text{п}}$ и $\bar{P}|_{\Gamma_{\text{Д}}} = P_{\text{з}}$ на перфорированной поверхности $\Gamma_{\text{Д}}$ забоя добывающей скважины. На границах слоев, где абсолютная проницаемость K терпит разрыв первого рода, выполняются условия сопряжения: $[\bar{P}] = 0$, $[V_z] = 0$. Кровля и подошва пласта непроницаемы.

Если задано распределение водонасыщенности S по продуктивным пропласткам, то суммарный массовый приток $G_{\text{Д}}$ из пласта (дебит скважины) и его обводненность θ определяются в результате решения фильтрационной задачи (1). Если же задано значение θ на забое скважины, то с использованием функции Баклея—Леверетта $f(S) = K_1^*/K_*$ (доли воды в суммарном фильтрационном потоке) сначала восстанавливается поле насыщенности S , а затем находится распределение давления, скоростей фильтрации фаз в пласте и дебит добывающей скважины $G_{\text{Д}}$.

Трехмерная фильтрация в пласте с горизонтальным окончанием скважины также описывается уравнениями (1).

Продукция, поступающая из пласта, движется к поверхности земли по трубам наклонно-направленной скважины. Ее кусочно-линейный профиль строится по инклинометрическим данным и характеризуется изменениями зенитного и азимутального углов по глубине скважины. При построении одномерной модели течения трехфазной смеси вдоль оси скважины ее трехмерный профиль заменяется двумерной разверткой в плоскости Oxz с сохранением длины участков труб и зенитного угла. Система уравнений установившихся термогидродинамических процессов в скважине, полученная в результате осреднения характеристик газоводонефтяного потока по ортогональному к оси скважины сечению, дополняемая соотношениями, связывающими различные характеристики смеси, по аналогии с [4–6] может быть записана в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{\text{к}}} \frac{d}{dz} \sum_{i=1}^3 G_i \bar{w}_i &= -\frac{dP}{dz} - \frac{2\tau_{\text{ст}}}{r_{\text{к}} \cos \phi} + \rho g; \quad J = \frac{\rho_1 w (1 - \varphi_2 - \varphi_3)}{1 - C_{\text{н}} F} \frac{d(C_{\text{н}} F)}{dz} \cos^{-1} \phi; \\ \frac{dT}{dz} \sum_{i=1}^3 G_i C_{\text{P}i} &= T \frac{dP}{dz} \sum_{i=1}^3 \frac{G_i}{\rho_i} \alpha_{\text{P}i} + \frac{2\pi r_{\text{к}} (\tau_{\text{ст}} w - q_{\text{ст}}) + f_{\text{к}} (Q_{\text{V}} - J L)}{\cos \phi}; \quad w = \frac{G}{f_{\text{к}} \rho_{\beta}}; \quad \rho = \sum_{i=1}^3 \rho_i \varphi_i; \quad (2) \\ \rho_{\beta} &= \sum_{i=1}^3 \rho_i \beta_i; \quad \beta_3 = \frac{G_3 [\rho_1 (1 - \beta_2) + \rho_2 \beta_2]}{\rho_3 (G - G_3) + \rho_1 G_3}; \quad \beta_2 = \frac{G_2 \rho_1 \rho_3}{\rho_3 [\rho_1 G_2 + \rho_2 (G - G_2)] + G_3 \rho_2 (\rho_1 - \rho_3)}. \end{aligned}$$

Здесь z — координата по оси Oz , проходящей через устье скважины и имеющей начало на кровле пласта; ρ_i , \bar{w}_i , G_i , φ_i и β_i — средние по сечению канала площадью f_k плотность, скорость (*средневзвешенная*), массовый расход, истинное и расходное объемные содержания i -й фазы (нижние индексы 1, 2 и 3 относятся к нефтяной, газовой и водной фазам соответственно); C_{Pi} ($i = \overline{1,3}$) — коэффициенты Зубера для фаз; P , T , ρ , w , G — давление (одинаковое для всех фаз), температура, плотность, объемная скорость и массовый расход смеси; $\bar{w}_1 = w(1 - \beta_2 - \beta_3)/(1 - \varphi_2 - \varphi_3)$, $\bar{w}_j = C_j w + v_j$ ($j = 2, 3$), где C_j — аналоги коэффициента Зубера, учитывающие неравномерность распределения по сечению площадью f_k скорости смеси w и объемных истинных концентраций j -й дисперсной фазы, а v_j — скорость ее дрейфа; α_{Ti} , α_{Pi} — коэффициенты теплового расширения и объемной упругости i -й фазы; Q_V — отнесенная к единице объема смеси линейная мощность распределенных вдоль насосно-компрессорных труб (НКТ) внешних источников тепла, обусловленных потерями электроэнергии в кабеле, питающем УЭЦН; $\tau_{ст}$ и $q_{ст}$ — средние по периметру канала касательное напряжение и плотность теплового потока на стенке канала; J — массовая скорость образования газовой фазы за счет нефтяной, отнесенная к единице объема смеси; L — скрытая теплота растворения газа в нефти; C_H — массовая концентрация газа, растворенного в нефти при давлении P выше давления P_H насыщения нефти газом; $F(P/P_H, T)$ — обобщенный коэффициент растворимости газа в нефти; r_κ — радиус канала (значение $\kappa = 0$ соответствует участку $0 < z < z_\Theta$ обсадной колонны скважины ниже точки z_Θ подвески погружной УЭЦН, $\kappa = 1$ — участку НКТ при $z_\Theta < z < H_c$, где H_c — координата устья скважины; $r_1 < r_0$); g — проекция вектора ускорения силы тяжести на ось Oz ; $\phi = \phi(x, z)$ — угол наклона профиля скважины относительно оси Oz .

Расчет процессов тепломассопереноса при движении смеси в каналах ЭЦН и параметров работы отдельных ступеней ЭЦН осуществляется на основе системы дифференциальных уравнений [5, 6], обобщающей дискретную схему П. Д. Ляпкина и В. И. Игровского [7]:

$$\frac{dP}{dm} = g\rho M \Delta H; \quad \frac{dT}{dm} \sum_{i=1}^3 \frac{G_i}{Q} C_{Pi} = \left(T \sum_{i=1}^3 \alpha_{Pi} \beta_i + \frac{1-\eta}{\eta} \right) \frac{dP}{dm} - \rho L \frac{d(C_H F)}{dm}; \quad 0 < m \leq 1. \quad (3)$$

Здесь m — доля ступеней, пройденных потоком; M — общее число ступеней в насосном узле; ΔH , $Q = G/\rho$ и η — напор, подача и коэффициент полезного действия (КПД), характеризующие работу отдельной ступени ЭЦН при перекачке смеси.

Уравнения (2), (3) включают в себя как частные случаи уравнения однофазного (нефтяного или водного) и двухфазного (газонефтяного или водонефтяного) потоков в скважине и каналах ЭЦН.

Сопряжение математических моделей

Условия сопряжения решений систем уравнений (1) и (2) связывают характеристики фильтрационного потока и потока в обсадной колонне при $z = 0$ на забое скважины:

$$P|_{z=0} = P_3; \quad T|_{z=0} = T_3 = T_{пл}; \quad \beta_3|_{z=0} = \theta; \quad G|_{z=0} = G_D. \quad (4)$$

Эти условия позволяют найти термогидродинамические характеристики смеси в обсадной колонне скважины на участке $0 < z < z_\Theta$ от ее забоя до координаты z_Θ подвески УЭЦН.

Для сопряжения решений систем (2) и (3) на приеме УЭЦН (на входе в насосный узел при $z = z_{\Theta-0}$) служат аналогичные условия:

$$\begin{aligned} P|_{m=0} &= P|_{z=z_{\Theta-0}}; & T|_{m=0} &= T|_{z=z_{\Theta-0}}; & G|_{m=0} &= G|_{z=z_{\Theta-0}}; \\ \beta_3|_{m=0} &= \beta_3|_{z=z_{\Theta-0}}; & \beta_2|_{m=0} &= \beta_2|_{z=z_{\Theta-0}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь параметры потока в точке $z = z_{\Theta-0}$ находятся из решения уравнений (2) на участке скважины $0 < z < z_\Theta$.

Условия (5) позволяют решить уравнения (3) и найти характеристики трехфазного потока вдоль ступеней ЭЦН, в том числе значения $P|_{m=1}$, $T|_{m=1}$, $G|_{m=1}$, $\beta_2|_{m=1}$ и $\beta_3|_{m=1}$ на выкиде насоса.

Эти значения являются граничными для задачи (2) при $z_{\Theta} < z < H_c$. Соответствующие условия сопряжения в точке $z = z_{\Theta+0}$ (на входе в НКТ) имеют вид

$$\begin{aligned} P|_{z=z_{\Theta-0}} &= P|_{m=1}; & T|_{z=z_{\Theta+0}} &= T|_{m=1}; & G|_{z=z_{\Theta+0}} &= G|_{m=1}; \\ \beta_3|_{z=z_{\Theta+0}} &= \beta_3|_{m=1}; & \beta_2|_{z=z_{\Theta+0}} &= \beta_2|_{m=1}. \end{aligned} \quad (6)$$

На устье скважины при $z = H_c$ ставится граничное условие

$$P|_{z=H_c} = P_{уст},$$

где $P_{уст}$ — заданное устьевое давление.

Очевидно, такая постановка требует решения обратной задачи, поскольку в общем случае величины P_3 , θ , G_D являются неизвестными. Прямая задача (1)–(6) решается методом конечных разностей. Для нахождения решения обратной задачи используются итерационные методы. Соответствующие численные модели и алгоритмы расчета процессов в системе *пласт–скважина–УЭЦН* реализованы в ПТК ИСКЕНДЕР.

Пересчет напора и подачи ступени ЭЦН с воды на неоднородные смеси

Важным моментом замыкания математической модели (3) является построение соотношений для вычисления значений ΔH и η . В известной методике [7–9] П. Д. Ляпкина пересчета *рабочих* параметров ступени с воды на вязкую жидкость или неоднородную смесь используются коэффициенты K_H , K_Q относительных напора и подачи и относительный КПД K_{η} :

$$K_H = \frac{\Delta H}{\Delta H_B}; \quad K_Q = \frac{Q}{Q_B}; \quad K_{\eta} = \frac{\eta}{\eta_B}, \quad (7)$$

отражающие снижение напора ΔH , подачи Q и КПД η при перекачке вязкой жидкости или смеси по сравнению с соответствующими показателями ΔH_B , Q_B , η_B работы ступени ЭЦН на воде.

Графики полуэмпирических критериальных зависимостей $K_Q = K_H = K_{Q,H}(\text{Re}_{\Theta}, q_B)$ от числа Рейнольдса Re_{Θ} для пяти характерных значений относительной подачи $q_B = Q_B/Q_B^*$ ступени на воде, построенные П. Д. Ляпковым на основе обработки многочисленных экспериментальных данных, представлены на рис. 1. Здесь Q_B^* — оптимальная подача, отвечающая максимуму η_B^* паспортной зависимости КПД $\eta_B(Q_B)$ при работе ступени ЭЦН на пресной воде. На вспомогательном рисунке, расположенном в правом нижнем углу рис. 1, сплошной линией схематично изображена паспортная напорная характеристика $\Delta H_B = \Delta H_B(Q_B)$ ступени, на которой цифрами 1–4 обозначены значения напора ΔH_B при относительной подаче $q_B = 0,5; 0,75; 1,0; 1,3$. Там же штриховой линией показана экспериментальная зависимость напора ΔH от расхода Q при перекачке ступенью вязкой жидкости. Точки 1'–4' получаются в результате пересечения кривой $\Delta H(Q)$ и лучей, проходящих через начало координат и точки 1–4. Соответствующие значения ΔH , Q и ΔH_B , Q_B в этих точках используются в методике [7–9] для построения зависимостей K_H и K_Q . Число Re_{Θ} при движении смеси в каналах ступени ЭЦН определяется в работах [7, 8] значениями подачи Q , эффективной динамической вязкости μ и средней плотности ρ :

$$\text{Re}_{\Theta} = f(n_S) \frac{Q}{\nu} \sqrt[3]{\frac{\omega}{Q_B^*}}, \quad n_S = 193\omega (Q_B^*)^{0,5} (g\Delta H_B^*)^{-0,75}, \quad f(n_S) = \frac{4,3 + 0,816n_S^{0,274}}{n_S^{0,575}}, \quad (8)$$

где ΔH_B^* — оптимальный напор ступени ЭЦН при ее работе на воде; n_S — коэффициент быстроходности ступени; ω — угловая скорость вращения вала насоса (ротора электродвигателя); $\nu = \mu/\rho$ — эффективная кинематическая вязкость смеси.

При ламинарном и турбулентном режимах течения смеси соответствующие зависимости K_Q^L , K_H^L и K_Q^T , K_H^T в диапазоне подач $0,5 \leq q_B \leq 1,3$ аппроксимируются формулами [7]

$$\begin{aligned} K_Q^L &= K_H^L = K_{Q,H}^L = \frac{\text{Re}_{\Theta}}{\text{Re}_{\Theta} - 50 + 200q_B}, \quad \text{Re}_{\Theta} < 10^4; \\ K_{Q,H}^T &= 1 - (3,585 - 0,821 \lg \text{Re}_{\Theta})(0,027 + 0,0485q_B), \quad \text{Re}_{\Theta} \geq 10^4. \end{aligned} \quad (9)$$

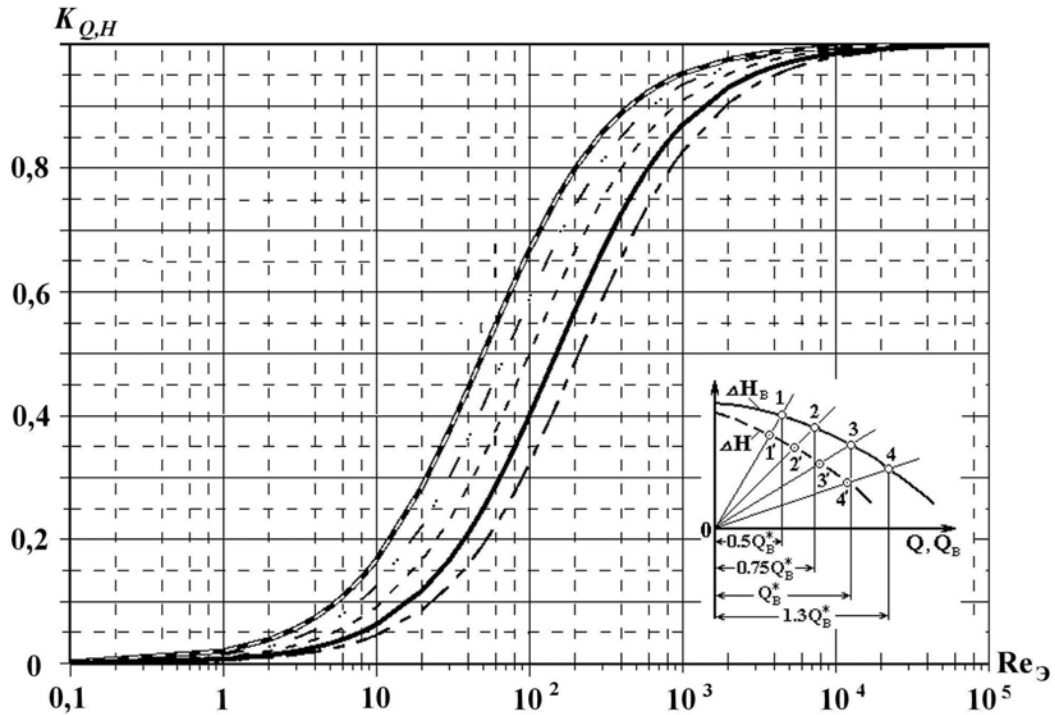


Рис. 1. Коэффициенты K_Q и K_H относительной подачи и напора как функции числа Рейнольдса $Re_Э$:
 — — — — $q_v = 0,5$; — · — · — $q_v = 0,6$; — — — $q_v = 0,75$; — — — — $q_v = 1,0$; — — — — — $q_v = 1,3$

Согласно методике [7] значение $K_{Q,H}$ определяется как $\min(K_{Q,H}^L, K_{Q,H}^T)$.

Расчет напора ΔH ступени, перекачивающей неоднородную смесь при заданных значениях величин Q, μ, ρ и ω , выполняется по формулам (7)–(9) на основе итерационной процедуры, в которой происходит уточнение неизвестных значений Q_B и ΔH_B , соответствующих подаче Q смеси и определяемых по паспортной *водяной* характеристике ступени $\Delta H_B = \Delta H_B(Q_B)$. Для начала итерационного процесса задается некоторое начальное приближение относительной подачи q_v .

При перекачке насосом неоднородных сред рабочие параметры $Q, \Delta H$ и η его ступеней непрерывно меняются от приема к выкиду в силу сжатия и нагрева смеси, а также растворения свободного газа в нефти. Происходящие при этом взаимосвязанные изменения характеристик потока и рабочих параметров ступеней вдоль насосного узла учитываются моделью (3), поэтому при ее численной реализации на каждом шаге Δt разбиения интервала $0 \leq m \leq 1$ необходимо осуществлять пересчет $Q, \Delta H$ и η . Очевидно, что использование итерационного алгоритма [7] усложняет расчет и увеличивает время решения задачи (3). Поэтому модифицируем методику [7] так, чтобы расчет параметров $Q, \Delta H$ и η ступеней можно было выполнять без итераций.

Как показал анализ зависимостей $K_{Q,H}^L$ и $K_{Q,H}^T$, для расчета коэффициентов $K_{Q,H}$ во всем диапазоне подач $0,5 \leq q_v \leq 1$, с погрешностью 1–2% можно положить $K_{Q,H} \equiv K_{Q,H}^L$. Тогда с учетом соотношения (8) перепишем выражение (9) для числа $Re_Э$ в виде

$$Re_Э = q_v K_Q Re, \quad Re = f(n_s) \sqrt[3]{\frac{\omega}{Q_B^*}} \left(\frac{Q_B^*}{\nu} \right), \quad (10)$$

где Re — модифицированное число Рейнольдса потока смеси в ЭЦН, определяемое только по оптимальным параметрам $Q_B^*, \Delta H_B^*$ работы ступени на воде и величине ν смеси. Теперь с помощью соотношений (9) и (10) выразим коэффициенты K_H и K_Q как функции аргументов Re и q_v :

$$K_{Q,H} = 1 - \frac{200q_v - 50}{q_v Re}, \quad 0,5 \leq q_v \leq 1,3. \quad (11)$$

Приравняв соотношения (9) и (11) для $K_{Q,H}^L$ и $K_{Q,H}$, получим связь между параметрами Рейнольдса $Re_{\text{Э}}$ и Re :

$$Re_{\text{Э}} = Re q_{\text{в}} - (200q_{\text{в}} - 50), \text{ или } Re = \frac{Re_{\text{Э}} + 200q_{\text{в}} - 50}{q_{\text{в}}}. \quad (12)$$

Нетрудно видеть, что в оптимальном режиме работы ступени при $q_{\text{в}} = 1$ число Re лишь на константу отличается от числа $Re_{\text{Э}}$: $Re = Re_{\text{Э}} + 150$. Вычислив $K_Q^* = 1 - 150/Re$ при $q_{\text{в}} = 1$ по формуле (11) и используя выражение $Re_{\text{Э}} = q_c K_Q^* Re$ числа $Re_{\text{Э}}$ через относительную подачу смеси $q_c = Q/Q^*$, можно записать

$$Re_{\text{Э}} = q_c (Re - 150); \quad Re_{\text{Э}} = \frac{Q}{Q_{\text{в}}^*} Re. \quad (13)$$

Приравняв (10) и (13), получим

$$q_c K_Q^* = q_{\text{в}} K_Q. \quad (14)$$

Теперь с учетом формул (12) и (13) запишем связь между величинами $q_{\text{в}}$ и q_c :

$$q_{\text{в}} = \frac{q_c (Re - 150) - 50}{Re - 200}, \quad Re_{\text{Э}}^{(0,5)} \leq Re_{\text{Э}} \leq Re_{\text{Э}}^{(1,3)}, \quad (15)$$

где $Re_{\text{Э}}^{(0,5)} = 0,5Re - 50$ и $Re_{\text{Э}}^{(1,3)} = 1,3Re - 210$ — значения параметра $Re_{\text{Э}}$ (10) при $q_{\text{в}} = 0,5$ и $q_{\text{в}} = 1,3$ соответственно. В итоге получим формулу

$$K_{Q,H} = \frac{Q (Re - 200)}{QRe - 50Q_{\text{в}}^*}, \quad 0,5 \leq q_{\text{в}} < 1,3, \quad (16)$$

которая включает в себя неявную зависимость величин q_c и $q_{\text{в}}$.

При заданных значениях частоты ω , плотности ρ , эффективной вязкости μ и подачи Q смеси на приеме ступени ЭЦН сначала определяются соответствующие параметры ее работы на воде: подача $Q_{\text{в}}$ по формуле (15) и напор $\Delta H_{\text{в}}$ по паспортной кривой $\Delta H_{\text{в}} = \Delta H_{\text{в}}(Q_{\text{в}})$. Затем с помощью соотношений (8), (16) вычисляется напор $\Delta H = K_H \Delta H_{\text{в}}$ ступени при перекачке смеси. Таким образом, в отличие от методики [7, 8] предлагаемый подход не требует выполнения итераций.

Для пересчета характеристик ступени в диапазонах $0 \leq q_{\text{в}} < 0,5$ и $q_{\text{в}} > 1,3$ необходимо построить зависимости, аналогичные (15), (16). Пусть $q_{\text{в max}}$ — относительная максимальная подача ступени ЭЦН на воде, при которой напор $\Delta H_{\text{в}}$ равен нулю. Как показал анализ расчетных характеристик ступеней различного типа при работе на смеси, они подобны характеристикам работы ступеней на воде, если при определении коэффициентов подачи $K_Q(q_{\text{в}}, Re_{\text{Э}})$ в указанных диапазонах положить

$$K_Q(q_{\text{в}}, Re_{\text{Э}}) \approx \begin{cases} K_Q^{(0,5)}(Re_{\text{Э}}) = \frac{Re_{\text{Э}}}{Re_{\text{Э}} + 50}, & 0 \leq q_{\text{в}} < 0,5; \\ K_Q^{(1,3)}(Re_{\text{Э}}) = \frac{Re_{\text{Э}}}{Re_{\text{Э}} + 210}, & 1,3 < q_{\text{в}} \leq q_{\text{в max}}, \end{cases}$$

где $K_Q^{(0,5)}$ и $K_Q^{(1,3)}$ — фиксированные значения коэффициента K_Q , вычисленные по формуле (9) при $q_{\text{в}} = 0,5$ и $q_{\text{в}} = 1,3$.

Рассмотрим сначала вопрос доопределения функции $K_Q(q_{\text{в}}, Re_{\text{Э}})$ на область относительных подач $1,3 < q_{\text{в}} \leq q_{\text{в max}}$. Представим зависимость K_Q в виде, аналогичном (9), положив

$$K_Q = \frac{K_Q^{(1,3)} - k^{(1,3)} K_Q^{(1,3)}}{k^{(1,3)} + Re_{\text{Э}}}, \quad (17)$$

где $k^{(1,3)} = k Re_{\text{Э}}^{(1,3)}$, k — малое число, $k = 10^{-3}$. При таком определении коэффициент K_Q практически постоянен в интервале $1,3 < q_{\text{в}} \leq q_{\text{в max}}$ при фиксированном значении числа $Re_{\text{Э}}$. С учетом

соотношения (10) выразим K_Q через модифицированное число Рейнольдса Re и относительную подачу q_b :

$$K_Q = K_Q^{(1,3)} - \frac{k^{(1,3)}}{q_b Re}. \quad (18)$$

Приравняв правые части соотношений (17) и (18), найдем связь между параметрами Re и $Re_{\mathcal{E}}$ при $1,3 < q_b \leq q_{b \max}$:

$$Re_{\mathcal{E}} = q_b Re K_Q^{(1,3)} - k^{(1,3)}. \quad (19)$$

Теперь, воспользовавшись свойствами (14) и (19), запишем соотношение, связывающее относительные подачи q_b и q_c при $Re_{\mathcal{E}} > Re_{\mathcal{E}}^{(1,3)}$:

$$q_b = \frac{q_c (Re - 150) + k^{(1,3)}}{Re K_Q^{(1,3)}}. \quad (20)$$

По аналогии с выводом формулы (16), учитывая, что $q_c (Re - 150) = Re Q / Q_b^*$, будем иметь

$$K_{Q,H} = K_Q^{(1,3)} \frac{Q Re}{Q Re + Q_b^* k^{(1,3)}}, \quad K_Q^{(1,3)} = 1 - \frac{210}{1,3 Re}, \quad 1,3 < q_b \leq q_{b \max}. \quad (21)$$

Перейдем теперь к доопределению функции K_Q в области $0 \leq q_b < 0,5$. Пусть $Re_{\mathcal{E}}^{(0,5)} = 0,5 Re - 50$, $K_Q^{(0,5)} = Re_{\mathcal{E}}^{(0,5)} / (Re_{\mathcal{E}}^{(0,5)} + 50)$ — значения параметров $Re_{\mathcal{E}}$ и K_Q при $q_b = 0,5$, а $Re_{\mathcal{E}}^{(0,55)} = 0,55 Re - 60$, $K_Q^{(0,55)} = Re_{\mathcal{E}}^{(0,55)} / (Re_{\mathcal{E}}^{(0,55)} + 60)$ — при близком значении относительной подачи $q_b = 0,55$. Обозначим $\Delta K_Q = |K_Q^{(0,55)} - K_Q^{(0,5)}| / 4$.

Будем искать $K_Q(q_b, Re_{\mathcal{E}})$ в виде

$$K_Q = F(q_b) (1 + k^{(0,5)} Re_{\mathcal{E}}) \quad (22)$$

так, чтобы выполнялось условие $K_Q(q_b, Re_{\mathcal{E}}) \approx K_Q^{(0,5)}(Re_{\mathcal{E}})$. Для этого необходимо, чтобы константа $k^{(0,5)}$ была мала ($\sim 10^{-9}$), а в качестве зависимости $F(q_b)$ достаточно взять полином первого порядка $F(q_b) = c_1 + c_2 q_b$, коэффициенты c_i которого определим из условий $F(0,5) = K_Q^{(0,5)}$; $F(0) = K_Q^{(0,5)} + \Delta K_Q$: $c_1 = K_Q^{(0,5)} + \Delta K_Q$; $c_2 = -2\Delta K_Q$.

Учитывая (22), выразим коэффициент K_Q через параметр Re :

$$K_Q = \frac{F(q_b)}{1 - k^{(0,5)} F(q_b) q_b Re}. \quad (23)$$

Приравняв правые части соотношений (22) и (23), получим связь между числами Рейнольдса $Re_{\mathcal{E}}$ и Re :

$$Re_{\mathcal{E}} = \frac{F(q_b) q_b Re}{1 - k^{(0,5)} F(q_b) q_b Re}, \quad 0 \leq q_b < 0,5.$$

С помощью этой формулы, учитывая, что $Re_{\mathcal{E}} = q_c (Re - 150)$, найдем соотношение между относительными подачами q_b воды и q_c смеси:

$$q_b = -0,5 \frac{c_1}{c_2} - 0,5 \sqrt{\left(\frac{c_1}{c_2}\right)^2 - 4 \frac{1 - 1/A(q_c)}{c_2 k^{(0,5)} Re}}, \quad Re_{\mathcal{E}} < Re_{\mathcal{E}}^{(0,5)}, \quad (24)$$

где $A(q_c) = k^{(0,5)} q_c (Re - 150) + 1$.

Итак, при заданных значениях параметров ω , ρ , μ и Q формулы (20), (21) и (23), (24) позволяют рассчитать напор $\Delta H = K_H \Delta H_b$ соответственно в диапазонах $1,3 < q_b \leq q_{b \max}$ и $0 \leq q_b < 0,5$ без выполнения итераций.

Вычисление КПД и мощности ступени ЭЦН при перекачке смеси

Полуэмпирические зависимости КПД ступени K_η получены в работах П. Д. Ляпкина (см., например [7]). При $0,5 \leq q_b \leq 1,3$ эти зависимости аппроксимируются формулами [7]

$$K_\eta = \min(1, \min(K_\eta^L, K_\eta^T)), \quad (25)$$

$$K_\eta^L = 0,485 \lg \text{Re}_\Theta - 0,63 - 0,26q_b, \quad K_\eta^T = 0,274 \lg \text{Re}_\Theta - 0,06 - 0,14q_b,$$

где K_η^L и K_η^T — относительные КПД при ламинарном ($\text{Re}_\Theta < 10^4$) и турбулентном ($\text{Re}_\Theta \geq 10^4$) режимах течения смеси в каналах ступени.

Как показали расчеты, при $\text{Re}_\Theta < 100$ аппроксимация (25) не действует, так как значения K_η становятся отрицательными. Поэтому при малых числах Рейнольдса доопределим функцию K_η соотношениями

$$K_\eta = \frac{\text{Re}_\Theta}{\text{Re}_\Theta + 3870C(q_b)}, \quad C(q_b) = \left[1 + 0,678(\sqrt{2q_b} - 1) + 0,545(\sqrt{2q_b} - 1)^2 \right]^2, \quad (26)$$

где $\text{Re}_\Theta < 38,7C(q_b)$. Графики зависимости K_η (26) при $q_b = 0,5; 0,75; 1,0; 1,3$ и $\text{Re}_\Theta < 100$ показаны на рис. 2.

Анализ результатов расчетов по формулам (25), (26) показал также, что характеристики ступеней ЭЦН различных типов и размеров при работе на смеси подобны характеристикам работы ступеней на воде, если при определении коэффициентов $K_\eta(q_b, \text{Re}_\Theta)$ вне диапазона $0,5 \leq q_b \leq 1,3$ положить

$$K_\eta(q_b, \text{Re}_\Theta) \approx \begin{cases} K_\eta^{(0,5)}(\text{Re}_\Theta), & 0 \leq q_b < 0,5; \\ K_\eta^{(1,3)}(\text{Re}_\Theta), & 1,3 < q_b \leq q_{b \max}, \end{cases}$$

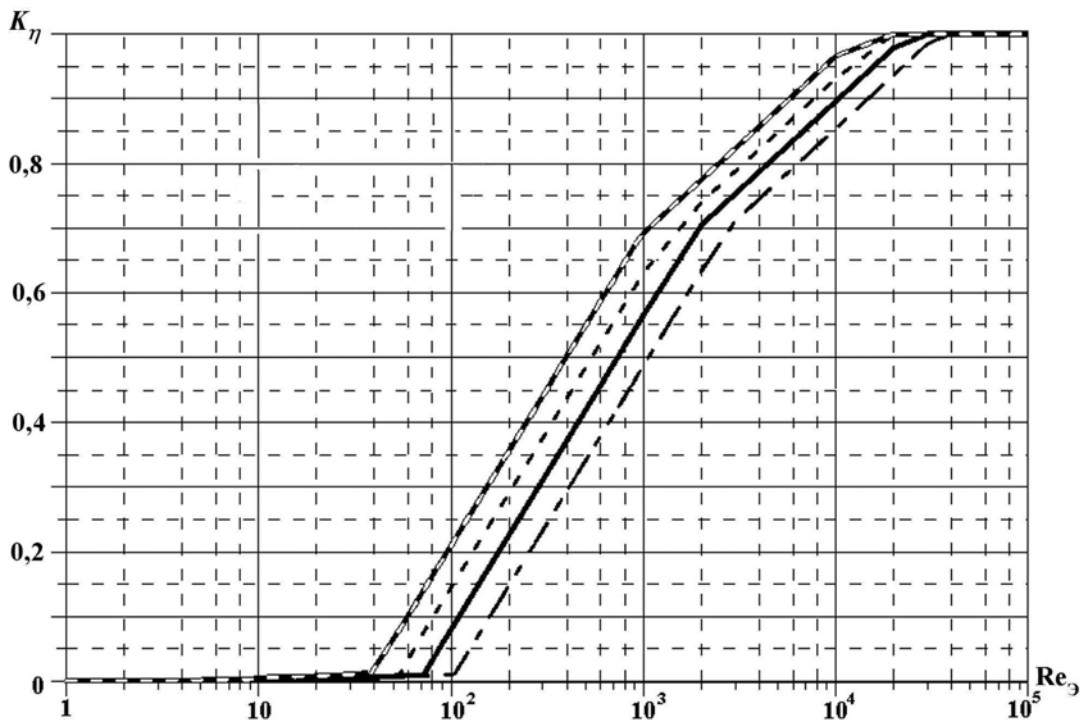


Рис. 2. Относительный КПД ступени как функция числа Рейнольдса Re_Θ : — — — $q_b = 0,5$; — — — $q_b = 0,75$; — — — $q_b = 1,0$; — — — $q_b = 1,3$

где $K_{\eta}^{(0,5)}$ и $K_{\eta}^{(1,3)}$ вычисляются по формулам (25) при $q_{\text{в}} = 0,5$ и $q_{\text{в}} = 1,3$.

Мощность N , потребляемая ступенью ЭЦН при перекачке смеси, определяется по формуле

$$N = N_{\text{в}}(q_{\text{в}}) \frac{\rho}{\rho_{\text{в}}} \frac{K_{Q,H}^2}{K_{\eta}}, \quad (27)$$

где $N_{\text{в}} = N_{\text{в}}(q_{\text{в}})$ — паспортная зависимость потребляемой мощности ступени насоса при работе на воде плотностью $\rho_{\text{в}}$.

В предлагаемой авторами модифицированной методике пересчета характеристик ступени ЭЦН с воды на смесь зависимости $\Delta H_{\text{в}}(Q_{\text{в}})$ и $N_{\text{в}}(Q_{\text{в}})$ в формулах (7) и (27) задаются как табличные функции подачи $Q_{\text{в}}$. Как правило, такие характеристики содержатся в графическом виде в каталогах заводов-изготовителей ЭЦН. Для преобразования графических данных в табличные и помещения их в БД ступеней ЭЦН разработана специальная программная подсистема, входящая в состав ПТК ИСКЕНДЕР. Отметим, что аналогичные средства имеются в пакете для оцифровки графических характеристик погружных электродвигателей и пополнения соответствующей БД.

Результаты расчетов

Рассмотрим в качестве примера результаты анализа эксплуатационного режима работы наклонно-направленной скважины Приобского месторождения, оборудованной УЭЦН. Установка состоит из ЭЦН, собранного из $M = 300$ ступеней SPI D8-30, и электродвигателя ЭДБ63-117В5. Профиль скважины, построенный по инклинометрическим данным, представлен на рис. 3, а. Точкой на рисунке показано положение УЭЦН. Скважина вскрывает два продуктивных пропластка AC_{12}^2 (1), AC_{10}^2 (3)* толщиной 37 и 27 м соответственно, между которыми расположена непроницаемая перемычка (2) толщиной 74 м. Абсолютная проницаемость пропластков 1 и 3 равна 0,002 и 0,013 мкм². При расчетах обводненность $\theta = 28\%$; объемный расход скважины по жидкости при нормальных условиях $Q_{\text{ж}}^0 = Q_1^0 + Q_3^0 = 25 \text{ м}^3/\text{сут}$; $P_{\text{уст}} = 1 \text{ МПа}$; $\omega = 50 \text{ Гц}$. В результате решения фильтрационной задачи найдено давление на забое скважин $P_3 = 10,2 \text{ МПа}$, а также вклад каждого из пропластков 1 и 3 суммарный дебит $Q_{\text{ж}}^0 = Q_{\text{ж}1} + Q_{\text{ж}3}$ пласта: $Q_{\text{ж}1} = 4,575 \text{ м}^3/\text{сут}$ и $Q_{\text{ж}3} = 20,425 \text{ м}^3/\text{сут}$.

Расчетные *рабочие точки* на интегральных характеристиках расположены вне левой границы области оптимальных подач насоса (см. рис. 3, б). Это свидетельствует о неправильном подборе установки к скважине. При этом газосодержание φ_2 на приеме насоса составляет около 25% (рис. 4), что является вполне допустимым для его нормальной работы.

Рис. 4 иллюстрирует типичные распределения некоторых искомым функций трехфазного водонефтегазового потока вдоль ствола скважины. Как видно из рисунка, при движении смеси в каналах ЭЦН из-за значительного повышения давления происходит полное растворение свободной газовой фазы в нефти, образовавшейся на забое скважины. В области двухфазного течения распределение давления P имеет практически линейный характер, а изменение температуры T в основном определяется теплообменом движущейся водонефтяной эмульсии с окружающими скважину горными породами. При этом изменение истинного водосодержания φ_3 в потоке происходит вследствие эффектов сжимаемости и теплового расширения нефти и воды и φ_3 возвращается к исходному значению $\theta = 28\%$.

Повторное разгазирование начинается в НКТ на глубине 820 м, когда давление P становится меньше давления $P_{\text{н}}(T)$ насыщения нефти газом. По мере дальнейшего снижения давления в скважине в силу высокой температуры продукции газонасыщенность φ_2 быстро растет, достигая на устье почти 75%. С увеличением истинного газосодержания в трехфазном потоке интенсивность охлаждения смеси увеличивается, поскольку часть энергии расходуется на образование газовой фазы. Именно этим эффектом обусловлены изменения характера температурной кривой, наблюдаемые на рис. 4. При $\varphi_2 > 20\%$, когда из-за наличия газа в потоке плотность смеси ρ в НКТ заметно уменьшается, меняется и характер зависимости давления $P(z)$ — она становится нелинейной.

* AC_{12}^2 и AC_{10}^2 — обозначения пропластков с Приобского месторождения

Отметим, что наряду с проведением экспресс-анализа эффективности работы системы *пласт-скважина-УЭЦН* ПТК ИСКЕНДЕР позволяет решать задачи оптимизации текущих эксплуатационных режимов работы добывающих скважин за счет частотного управления с помощью наземных систем, а также осуществлять рациональный подбор УЭЦН к скважинам для заданных технологических режимов их работы.

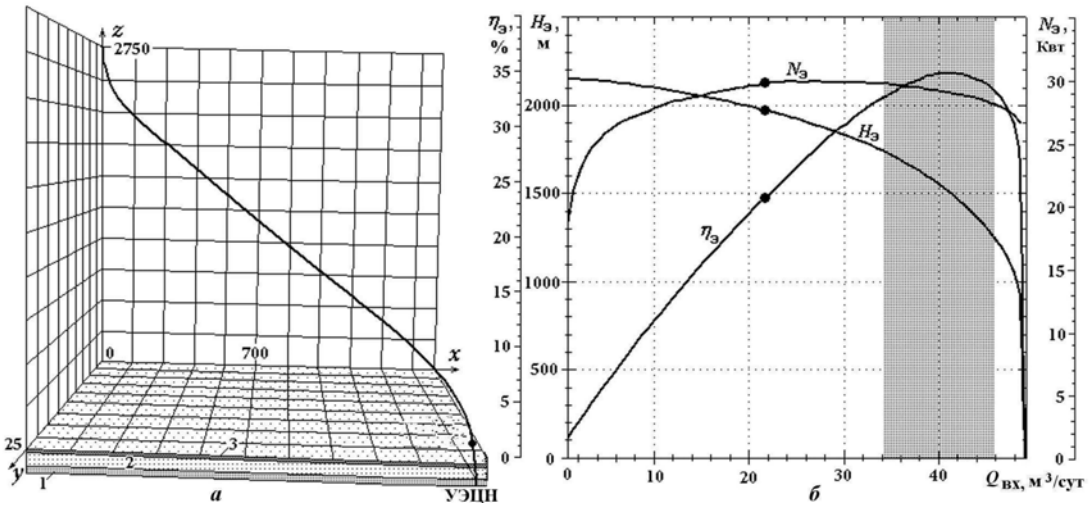


Рис. 3. Профиль (а) наклонно-направленной скважины с вертикальным окончанием и рабочие точки электронасоса SPI D8-30-1450 на интегральных кривых (б) напора $H_{э}$, мощности $N_{э}$ и КПД $\eta_{э}$

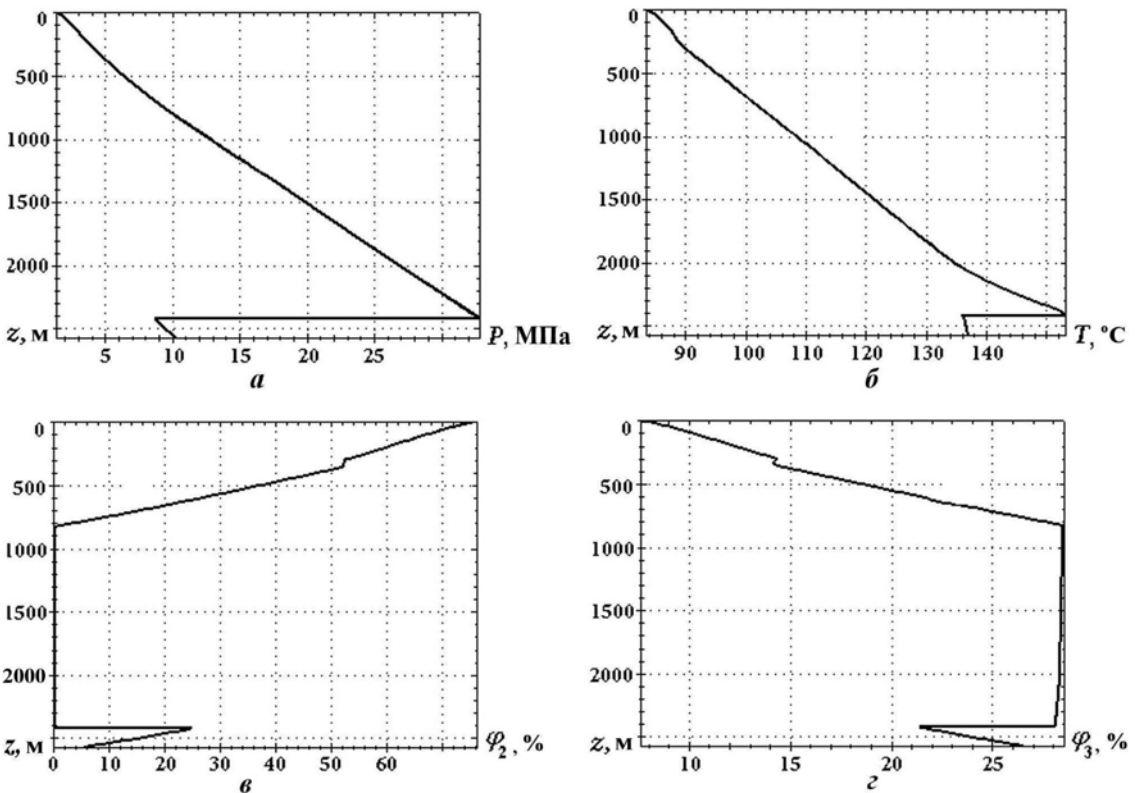


Рис. 4. Распределения давления P (а), температуры T (б), истинных объемных газо- и водосодержаний φ_2 (в) и φ_3 (г) вдоль ствола скважины

Список литературы

1. Баренблатт Г. И., Ентов В. М., Рыжик В. М. Движение жидкостей и газов в природных пластах. М.: Недра, 1984.
2. Чекалин А. Н. Численные решения задач фильтрации в водонефтяных пластах. Казань: Изд-во КГУ, 1982.
3. Чекалин А. Н., Колюхов В. М., Костерин А. В. Двухфазная многокомпонентная фильтрация в нефтяных пластах сложной структуры. Казань: Изд-во КГУ, 2009.
4. Пудовкин М. А., Саламатин А. Н., Чугунов В. А. Температурные процессы в действующих скважинах. Казань: Изд-во КГУ, 1977.
5. Саламатин А. Н. Математические модели дисперсных потоков. Казань: Изд-во КГУ, 1987.
6. Колюхов В. М. Дисперсные потоки в нефтяных скважинах. Казань: Изд-во КГУ, 1990.
7. Ляпков П. Д. Подбор установки погружного центробежного насоса // Справочное руководство по проектированию разработки и эксплуатации нефтяных месторождений. Добыча нефти / Под ред. Ш. К. Гиматудинова. М.: Недра, 1983. С. 237–293.
8. Ляпков П. Д. Способ пересчета характеристики погружного центробежного насоса с воды на эмульсию // Нефтяное хозяйство. 1979. № 5. С. 38–40.
9. Мищенко И. Т. Скважинная добыча нефти. Учеб. пособие для вузов. 2-е изд., испр. М.: Изд-во «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина, 2007.

Статья поступила в редакцию 09.12.11.

УДК 519.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНЫХ РАСПЛАВОВ НА ПРИМЕРАХ ЧИСЛЕННОГО И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО БЕНЧМАРКОВ

С. М. Ганина, В. П. Гинкин, О. Н. Буденкова, Б. Саади, Л. Ашани, И. Фотрель
(ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск (Россия),
ИЦНИ-СИМАП-ЭПМ, НПИ, г. Гренобль (Франция),
Университет им. А. Телиджи, г. Лагуат (Алжир),
Университет им. Х. Лакдара, г. Ватна (Алжир))

Выполнено компьютерное моделирование численного двумерного и экспериментального квазидвумерного бенчмарков по кристаллизации бинарных сплавов.

Приведено сравнение результатов расчетов численного бенчмарка, выполненных с помощью программ FLUENT и GIGAN. Получены качественно и количественно похожие результаты для сегрегации примеси.

Представлены результаты численного моделирования экспериментов по перекристаллизации прямоугольного слитка композиции *олово—свинец* Sn-3%Pb. Расчеты выполнены с помощью программы GIGAN по двум моделям затвердевания: равновесной и неравновесной. Сравнение экспериментальных данных и результатов расчета показало, что эволюция температурного поля под действием естественной конвекции и распределение примеси в закристаллизованном образце лучше описываются неравновесной моделью кристаллизации.

Ключевые слова: кристаллизация, бинарный расплав, макросегрегация, фазовая диаграмма, двухфазная зона, конвекция, тепломассоперенос, переход от столбчатой макроструктуры к равноосной (СЕТ).

Введение

Конвекция играет очень важную роль при кристаллизации сплавов. Ее интенсивность и структура течения влияют на тепло- и массоперенос в охлаждаемой смеси, а следовательно, на макроструктуру формирующейся твердой фазы и распределение в ней примеси [1, 2]. Моделирование процессов переноса при кристаллизации сплавов представляет собой сложную задачу, поскольку граница между твердой и жидкой фазами быстро теряет устойчивость и в дальнейшем твердая фаза кристаллизуется в дендритной форме [3]. Таким образом, при моделировании процесса кристаллизации в масштабе образца невозможно точно учитывать явления, происходящие вблизи границы между твердой фазой и расплавом. Однако именно на этой границе происходит перераспределение примеси при фа-

зовом переходе, а также она является источником тепла.

Для того чтобы преодолеть эту сложную ситуацию и учесть микромасштабные процессы при макромасштабном моделировании, в последние десятилетия были предложены несколько физических моделей [4–9]. В некоторых из них дендритный рост рассматривается в равновесном приближении, но существуют и макромоделли, в которых учитываются концентрационное переохлаждение и кинетика роста дендритов. Классификация моделей по вышеперечисленным признакам предложена в работах [10, 11], но существуют и более подробные классификации.

Влияние конвекции, проявляющееся в формировании макросегрегации в масштабе всего образца, а также в виде узких *каналов* и локализованных неоднородностей (мезосегрегации) было продемонстрировано с помощью обоих типов

моделей. Многочисленные работы по кристаллизации бинарных расплавов с учетом конвекции были выполнены для двумерных [5, 12, 13] и трехмерных [14] случаев, существует несколько расчетов по многокомпонентным смесям для двумерных [15–18] и трехмерных [19] областей (см. также ссылки в указанных работах).

При моделировании кристаллизации сплавов с использованием равновесного подхода большое внимание уделялось изучению влияния на сегрегацию таких параметров, как коэффициент фильтрации в двухфазной зоне [11, 13], коэффициент распределения (захвата) примеси [15, 16] и диффузия в твердой фазе. В то же время влияние самой численной реализации физических моделей исследовалось редко. Пример такого исследования представлен в работе [11] по кристаллизации бинарного расплава Sn-5\%Pb^1 , где показано влияние пространственной дискретизации макроуравнений на распределение примеси в закристаллизованном образце. При использовании расчетной модели, реализованной с помощью метода конечных элементов, в закристаллизованном образце была обнаружена только монотонная макросегрегация. Однако при использовании дискретизации, основанной на конечных объемах, на аналогичное монотонное распределение наложились локальные неоднородности примеси в виде каналов. В работе [20] было показано, что размер и положение каналов зависят от численной аппроксимации усредненной по объему фазовой доли.

В работе [21] был предложен численный бенчмарк для моделирования процесса теплопереноса при кристаллизации бинарного расплава Sn-10\%Pb . Цель бенчмарка — сравнение полученных при помощи различных программ решений заданной системы уравнений, основанной на двухфазном равновесном подходе при описании процесса кристаллизации бинарного расплава. Этот подход был сформулирован с использованием теории смеси [4], а позже переформулирован с использованием методики объемного усреднения [5]. Полная система основных макроуравнений и замыкающие соотношения приведены в работах [1, 12, 13–18] и частично в работах [22, 23].

Расчеты численного бенчмарка [21] были частично представлены в работе [24]. В настоящей работе они выполнены по двум различным про-

граммам — GIGAN и FLUENT с использованием равновесной модели. Результаты этих расчетов приводятся в разд. 3 настоящей работы. Они показали хорошее согласие полученных по двум программам результатов.

Затем было выполнено моделирование экспериментов по перекристаллизации прямоугольного слитка композиции *олово-свинец* Sn-3\%Pb , описанных в работе [25], а также кратко в разд. 2 данной работы. Следует отметить, что к настоящему времени проведено много экспериментов по кристаллизации расплавов, однако в большинстве из них не хватает тех или иных данных, необходимых для моделирования и последующего сравнения расчетных и экспериментальных результатов. Экспериментальным бенчмарком для кристаллизации бинарных расплавов считается эксперимент, опубликованный в [26]. Он состоял в перекристаллизации слитка Sn-5\%Pb в форме параллелепипеда и демонстрировал появление макросегрегации в образце. Однако условия кристаллизации описаны недостаточно точно. Удивительно и то, что в распределении примеси не было обнаружено мезосегрегации, хотя ее наблюдали практически во всех лабораторных экспериментах [27–31]. В работе [25] представлены новые эксперименты по кристаллизации сплава *олово-свинец*, сопровождаемые данными, полученными как в результате процесса кристаллизации, так и при анализе закристаллизованного образца.

Расчеты экспериментального бенчмарка выполнены с помощью программы GIGAN по двум моделям — равновесной и неравновесной — и представлены в разд. 6. В равновесной модели предполагается, что температура в каждой точке двухфазной области равна температуре *ликвидус*. В неравновесной модели предполагается, что доля жидкой фазы в двухфазной области квадратично зависит от температуры.

1. Математические модели

Моделирование задачи кристаллизации требует совместного решения уравнений сохранения массы, момента, энергии и концентрации с учетом фазовых переходов в системе. Чтобы правильно (с точки зрения физики) осуществить переход от законов сохранения в микромасштабе к законам сохранения в макромасштабе используются усредняющие процедуры с применением характеристической фазовой функции [32]. Окончательный вид системы макроscopicких

¹Здесь и далее в процентах выражена массовая доля примеси.

уравнений зависит от количества фаз, которые следует учесть. Замыкают систему уравнений дополнительные соотношения для интерпретации фазового перехода.

В настоящей работе рассмотрены две математические модели — равновесная и неравновесная. Эти модели описываются в основном одними и теми же макроскопическими уравнениями, за исключением замыкающих соотношений.

В обеих математических моделях рассматривается эволюция двух фаз (твердой s и жидкой l). Так как предполагается столбчатая кристаллизация, твердая фаза неподвижна в течение процесса. Физические свойства сплавов, а именно плотность ρ , удельная теплоемкость c_p , коэффициент теплопроводности κ , полагаются постоянными для обеих фаз. Используются следующие макроскопические уравнения, полученные усреднением по объему микроскопических уравнений:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{\rho}{\varepsilon_l} (\nabla \mathbf{V}) \mathbf{V} = \\ = \nabla (\mu \nabla \mathbf{V}) - \varepsilon_l \nabla p - \frac{\mu \varepsilon_l}{K} \mathbf{V} + \varepsilon_l \tilde{\rho} \vec{g}; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\nabla \mathbf{V} = 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho \langle h \rangle}{\partial t} + \nabla (\rho c_p T) \mathbf{V} - \nabla (\kappa \nabla T) = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \nabla C_l \mathbf{V} - \nabla (D \nabla C_l) = 0. \quad (4)$$

В уравнениях (1), (2) ε_l и ε_s — объемные доли жидкой и твердой фаз: $\varepsilon_l + \varepsilon_s = 1$; $\mathbf{V} = \varepsilon_l \mathbf{v}_l$ — скорость фильтрации, \mathbf{v}_l — истинная скорость жидкой фазы; μ — динамическая вязкость; p — давление. Проницаемость K двухфазной зоны изотропна и определяется через расстояние λ_2 между вторичными ветвями дендритов [11]:

$$K = \frac{\lambda_2^2 \varepsilon_l^3}{180 (1 - \varepsilon_l)^2}.$$

Плотность $\tilde{\rho}$ в уравнении моментов для составляющей силы гравитации определяется по Бусинеску:

$$\tilde{\rho} = \rho \left[1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_C (C_l - C_{l,0}) \right],$$

где β_T , β_C — температурный и концентрационный коэффициенты расширения соответственно; ρ , T_0 , $C_{l,0}$ — исходные значения плотности, температуры, концентрации в жидкой фазе.

В уравнении (3) T — термодинамическая температура; $\langle h \rangle = c_p (T - T_e) + \varepsilon_l L$ — энтальпия в

двухфазной зоне, L — скрытая теплота, T_e — температура эвтектики.

В уравнении (4) $\langle C \rangle = \varepsilon_l C_l + \varepsilon_s C_s$ — средняя концентрация примеси, где C_l и C_s — концентрации примеси в жидкой и твердой фазе соответственно; $D = \varepsilon_l D_l + \varepsilon_s D_s$ — коэффициент диффузии примеси (равен нулю в случае численного бенчмарка [21]).

На границе фазового перехода предполагается мгновенный перенос массы [3]:

$$C_s = k_0 C_l, \quad (5)$$

где k_0 — коэффициент захвата примеси. Еще одно широко используемое допущение, известное как правило Шейла [3], заключается в предположении отсутствия диффузии в твердой фазе.

Предполагается линейная зависимость температуры ликвидус T_{liq} от концентрации примеси в жидкой фазе:

$$T_{liq} = T_m + m C_l,$$

где T_m — температура плавления чистого вещества, m — наклон линии ликвидуса.

В модели кристаллизации, предложенной для численного бенчмарка в работе [21], предполагается, что температура в любой точке двухфазной зоны равна температуре ликвидус: $T = T_{liq}$. Используя (5), выражение для энтальпии $\langle h \rangle = c_p (T - T_e) + \varepsilon_l L$ и полагая $T_e = 0$, получаем выражение для определения доли жидкой фазы в двухфазной зоне через энтальпию и концентрацию примеси в жидкой фазе:

$$\varepsilon_l = \frac{\langle h \rangle - c_p (T_m + m C_l)}{L}. \quad (6)$$

Модель, в которой доля жидкой фазы (или пористость) задается выражением (6), будем называть *равновесной* моделью затвердевания.

В модели затвердевания, предложенной в работе [33], температура ликвидус по-прежнему определяется из линеаризованной фазовой диаграммы $T_{liq} = T_m + m C_l$, но внутри двухфазной зоны температура не равна температуре ликвидус. Вместо этого предполагается, что доля жидкой фазы в пределах изменения температуры $T_e \leq T \leq T_{liq}$ квадратично зависит от температуры:

$$\varepsilon_l = \left(\frac{T - T_e}{T_{liq} - T_e} \right)^2, \quad T_e \leq T \leq T_{liq}.$$

Полагая для простоты $T_e = 0$, получаем

$$\varepsilon_l = \begin{cases} 0, & T < 0; \\ \left(\frac{T}{T_{liq}}\right)^2, & 0 \leq T \leq T_{liq}; \\ 1, & T > T_{liq}. \end{cases} \quad (7)$$

Модель, в которой пористость доли жидкой фазы задается выражением (7), будем называть *неравновесной* моделью затвердевания.

2. Реализация моделей в программных комплексах GIGAN и FLUENT

Программа GIGAN [34] является многоцелевым программным комплексом, разработанным в ГНЦ РФ-ФЭИ. В комплексе GIGAN для аппроксимации уравнений (1)–(4) используется метод Патанкара–Сполдинга [35] и неявная временная схема первого порядка точности. В основу алгоритма GIGAN положено исключение из уравнений (1), (3), (4) конвективных членов с помощью экспоненциального преобразования (идея метода описана в работе [36]) и использование интегрального метода дискретизации полученных диффузионных уравнений. Нелинейные системы уравнений линеаризуются и решаются неявным методом установления. Линеаризованные системы конечно-разностных уравнений на каждом шаге по времени решаются итерационным методом неполной факторизации. Переход к следующему шагу по времени происходит, если достигнута заданная точность вычислений по каждой переменной. Полное описание алгоритма можно найти в работе [37].

В коммерческой программе ANSYS/FLUENT для пространственной дискретизации уравнений используется метод контрольных объемов, где значения переменных определяются в центрах ячеек расчетной сетки. При этом значения переменных на гранях ячеек, которые требуются для вычисления конвективных членов в уравнениях переноса, интерполируются определенным образом из центров ячеек. В представленных расчетах для этой интерполяции использовалась схема *вверх по потоку* второго порядка. Для дискретизации уравнений по времени использовалась неявная схема первого порядка. Из нескольких многофазных моделей, предложенных в пакете FLUENT, была выбрана двухфазная модель Эйлера, подробное описание которой

дано в документации к программному обеспечению [38].

3. Результаты расчетов численного бенчмарка

Для верификации программного комплекса GIGAN были выполнены расчеты численного бенчмарка из работы [21] по модели, основанной на равновесном подходе. Моделирование численного бенчмарка было выполнено для двумерной прямоугольной области 10×6 см, расположенной вертикально, так что вектор гравитации направлен параллельно ее короткой стороне. В начальном состоянии область заполнена однородным расплавом Sn-10%Pb при температуре T_0 , равной температуре ликвидус $T_{l,0}$ при указанной концентрации. Верхняя и нижняя стенки термически изолированы. Кристаллизация происходит за счет конвективного теплообмена боковых стенок с окружающей средой, температура которой T_{env} постоянна и равна 300 К. Коэффициент теплоотдачи стенок равен $h = 400 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$.

Моделирование выполнено по программам GIGAN и FLUENT для нескольких расчетных сеток; здесь представлены результаты для двух из них: 150×180 и 200×240 узлов. Результаты расчетов, полученные для более грубых сеток, а также более подробное описание модели численного бенчмарка представлены ранее в работе [24].

На рис. 1 приведены зависимости скорости конвективного течения от времени в трех контрольных точках внутри области кристаллизации, указанных в работе [24]. Тепловая конвекция возникает сразу же после начала процесса кристаллизации вследствие появления градиента температуры у охлаждаемой границы. Однако ее интенсивность быстро затухает благодаря уменьшению доли жидкой фазы и сглаживанию температурных градиентов. Кроме того, из-за оттеснения свинца в жидкую фазу в расплаве возникает концентрационная конвекция, которая противодействует тепловой. Уже через 20 с после начала кристаллизации скорости конвективных потоков не превышают 2–3 мм/с и в дальнейшем быстро затухают с осцилляциями (см. рис. 1). Периоды осцилляций скорости, полученные с использованием программ GIGAN и FLUENT, практически одинаковы.

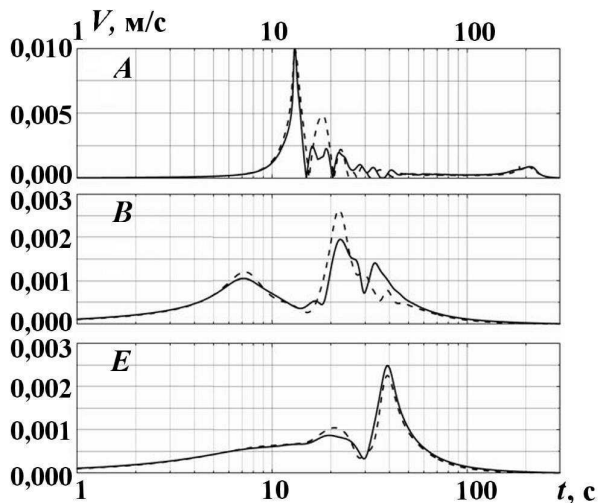


Рис. 1. Эволюция скорости конвективного течения в трех точках (*A*, *B*, *E* — см. [24]) внутри области кристаллизации, сетка 200×240 : - - - расчет по GIGAN; — — расчет по FLUENT

На рис. 2, 3 представлены результаты моделирования, полученные по программам GIGAN и FLUENT после 120 с охлаждения. Результаты показаны для сеток 150×180 (см. рис. 2 *a, б* и рис. 3 *a, б*) и 200×240 (см. рис. 2 *в, г* и рис. 3 *в, г*), вертикальная ось на графиках соответствует оси симметрии.

При кристаллизации SnPb более тяжелый компонент — свинец — вытесняется на границе фазового перехода в жидкую фазу и движется вниз в пределах двухфазной зоны, граница которой, в свою очередь, перемещается от охлаждаемых стенок к центру области. Соответственно в чистом расплаве возникает компенсационное течение, которое захватывает оттесненный свинец в нижней части области и перемещает его по низу к центру, а затем и вверх вдоль оси симметрии (см. рис. 2, *a*, 3, *a*). В целом такое конвективное течение приводит к уменьшению концентрации

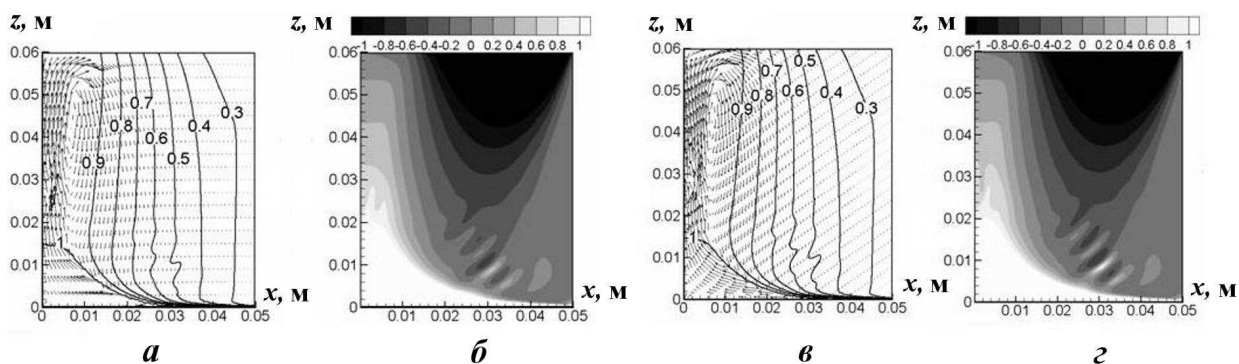


Рис. 2. Результаты, полученные по равновесной модели в программе GIGAN в момент времени $t = 120$ с после начала кристаллизации: *a, б* — сетка 150×180 ; *в, г* — сетка 200×240 ; *a, в* — поля скоростей конвективных течений (в мм/с), наложенные на распределения долей жидкой фазы (сплошные линии); *б, г* — распределение концентрации свинца относительно начального значения

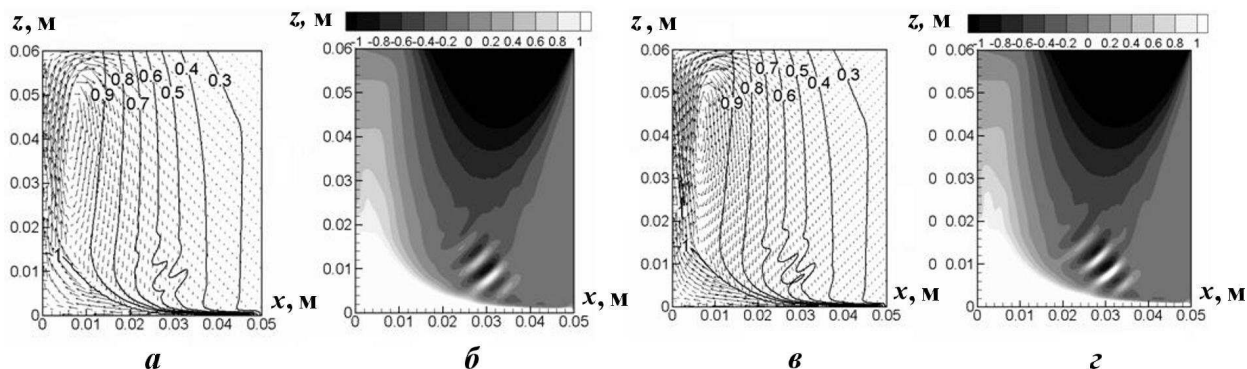


Рис. 3. Результаты, полученные по равновесной модели в программе FLUENT в момент времени $t = 120$ с после начала кристаллизации: *a, б* — сетка 150×180 ; *в, г* — сетка 200×240 ; *a, в* — поля скоростей конвективных течений (в мм/с), наложенные на распределения долей жидкой фазы (сплошные линии); *б, г* — распределение концентрации свинца относительно начального значения

свинца в верхней части области, расположенной ближе к охлаждаемой стенке, и накоплению свинца в форме холма в центральной части области.

Полученные по двум программам результаты моделирования макросегрегации и конвективного теплопереноса в целом хорошо согласуются друг с другом. Однако полученные по этим программам места расположения каналов и их форма различаются. Каналы, полученные по программе FLUENT, более резко выражены, чем полученные по программе GIGAN. Это различие может быть объяснено разными схемами аппроксимации конвективных членов уравнений теплопереноса в моделях, реализованных в программах GIGAN и FLUENT.

4. Эксперименты по кристаллизации бинарных расплавов Sn-3%Pb

Экспериментальная установка, более подробно описанная в [25], состояла из следующих частей: тигель из нержавеющей стали с впаянными термопарами и системой измерения температуры, два теплообменника и генератор магнитного поля. Система была помещена в теплоизолированную емкость с пониженным атмосферным давлением. Таким образом, нерегулируемый конвективный и радиационный теплоотвод в системе был сведен к минимуму.

В начале каждого эксперимента слиток бинарного сплава Sn-3%Pb помещался в прямоугольный тигель, размер которого $100 \times 60 \times 10$ мм

(рис. 4), толщина стенок тигля 0,5 мм. Все стенки, за исключением двух вертикальных торцевых, были практически теплоизолированы во время всего процесса. Температурный перепад ΔT между двумя теплообменниками и скорость охлаждения CR изменялись от эксперимента к эксперименту. Решетка из пятидесяти термопар ($L1-L50$ на рис. 4), размещенных на боковой стенке тигля, использовалась для регистрации мгновенного распределения температурного поля, что делалось каждую секунду в течение всего процесса кристаллизации. Последующая обработка измерений позволила получить эволюцию температурного поля под действием естественной конвекции и оценить поле скоростей. Также была проанализирована макроструктура затвердевшего слитка и распределение в нем примеси.

Каждый эксперимент состоял из пяти стадий, проиллюстрированных на рис. 5: 1 — плавление; 2 — выдержка при постоянной температуре и под действием электромагнитного поля, чтобы гомогенизировать раствор и получить равномерную температуру; 3 — задание среднего теплового градиента; 4 — вторая стадия стабилизации температурного поля; 5 — кристаллизация.

Для эксперимента, проиллюстрированного на рис. 5, приложенный перепад температур на теплообменниках составлял $\Delta T = 40$ К, скорость охлаждения $CR = 0,03$ К/с. Обозначения $FR3$, $FL3$, $L22$, $L25$ и $L29$ на рис. 5 относятся к термопарам, расположенным вертикально на стенках теплообменников и вдоль горизонтальной средней линии соответственно (см. рис. 4).



Рис. 4. Схематическое изображение тигля с двумя теплообменниками на торцах

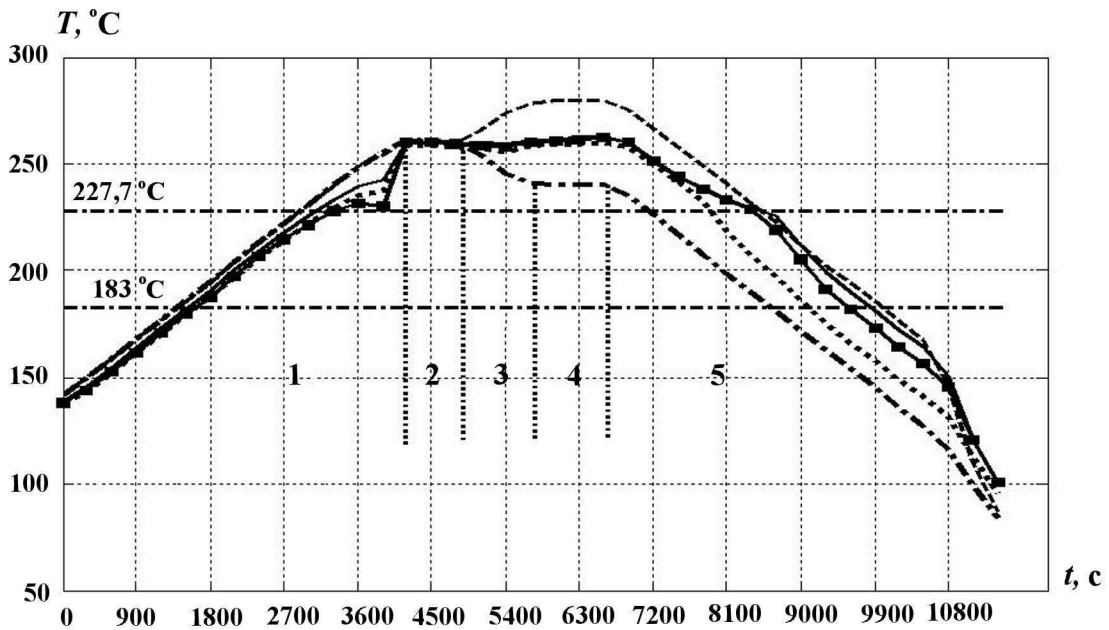


Рис. 5. Температуры, измеренные в процессе затвердевания расплава Sn-3%Pb: — — $L22$; —■— $L25$; — $L29$; — — — — $FR3$; — — — — — $FL3$

Необходимо отметить, что между теплообменниками и торцевыми стенками тигля и далее торцевыми поверхностями образца существовало контактное тепловое сопротивление, которое приводило к уменьшению перепада температур в расплаве относительно измеренного на теплообменниках. Более подробное описание экспериментальной установки и результатов экспериментов приведено в работе [39].

5. Расчетная модель кристаллизации бинарных расплавов

Расчетная модель включает два этапа: 1) установление конвективного потока и температурного поля перед началом кристаллизации; 2) расчет процесса кристаллизации.

На первом этапе сначала задавалось исходное распределение температуры, равное константе, $T_0 = 245^\circ\text{C}$. Это значение приблизительно равно температуре в центре образца к моменту времени $t = 7200\text{ с}$ (см. рис. 5). Затем в начальный момент времени на левой границе температура скачкообразно увеличивалась на 20°C , $T_{left} = T_0 + 20^\circ\text{C}$, а на правой границе уменьшалась на 20°C , $T_{right} = T_0 - 20^\circ\text{C}$, и проводился расчет до установления полей скоростей и температур.

Граничные условия слева и справа имели вид $q_{left} = h_T (T_{left} - T)$; $q_{right} = h_T (T - T_{right})$.

На верхней и нижней границах ставились условия теплоизоляции $q_{top} = q_{bot} = 0$. Теплофизические данные были взяты из работ [21, 25] и приведены в таблице.

Константа h_T в граничных условиях подбиралась таким образом, чтобы разность температур между расплавом и стенками теплообменников составляла приблизительно 5° , и задавалась равной 8000.

На втором этапе задавалось уменьшение во времени температур T_{left} и T_{right} на правой и левой боковых пластинах с постоянной скоростью CR : $T_{right}(t) = T_{right} - CR \cdot t$, $T_{left}(t) = T_{left} - CR \cdot t$, и проводился расчет до полного затвердевания расплава.

Расчеты проводились по программе GIGAN на сетке 100×60 с шагом по времени $\Delta t = 0,005\text{ с}$ для трех значений скорости охлаждения: $CR = 0,02\text{ К/с}$, $CR = 0,03\text{ К/с}$, $CR = 0,04\text{ К/с}$.

6. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов

В результате расчетов первого этапа были получены распределения вектора скорости конвективного течения, температуры и давления перед началом процесса кристаллизации. Установление достигается сравнительно быстро, приблизительно после тридцати секунд, далее поля скоростей и температур практически не меняются.

Физические свойства расплава

Величина	Значение
Теплопроводность для твердой фазы	63 Вт/(м·К)
— " — для жидкой фазы	33 Вт/(м·К)
Теплоемкость для твердой фазы	209 Дж/(кг·К)
— " — для жидкой фазы	243 Дж/(кг·К)
Плотность для твердой фазы	7 840 кг/м ³
— " — для жидкой фазы	7 480 кг/м ³
Скрытая теплота кристаллизации	56 140 Дж/кг
Температура кристаллизации	232 °С
— " — ликвидус	227,7 °С
— " — солидус	183 °С
Коэффициент распределения примеси	0,0656
Динамическая вязкость	$1 \cdot 10^{-3}$ кг/(м·с)
Температурный коэффициент расширения	$6 \cdot 10^{-5}$ К ⁻¹
Концентрационный коэффициент расширения	$-5,3 \cdot 10^{-3}$ (%) ⁻¹
Угол наклона ликвидус	$-1,286$ К (%) ⁻¹
Расстояние между вторичными ветвями дендритов	$6,5 \cdot 10^{-5}$

Максимальное расчетное значение скорости равно $|V_{\max}| \approx 22$ мм/с. В эксперименте же оцененное значение максимальной скорости течения находится в пределах 2—4 мм/с. Следует, однако, отметить, что полученные в расчетах максимальные значения скоростей находятся вблизи внешних границ образца, где экспериментальных оценок не производилось. Внутри области, где оценки скорости течения проводились, значения максимальных расчетных скоростей конвекции не превышают 5 мм/с, что находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Расчеты экспериментов проводились по двум моделям затвердевания — равновесной и неравновесной, описанным выше. На рис. 6 представлены поля температур в моменты времени $t = 0$, $t = 600$ с и $t = 1000$ с после начала затвердевания при скорости охлаждения $CR = 0,03$ К/с, полученные по равновесной модели затвердевания. Расчетные изолинии температур (пунктирные линии) наложены на экспериментальные изолинии из работы [25]. Видно, что имеются существенные различия между экспериментальными и расчетными результатами. Расчетные изотермы даже качественно не воспроизводят экспериментальные кривые.

Иную картину дают расчеты процесса затвердевания по неравновесной модели, результаты которых представлены на рис. 7.

Сравнение результатов показывает, что расчетные изотермы, полученные по неравновесной модели, качественно значительно лучше согла-

суются с экспериментальными изотермами, чем изотермы, полученные по равновесной модели (см. рис. 6), на всем протяжении процесса затвердевания.

На рис. 8 (см. также цветную вкладку) для сравнения приведены расчетные распределения долей жидкой фазы в моменты времени $t = 600$ с и $t = 1000$ с после начала кристаллизации при скорости охлаждения $CR = 0,03$ К/с, полученные по равновесной и неравновесной моделям затвердевания.

Сравнения показали существенные различия в распределениях доли жидкой фазы и в форме фронта кристаллизации, полученных по равновесной и неравновесной моделям. В равновесной модели фронт кристаллизации более плоский, а двухфазная область более узкая, чем в неравновесной.

Линия ликвидус в равновесной модели отстаёт от линии ликвидус в неравновесной модели. Это приводит к возникновению зоны концентрационного переохлаждения при использовании неравновесной модели по сравнению с равновесной. В этой зоне могут спонтанно зарождаться и расти кристаллиты. Если окажется, что доля, занятая кристаллитами, достаточно велика, произойдет остановка фронта столбчатого роста твердой фазы и далее будет происходить кристаллизация с равноосной структурой затвердевшего образца².

²Граница между столбчатой и равноосной структурами слитка, определяющая смену морфологии кристаллизующихся дендритов, имеет обозначение СЕТ.

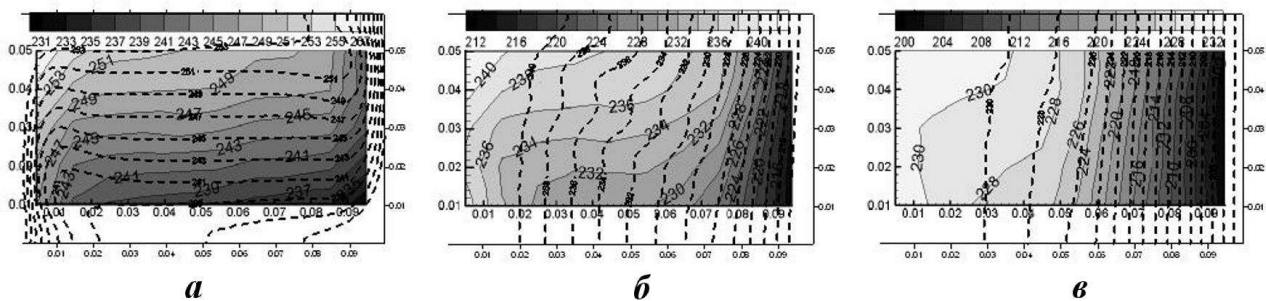


Рис. 6. Поля температур в моменты времени $t = 0$ (а), $t = 600$ с (б), $t = 1000$ с (в) после начала кристаллизации при скорости охлаждения $CR = 0,03$ К/с, полученные по равновесной модели затвердевания

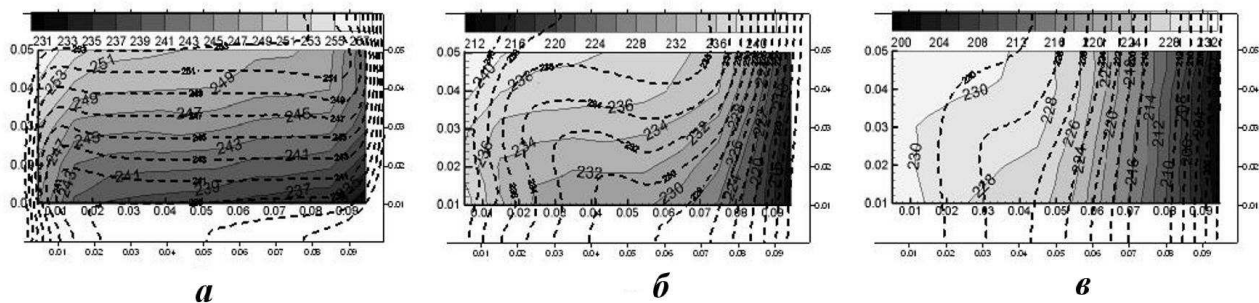


Рис. 7. Поля температур в моменты времени $t = 0$ (а), $t = 600$ с (б), $t = 1000$ с (в) после начала кристаллизации при скорости охлаждения $CR = 0,03$ К/с, полученные по неравновесной модели затвердевания

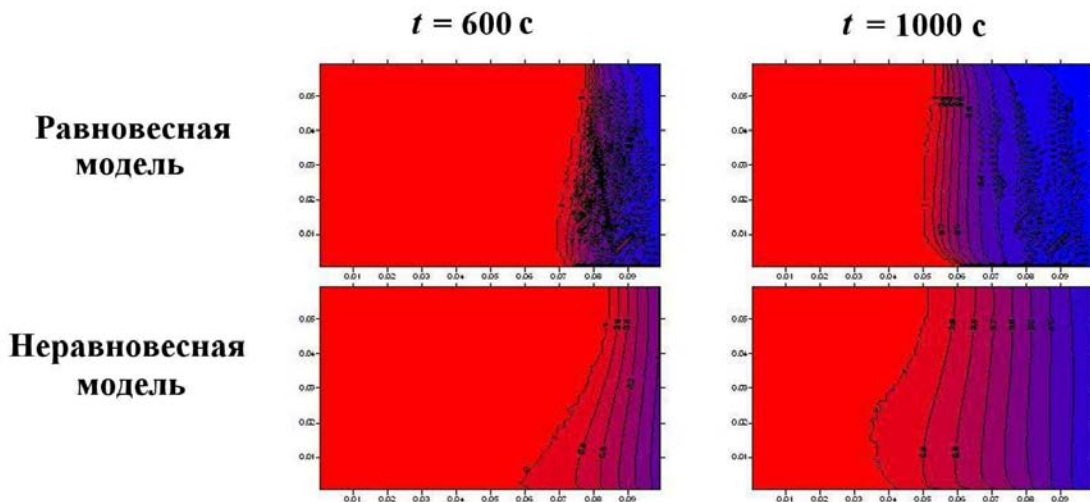


Рис. 8. Распределения долей жидкой фазы в разные моменты времени после начала кристаллизации при скорости охлаждения $CR = 0,03$ К/с

На рис. 9, а приведены экспериментальные данные по измерению распределений примеси, полученные путем рентгеновского анализа для кристаллизации бинарного расплава Sn-3%Pb. Видны каналы в правой части образца. Представлены результаты для трех скоростей охлаждения:

$CR = 0,02$ К/с, $CR = 0,03$ К/с и $CR = 0,04$ К/с. На рис. 9, б, в (см. также цветную вкладку) представлены распределения концентраций примеси, полученные в расчетах по равновесной и неравновесной моделям затвердевания для указанных скоростей охлаждения.

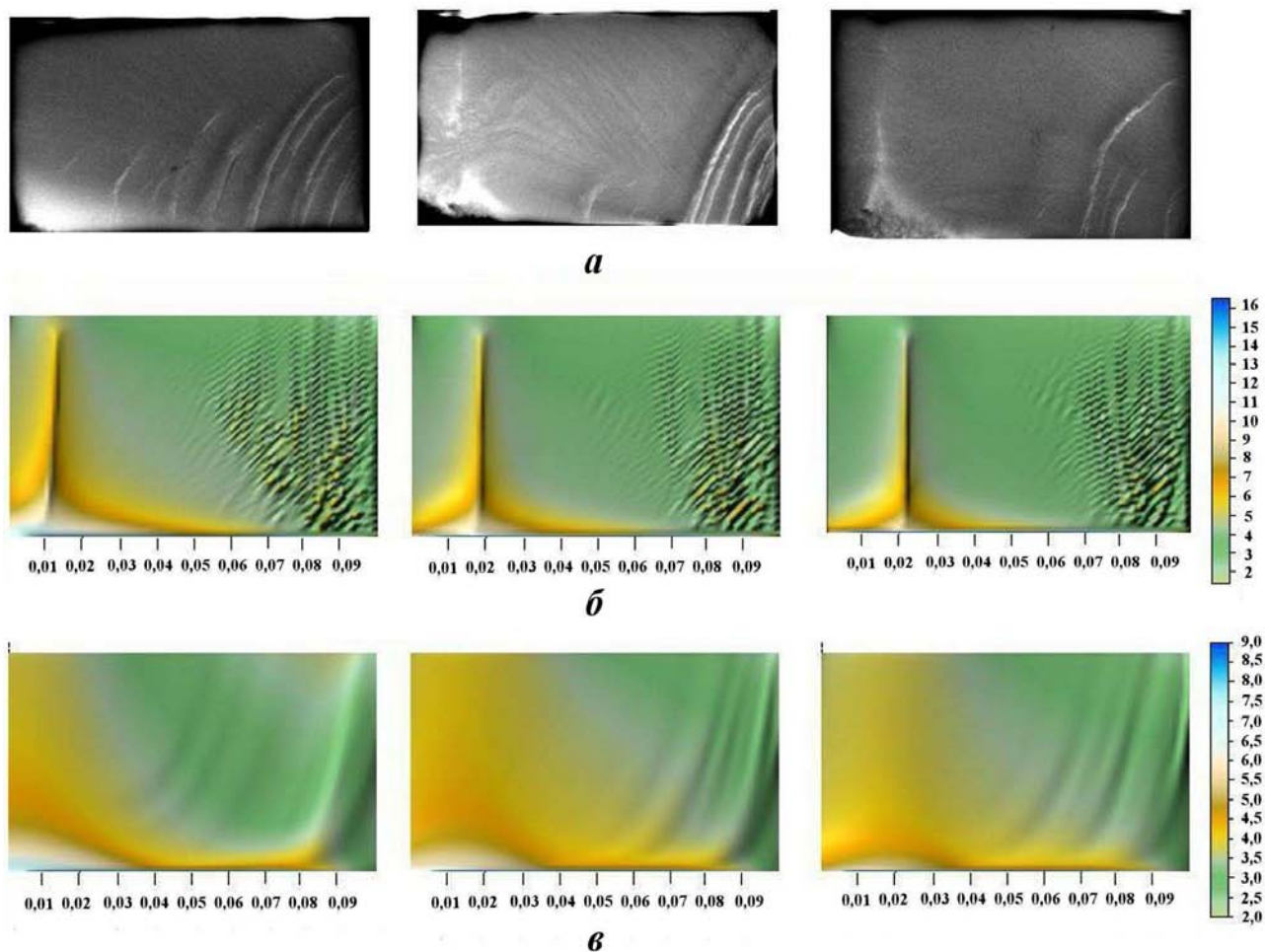


Рис. 9. Распределения примеси Pb, полученные в экспериментах (а) и расчетах по равновесной (б) и неравновесной (в) моделям: слева — $CR = 0,02$ К/с; в центре — $CR = 0,03$ К/с; справа — $CR = 0,04$ К/с

Из сравнения экспериментальных и расчетных распределений концентраций примеси, полученных по равновесной и неравновесной моделям кристаллизации, видно, что обе модели качественно верно описывают эффект макросегрегации примеси. По обеим моделям в правой части образца получены каналы, а в левой нижней части образца получены пики повышенной концентрации примеси. Положение максимума этих пиков зависит от скорости охлаждения: чем ниже скорость охлаждения, тем ближе положение максимума концентрации примеси к левой границе образца.

Однако имеются и существенные различия в результатах, полученных по двум моделям. Во-первых, пики в распределениях концентраций примеси в левой части образца имеют различный характер. В равновесной модели эти пики очень острые, а в неравновесной модели — размазанные, что больше соответствует экспериментальным измерениям. В равновесной модели положе-

ние максимума концентрации примеси смещено вправо по отношению к максимуму концентрации, рассчитанному по неравновесной модели.

На рис. 10 приведены результаты исследования макроструктуры экспериментального образца, полученные в работе [25]. Исследования показали, что кристаллизация в основном имеет столбчатый характер, однако при скоростях охлаждения $CR = 0,03$ К/с и $CR = 0,04$ К/с в левой части образца появляется зона с равноосной структурой. Наклон зерен, сформированных столбчатыми дендритами, свидетельствует о том, что конвективные потоки вдоль фронта кристаллизации были нисходящими.

При неравновесной модели положение максимума концентрации примеси соответствует месту появления зоны с равноосной структурой. При скоростях охлаждения $CR = 0,03$ К/с и $CR = 0,04$ К/с максимум концентрации примеси лежит внутри образца и его положение пример-

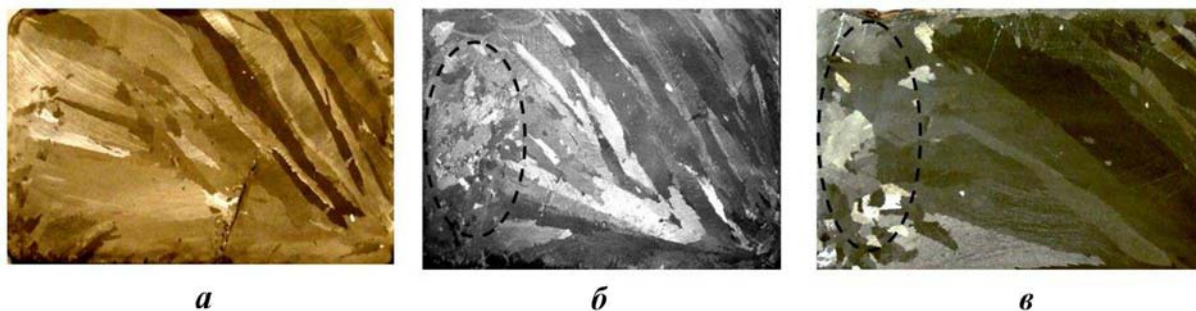


Рис. 10. Макроструктура слитка Sn-3%Pb в среднем сечении образца из работы [25], $\Delta T = 40$ К: а — $CR = 0,02$ К/с; б — $CR = 0,03$ К/с; в — $CR = 0,04$ К/с

но совпадает с экспериментально наблюдаемым положением структурного перехода. При скорости охлаждения $CR = 0,02$ К/с положение максимума концентрации примеси совпадает с левой границей образца, что свидетельствует об отсутствии структурного перехода в образце.

Положение максимума концентрации при расчете по равновесной модели смещено вправо относительно места структурного перехода для всех трех скоростей охлаждения. При наименьшей скорости охлаждения $CR = 0,02$ К/с максимум концентрации примеси лежит внутри образца, а структурного перехода при такой скорости охлаждения экспериментально не наблюдалось.

Таким образом, можно сделать вывод, что по сравнению с равновесной моделью неравновесная модель позволяет более точно предсказывать наличие и место расположения структурного перехода по месту нахождения максимума концентрации примеси.

Заключение

Сравнение результатов моделирования численного бенчмарка по кристаллизации бинарного расплава Sn-5%Pb в прямоугольном двумерном образце по программам GIGAN и FLUENT показало хорошее совпадение. Количественное и качественное различие в результатах расчетов относительно невелико, оно объясняется различием схем аппроксимации конвективных членов в уравнении теплопереноса и уменьшается при переходе к более мелким расчетным сеткам.

Результаты моделирования экспериментального бенчмарка по равновесной и неравновесной моделям показали, что обе модели качественно правильно описывают диффузионно-конвективный теплоперенос при затверде-

вании бинарных расплавов. В то же время количественно результаты расчетов по равновесной и неравновесной моделям значительно различаются. Неопределенность, связанная с неизвестным значением теплового контактного сопротивления на боковых границах образца, не позволяет более точно задать граничные условия по температуре и, следовательно, более точно воспроизвести условия и результаты эксперимента.

Сравнение результатов расчетов по двум моделям кристаллизации с экспериментальными результатами показало, что неравновесная модель затвердевания в целом лучше, чем равновесная модель, описывает конвективный теплоперенос в процессе кристаллизации двухкомпонентных расплавов и может быть использована для предсказания положения СЕТ.

Работа авторов С. М. Ганиной и В. П. Гинкина поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты 12-01-97514 и 10-03-00338).

Список литературы

1. *Fautrelle Y.* // 2nd Asian Workshop on Electromagnetic Processing of Materials. Shenyang (RP Chine). 22–25 May 2005.
2. *Griffiths W. D., McCartney D. G.* // Materials Science & Engineering. 1996. A216. P. 47–60.
3. *Kurz W., Fisher D. J.* Fundamentals of Solidification. Uetikon-Zuerich: Trans Tech Publication, 1998.
4. *Bennon W. D., Incropera F. P.* Int. // J. Heat Mass Transfer. 1987. Vol. 30. P. 2161–2170.
5. *Ni J., Beckermann C.* // Metall. Mat. Trans. B. 1991. Vol. 22. P. 349–361.

6. Wang C. Y., Beckermann C. // Metall. Mat. Trans. A. 1996. Vol. 27. P. 2754–2764.
7. Swaminathan C. R., Voller V. R. // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. Vol. 40. P. 2859–2868.
8. Ciobanas A., Fautrelle Y. // J. Physics D: Applied Physics. 2007. Vol. 40 (12). P. 3733–3762.
9. Rappaz M. // Int. Mater. Rev. 1989. Vol. 34. P. 93–123.
10. Wang C. Y., Beckermann C. // Mat. Sci. Eng. A. 1993. Vol. 171. P. 199–211.
11. Ahmad N., Combeau H., Desbiolles J.-L. et al. // Metall. Mat. Trans. A. 1998. Vol. 29. P. 617–630.
12. Noepfel A., Ciobanas A., Wang X. D. et al. // Metall. Mat. Trans. B. 2010. Vol. 41. P. 193–208.
13. Budenkova O., Noepfel A., Kovács J. et al. // Mat. Sci. Forum. 2010. Vol. 649. P. 269–275.
14. Felicelli S. D., Heinrich J. C., Poirier D. R. // J. Crys Gr. 1998. Vol. 191. P. 879–888.
15. Felicelli S. D., Poirier D. R., Heinrich J. C. // Ibid. 1997. Vol. 177. P. 145–161.
16. Schneider M. C., Beckermann C. // Metall. Mat. Trans. A. 1995. Vol. 26. P. 2373–2338.
17. Ferreira I. L., Voller V. R., Nestler B., Garcia A. // Computational Materials Science. 2009. Vol. 46 (2). P. 358–366.
18. Ebisu Y. // Metall. Mat. Trans. A. 2011. Vol. 42 (2). P. 341–369.
19. Felicelli S. D., Poirier D. R., Heinrich J. C. // Ibid. B. 1998. Vol. 29. P. 847–855.
20. Kumar A., Dussoubs B., Zaloňnik M., Combeau H. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. Vol. 42. P. 105 503 (13pp).
21. Bellet M., Combeau H., Fautrelle Y. et al. // Int. J. of Thermal Sciences. 2009. Vol. 48 (11). P. 2013–2016.
22. Zaloňnik M., Combeau H. // Comp. Mat. Sci. 2010. Vol. 48. P. 1–10.
23. Zaloňnik M., Combeau H. // Ibid. 2010. Vol. 48. P. 11–21.
24. Ганина С. М., Гинкин В. П. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 3. С. 65–72.
25. Hachani L., Saadi B., Wang X. D. et al. // Int. J. Heat Mass Transfer. 2012. Vol. 5. P. 1986–1996.
26. Hebditch D. J., Hunt J. D. // Metallurgical transactions. 1974. Vol. 5. P. 1557–1563.
27. Sarazin J. R., Hellawell A. // Metall. Mat. Trans. A. 1988. Vol. 19. P. 1861–1871.
28. Tewari S. N., Shah R. // Ibid. 1992. Vol. 23. P. 3383–3392.
29. Bergman M. I., Fearn D. R., Bloxham J., Shannon M. C. // Ibid. 1997. Vol. 28. P. 859–866.
30. Quillet G., Ciobanas A., Lehmann P., Fautrelle Y. // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2007. Vol. 50. P. 654–666.
31. Shaw L. H., Beech J., Hickley R. H. // Ironmaking and Steelmaking. 1986. Vol. 13. P. 154–160.
32. Drew D. A., Passman S. L. Theory of the Multicomponent Fluids. NY: Springer-Verlag. 1999.
33. Гинкин В. П., Ганина С. М., Чернов К. Г. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 4. С. 58–65.
34. Ginkin V. P., Ganina S. M. // Proc. 4th Int. Conf. Non-equilibrium Processes in Nozzles and Jets. St.-Petersburg, 2002. P. 159–160.
35. Patankar S. V., J. Spalding D. B. // Heat Mass Transfer. 1972. Vol. 15. P. 1787–1806.
36. Ginkin V. // Proc. 2nd Int. Symp. "Advances in Computational Heat Transfer". Palm Cove, Queensland, Australia. 2001. Vol. 2. P. 1161–1168.
37. Ginkin V., Naumenko O., Zabudko M. et al. // Numerical Heat Transfer. Part B: Fundamentals. 2005. Vol. 47. P. 459–472.
38. ANSYS FLUENT Documentation. <http://www1.ansys.com/customer/default.asp>.
39. Wang X. D., Fautrelle Y. // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2009. Vol. 52. P. 5624–5633.

Статья поступила в редакцию 05.10.11.

УДК 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНСТРУКЦИИ СЕРВЕРНОГО ШКАФА С НАСАДКОЙ, РАВНОРАСПРЕДЕЛЯЮЩЕЙ ВХОДНОЙ ОХЛАЖДАЮЩИЙ ПОТОК

Э. Г. Байков, Ю. Н. Дерюгин, С. А. Лёвкин, С. М. Устинов, А. А. Холостов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Описываются конструктивные особенности и схема охлаждения для новой конструкции серверного шкафа с наклонной насадкой призматической формы, благодаря которой обеспечиваются равномерное распределение входного охлаждающего потока воздуха по всей высоте шкафа и высокая плотность размещения оборудования. Это решение является одной из перспективных разработок в проектах РФЯЦ-ВНИИЭФ по созданию высокопроизводительных вычислительных комплексов.

Рассматривается методика, положенная в основу проведения численного моделирования серверного шкафа с наклонной насадкой при решении задачи теплопереноса в твердотельных конструкциях с учетом конвективного теплообмена, которая реализована в пакете программ ЛОГОС. Представлены результаты численного моделирования и их сравнение с экспериментальными измерениями.

Ключевые слова: теплопроводность, моделирование, неявный метод, метод SIMPLE, энерговыделение, вычислительный сервер, конструктив, суперкомпьютер.

Введение

Быстрорастущие потребности в использовании суперкомпьютерных вычислительных комплексов требуют от разработчиков увеличения плотности размещения оборудования в серверных шкафах, что соответствующим образом приводит к росту тепловой нагрузки. Следовательно, проблема охлаждения устройств становится все более важной при разработке суперкомпьютеров.

Для решения этой проблемы предлагается применить конструкцию серверного шкафа, дополненную наклонной насадкой, способную обеспечить эффективное охлаждение оборудования с помощью охлажденного воздуха и более плотное размещение его компонентов.

В работе описывается методика расчета конвективного теплообмена и распространение тепла в твердотельной конструкции, в частности новой конструкции шкафа с наклонной насадкой, которая реализована в многофункциональном пакете программ ЛОГОС.

Конструкция серверного шкафа с наклонной насадкой

Конструкция шкафа проектировалась с учетом централизованного воздушного охлаждения, которое применяется в машинном зале. Каркас шкафа изготавливается из стального профиля и имеет сварную конструкцию, благодаря чему обладает высокой механической прочностью и жесткостью.

Внешний вид шкафа изображен на рис. 1'. Это типовой серверный шкаф под оборудование 19" (483 мм), но дополненный наклонной насадкой. Высота шкафа — 2 м, что составляет 42 U*.

Наклонная насадка призматической формы выполняет роль канала для подачи холодного воздуха. Передняя стенка шкафа (насадки) выполнена в виде двухстворчатой двери, а задняя имеет перфорацию, обеспечивая беспрепятственный отвод тепла от электронного оборудования за пределы шкафа.

Угол наклона передней плоскости насадки подобран таким образом, чтобы обеспечить равно-

* Юнит (U) — единица измерения количества монтажных мест для оборудования в шкафу, 1 U = 44,45 мм.

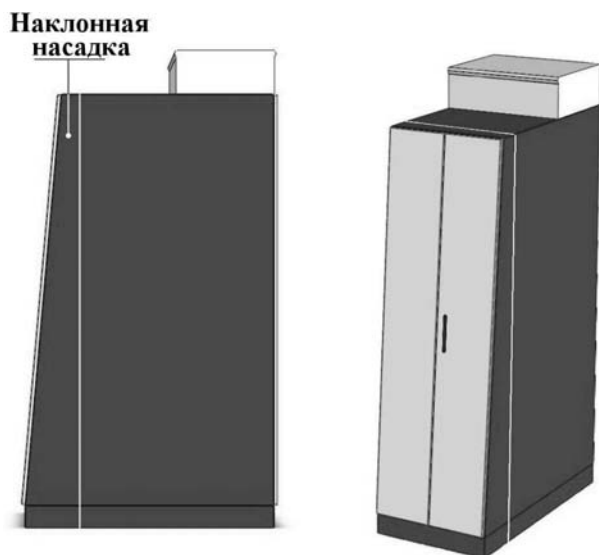


Рис. 1. Серверный шкаф с наклонной насадкой

мерное статическое давление воздуха по высоте насадки [1].

Применение наклонной насадки обеспечивает равномерное распределение холодного потока воздуха по всей высоте шкафа, что позволяет максимально использовать внутреннее пространство шкафа и более плотно устанавливать оборудование. Кроме того, применение насадки способствует более эффективному использованию охлаждающей среды (воздуха), что приводит к сокращению затрат при эксплуатации.

Насадку можно отсоединять от шкафа — это позволяет использовать его как открытую стойку при других схемах воздушного охлаждения.

Схема охлаждения вычислительного комплекса с новой конструкцией серверных шкафов

Правильный выбор схемы охлаждения, позволяющий обеспечить климатические требования эксплуатации, является гарантией надежной работы вычислительного комплекса. Охлаждение устройств осуществляется с помощью охлажденного воздуха, при этом используется принцип сквозного целенаправленного продува. Встроенные вентиляторы сервера засасывают холодный воздух через переднюю стенку, затем, прогоняя его через компоненты, нуждающиеся в охлаждении, выводят наружу через заднюю стенку. Исходя из этого принципа для охлаждения вычислительного комплекса используется система с *изолированным холодным коридором*. В этой системе приняты специальные меры для того, чтобы холодный воздух подавался непосредственно к серверам, в изолированный передний канал шкафа — его роль выполняет наклонная насадка. Таким образом, потоки холодного воздуха не смешиваются с потоками нагретого, отводимого с задней стороны шкафа в пространство машинного зала. Это позволяет добиться эффективно использования системы охлаждения.

По предложенной схеме спроектирован и успешно работает ряд вычислительных комплексов. На рис. 2 представлена схема охлаждения мультипроцессорного комплекса.

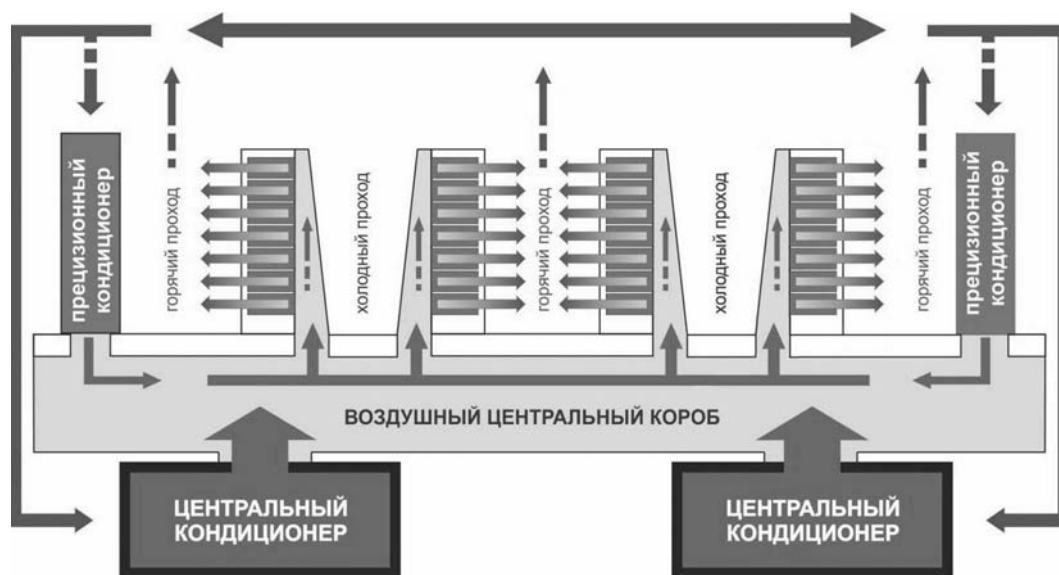


Рис. 2. Схема охлаждения ВЦ

Математическая модель

Математическая модель, используемая для описания конвективного теплообмена, включает уравнения движения несжимаемого вязкого газа в приближении Буссинеска, уравнения $k\varepsilon$ -модели турбулентности и уравнения теплопроводности в твердом теле с учетом заданных источников энерговыделения. Сопряженный теплообмен между твердотельной конструкцией и газовым (воздушным) потоком рассматривается в нестационарной постановке. Начальное распределение параметров воздушного потока определяется из решения стационарной задачи без учета теплообмена с твердотельной конструкцией. В граничные условия для воздушного потока на входе в тракт включаются расход воздуха и углы входа потока. Выходная граница считается *свободной*, на ней нормальные производные величин полагаются равными нулю.

Дискретизация дифференциальных уравнений осуществляется на основе метода расщепления по физическим процессам, метода конечного объема и использования неструктурированных сеток. Система исходных уравнений записывается в дивергентной форме в декартовой системе координат относительно компонент вектора скорости и температуры. Решение на новом временном слое расщепляется на решение уравнений Навье—Стокса и решение уравнения теплопереноса в твердотельной конструкции.

Методика расчета конвективного течения несжимаемого вязкого газа основана на алгоритме SIMPLE [2]. В этом алгоритме согласованное распределение компонент вектора скорости и поля давления, удовлетворяющих уравнению неразрывности, находится методом итераций. Каждая итерация состоит из двух этапов: предиктора и корректора.

На этапе *предиктор* интегрированием уравнений движения вычисляются предварительные значения компонент вектора скорости. На этом этапе уравнения относительно компонент вектора скорости аппроксимируются неявной разностной схемой, в которой градиент давления определяется явно по известному полю давления с предыдущей итерации. Разностные уравнения решаются относительно приращений переменных. Монотонизация градиента давления, входящего в уравнения движения, осуществляется по алгоритму Рхи—Чоу [3].

На этапе *корректор* сначала решается уравнение для давления, которое получается из уравне-

ния неразрывности для скорректированных компонент вектора скорости. По найденному новому полю давления производится коррекция компонент вектора скорости. Для увеличения скорости сходимости этап *корректор* на каждой итерации может выполняться несколько раз.

После определения новых компонент вектора скорости и давления определяются новые значения температуры и параметров турбулентности. В этой схеме влияние вентиляторов на параметры потока описывается заданными источниками объемных сил в области расположения вентиляторов. В отдельных расчетах воспроизводилась работа вентиляторов с учетом их геометрии. Мощность источников определялась по паспортным характеристикам вентиляторов.

Распределение температуры в твердотельной конструкции, включающей платы, находится из решения уравнения теплопроводности с заданными источниками энерговыделения. Мощность источников энерговыделения определялась экспериментально. Уравнение теплопроводности аппроксимировалось неявной разностной схемой на неструктурированной сетке. При моделировании сопряженного теплообмена между конструкцией и воздушным потоком на границе твердого тела (при решении уравнения теплопроводности) ставилось граничное условие первого рода. Температура на границе с воздушным потоком полагалась равной температуре потока. В воздушной области на этой границе задавался тепловой поток, который определялся по распределению температуры в твердом теле.

Расчетные сетки в твердотельной конструкции и в воздушном потоке получались из структурированных сеток, построенных для отдельных блоков конструкции или воздушного потока методом тройной интерполяции по границам области, которые затем объединялись в одну расчетную модель.

Системы алгебраических уравнений, которые получались при неявной аппроксимации уравнений, решались с использованием решателей СЛАУ из библиотеки параллельных решателей PMLP/ParSol [4]. Для визуализации результатов счета использовался программный продукт Scientific View.

Результаты расчетов

С использованием расчетной методики были проведены исследования газодинамических

и тепловых потоков внутри новой конструкции серверного шкафа. Численное моделирование реализовано в пакете программ ЛОГОС [5], предназначенном для решения трехмерных задач гидродинамики и тепломассопереноса в твердотельных конструкциях на *параллельных* ЭВМ. Программа обеспечивает счет в режиме распараллеливания, тем самым позволяя значительно увеличивать размеры моделей и сокращать время решения задачи.

Расчетная модель шкафа с насадкой изображена на рис. 3. Она воспроизводит конструкцию шкафа с 40 серверами. Расход воздуха в сервере моделировался исходя из суммарной производительности вентиляторов.

Источник тепла задавался на наиболее тепловыделяющих элементах сервера: процессорах с радиаторами, модулях памяти и материнской плате. Суммарное тепловыделение шкафа составляло 32 кВт.

Призматическая форма насадки (рис. 4), а именно угол наклона θ , оказывает влияние на равномерность распределения воздушного потока. Для оценки влияния геометрии входного канала шкафа были построены четыре расчетные модели с углами наклона передней плоскости, равными 0, 3, 5 и 7°.

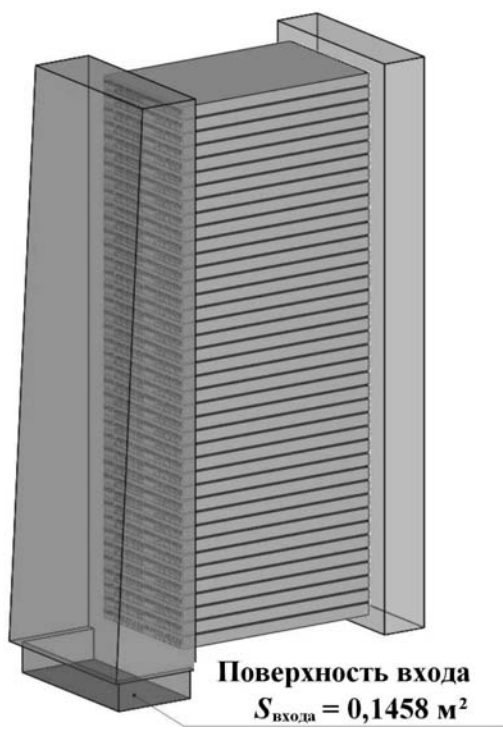


Рис. 3. Расчетная модель серверного шкафа с насадкой

Расчетные модели содержали ~ 40 млн ячеек. Расчеты проводились на параллельных кластерах с числом процессоров 100.

На рис. 5 (см. также цветную вкладку) представлены результаты распределения полей температур в сечении, проходящем через продольную плоскость симметрии шкафа, соответственно для углов наклона передней плоскости входного канала 0, 3, 5 и 7°.

На основе проведенных численных расчетов на рис. 6 (см. также цветную вкладку) представлены кривые распределения объемных расходов охлаждающего потока для указанных углов. Значения расходов воздуха определены в сечении, проходящем через переднюю (или лицевую) поверхность серверов, а именно через его входные отверстия.

При углах наклона, отличных от нулевого, расходы воздуха изменяются в более узком диапазоне. Для модели с нулевым углом диапазон отклонений расходов составляет 1,1 % от расхода холодного воздушного потока на входе в шкаф, а наименьший диапазон отклонений соответствует углу в 5° и составляет 0,6 %.

На рис. 7 (см. также цветную вкладку) представлены расчетные кривые распределения температур на выходе из вычислительных серверов для моделей шкафа с теми же углами наклона передней плоскости насадки.

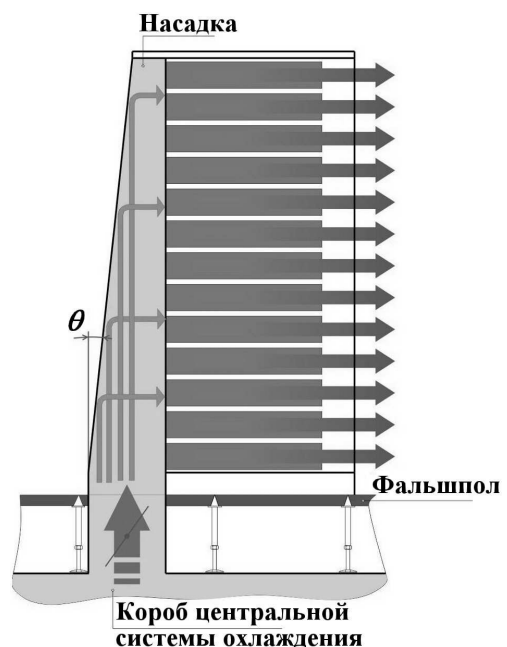


Рис. 4. Схема охлаждения серверного шкафа с насадкой

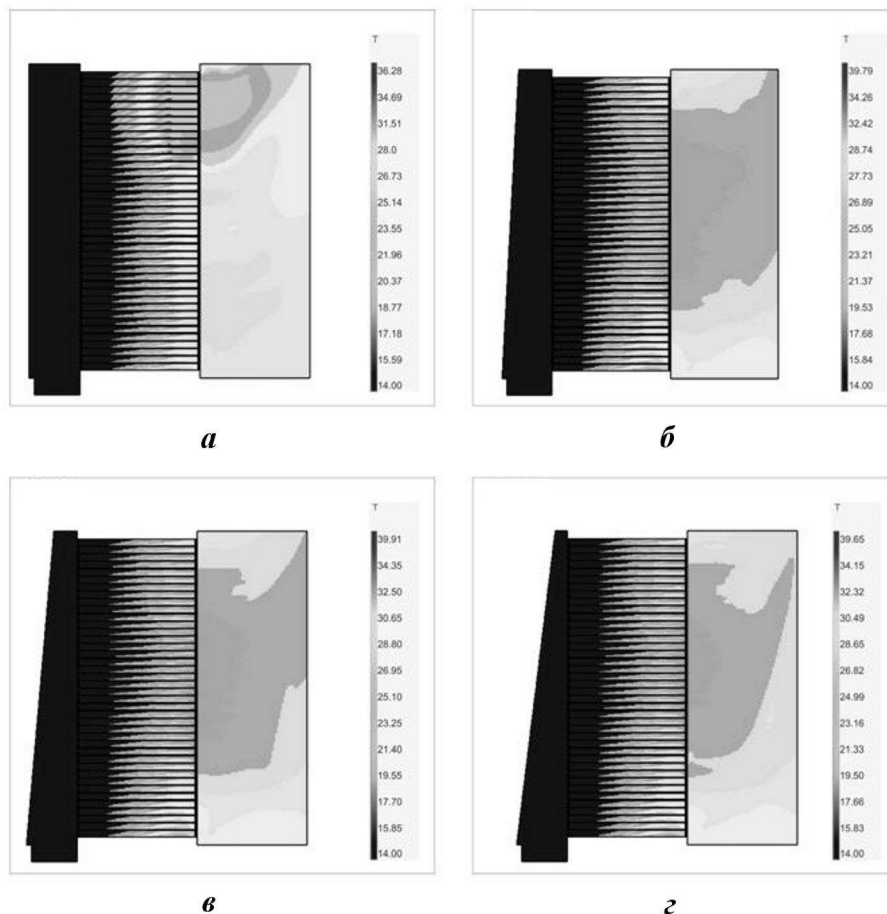


Рис. 5. Распределение полей температур при разных углах наклона насадки: $a - \theta = 0^\circ$; $б - \theta = 3^\circ$; $в - \theta = 5^\circ$; $г - \theta = 7^\circ$

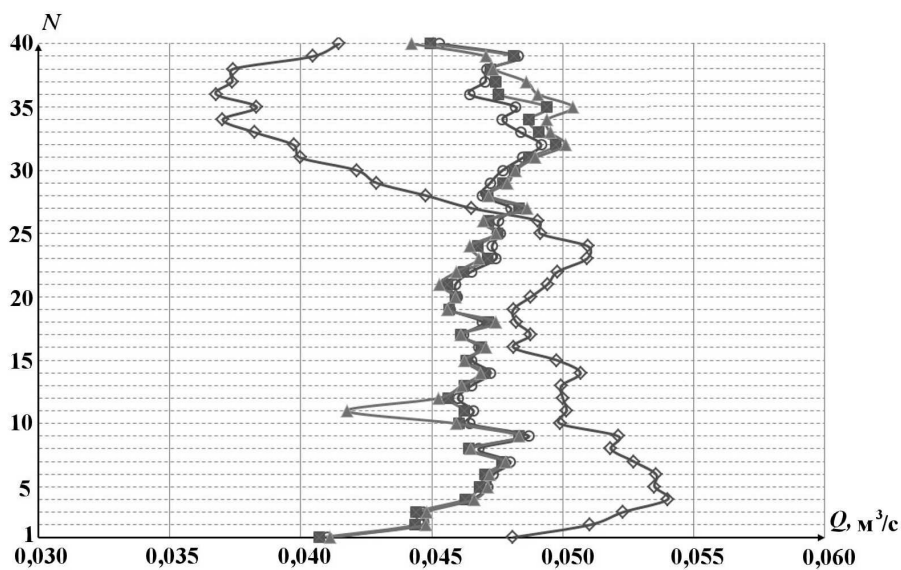


Рис. 6. Объемные расходы охлаждающего потока на выходе из входного канала: $\text{---}\diamond\text{---}$ — $\theta = 0^\circ$; $\text{---}\circ\text{---}$ — $\theta = 3^\circ$; $\text{---}\blacksquare\text{---}$ — $\theta = 5^\circ$; $\text{---}\blacktriangle\text{---}$ — $\theta = 7^\circ$ (N — номера вычислительных серверов)

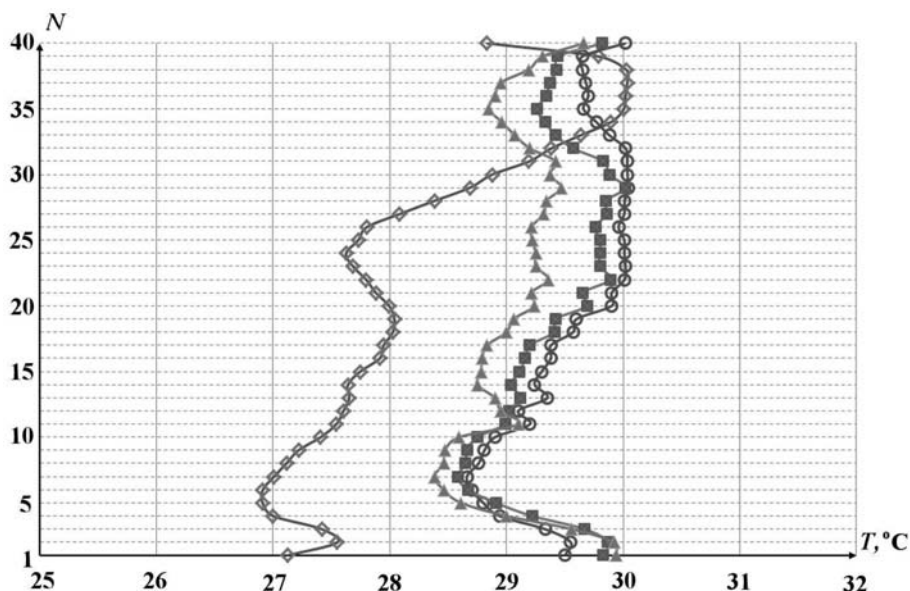


Рис. 7. Температура воздушного потока на выходе из вычислительных серверов: —◇— — $\theta = 0^\circ$; —○— — $\theta = 3^\circ$; —■— — $\theta = 5^\circ$; —▲— — $\theta = 7^\circ$ (N — номера вычислительных серверов)

Анализ результатов показал, что при принятых модели шкафа и исходных данных значения температур нагретого воздуха на выходе из серверов (по всей высоте шкафа) варьируются в диапазоне от 28 до 30 °C, что свидетельствует о сравнительно равномерном распределении воздушного потока по высоте. Кроме того, диапазон температур на выходе из серверов в модели шкафа с углом наклона насадки 3, 5 и 7° более узкий, чем при отсутствии наклона, что тоже свидетельствует о лучшем и равномерном распределении воздушного потока. Таким образом, все серверы находятся в равных условиях.

Нагрев воздушного потока — разница между температурой входного потока в шкаф (14 °C) и максимальной температурой на выходе из вычислительных серверов (30 °C) — составляет 16 °C, что характерно для нормально охлаждаемого шкафа.

Сравнение результатов моделирования с результатами эксперимента

Для сравнения результатов расчета с результатами эксперимента был изготовлен опытный образец серверного шкафа с насадкой, имеющей угол наклона — 5°; в шкаф установили 40 вычислительных серверов. Но смоделировать ситуацию, полностью совпадающую с расчетной, не удалось: в момент проведения эксперимента в наличии имелись серверы с меньшей мощно-

стью энергопотребления — 0,7 кВт (при моделировании — 0,8 кВт).

При использовании международного теста Linpack проводились измерения параметров (скорости и температуры) воздушного потока на входе и выходе из серверов и полной потребляемой мощности серверов. Измерения параметров воздушной среды проводились с помощью датчика метеометра МЭС-200А. Для измерения потребляемой мощности использовался мультиметр FLUKE-123.

Скорость охлаждающего воздушного потока на уровне входа в насадку составляла 9 м/с, температура — 14 °C. Значения температур на выходе из серверов находились возле отметки 28 °C. Потребляемая мощность не превышала 16,8 кВт.

В связи с изменением исходных данных был проведен дополнительный численный расчет. Сравнение экспериментальных и расчетных температур на выходе из серверов представлено на рис. 8.

Температурные значения, полученные в результате численного моделирования, согласуются с экспериментально измеренными данными, что подтверждает равномерность распределения холодного потока воздуха по всей высоте серверного шкафа. А имеющиеся отклонения обусловлены тем, что процессоры в серверах при одинаковой счетной нагрузке (тест Linpack) имеют разные тепловыделения вследствие различных технологических параметров кристаллов.

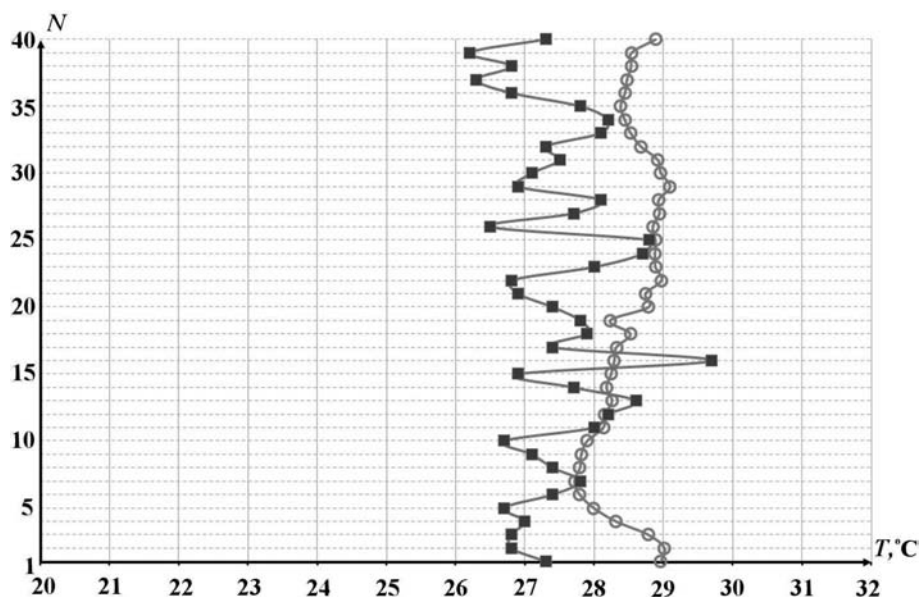


Рис. 8. Расчетные и экспериментальные значения температуры воздушного потока на выходе из вычислительных серверов: —○— — расчет; —■— — эксперимент

Заключение

Представим основные результаты расчета:

1. Разработанная методика расчета позволяет с удовлетворительной точностью описывать течения газодинамических и тепловых потоков внутри конструктивных элементов мультипроцессорной системы, в частности, внутри новой конструкции серверного шкафа.
2. На основании анализа результатов предложена новая конструкция шкафа, дополненная наклонной насадкой, применение которой при заданных исходных данных позволяет равномерно распределять охлаждающий поток по всей высоте шкафа, т. е. для всего оборудования обеспечивается необходимый температурный режим. В дополнение к этому обеспечивается более плотное размещение компонентов в пространстве шкафа при тех же занимаемых площадях.

2. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоиздат, 1984.

3. Рхи С. М., Чоу У. Л. Численный расчет турбулентного обтекания профиля с отрывом у задней кромки // Аэрокосмическая техника. 1984. Т. 2, № 7. С. 33—43.

4. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Бондаренко Ю. А. и др. Библиотека решателей разреженных систем // Труды ВНИИЭФ. 2004. Вып. 7. С. 80—95.

5. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К. и др. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на суперЭВМ: базовые технологии и алгоритмы // XII Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование": Саров, 11—15 октября 2010 г. Тез. докл. С. 53.

Список литературы

1. Талиев В. Н. Аэродинамика вентиляции: Учеб. пособие для вузов. М.: Стройиздат, 1979.

Статья поступила в редакцию 24.10.11.

УДК 519.6

АДАПТИВНАЯ СИСТЕМА МАРШРУТИЗАЦИИ ДЛЯ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ СИСТЕМЫ МЕЖПРОЦЕССОРНЫХ ОБМЕНОВ СМПО-10G

В. Г. Басалов, В. М. Вялухин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Представлен результат работ по созданию алгоритмов адаптивной системы маршрутизации для отечественной системы межпроцессорного обмена СМПО-10G. Приводится обоснование выбора локальной адаптивной маршрутизации в качестве оптимальной для СМПО-10G. Описываются разработанные механизмы инициализации коммуникационной среды и алгоритм маршрутизации сообщений. Детализирован алгоритм выбора оптимального выходного порта коммутатора при передаче сообщения. Описывается механизм организации ширококвещательных обменов для СМПО-10G.

Ключевые слова: мультипроцессорная вычислительная система, система межпроцессорного обмена, СМПО-10G, топология коммуникационной среды, локальная адаптивная маршрутизация, механизм ширококвещания.

Введение

Система межпроцессорного обмена СМПО-10G является коммуникационной сетью и предназначена для построения мультипроцессорных систем. Посредством сети реализуется объединение вычислительных узлов в единую вычислительную систему (ВС) и обмен информацией между ними. Областью применения СМПО-10G являются ВС разного уровня производительности: от компактных суперЭВМ до больших систем, состоящих из тысяч вычислительных узлов.

Одной из ключевых частей, входящих в коммуникационное программное обеспечение СМПО-10G, является система маршрутизации, которая выполняет функции по инициализации коммуникационной сети, ее активации и вычислению оптимальных маршрутов передачи информации между вычислительными модулями (ВМ).

Требования, предъявляемые к системе маршрутизации современного уровня, очень жесткие. Она должна обрабатывать любые изменения топологии коммуникационной сети без внешнего вмешательства, гарантируя бесперебойное функционирование ВС. Дополнительная нагрузка, вносимая системой маршрутизации в комму-

никационную сеть ВС при ее обнаружении, инициализации, активации и поддержании, должна быть минимизирована. Алгоритмы маршрутизации, реализованные в ней, должны обеспечивать передачу сообщений между узлами коммуникационной сети ВС по кратчайшему пути, избегая ситуаций *взаимных блокировок** при обмене сообщениями.

Одним из сложных и сильно нагружающих сеть видов обменов являются коллективные операции. К ним, в частности, относится операция ширококвещательного обмена. Операции ширококвещания на уровне MPI-приложений [1] соответствует операция Broadcast. Эта операция является одним из элементов в реализации алгоритмов ряда других коллективных операций MPI (All_gether, All_reduce, barrier), активно используемых в приложениях, разрабатываемых в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Масштабирование *параллельного* вычислительного комплекса практически не приводит к

* *Взаимной блокировкой*, или *дедлоком* (англ. deadlock), называют ситуацию, при которой группа пакетов в сети не может продолжить движение из-за ожидания освобождения ресурсов, занятых самими этими пакетами. Если такая ситуация однажды возникла, то вся сеть или ее часть теряет способность передавать данные.

ухудшению времени выполнения двухточечных обменов, но существенно сказывается на времени выполнения коллективных обменов. Алгоритмы коллективных операций можно реализовывать либо с использованием последовательности двухточечных обменов, возлагая основную нагрузку на коммуникационное программное обеспечение вычислительных узлов, либо передать выполнение этих операций аппаратуре коммуникационной сети, что значительно повысит их эффективность. Поэтому система маршрутизации СМПО-10G должна обеспечивать аппаратную поддержку коллективных обменов без привлечения ресурсов ВМ.

Выполнение этих требований в разрабатываемой системе маршрутизации позволит снизить задержку при передаче сообщений и увеличить производительность ВС.

Выбор типа системы маршрутизации для СМПО-10G

Выбор типа системы маршрутизации и маршрутных алгоритмов напрямую зависит от архитектуры системы межпроцессорного обмена. Основными топологиями коммуникационных сетей ВС, создаваемых на базе архитектуры СМПО-10G, являются решетчатые структуры — двумерные и трехмерные решетки и торы. В связи с тем, что эти топологии имеют замкнутые циклические маршруты, важной задачей становится недопущение взаимных блокировок при обмене сообщениями. Алгоритмы, позволяющие гарантированно строить маршруты, свободные от взаимных блокировок, делятся на два класса: детерминированной маршрутизации и адаптивной маршрутизации [2].

Детерминированные маршрутные алгоритмы всегда используют постоянный путь между парой узлов коммуникационной сети и сильно зависят от ее топологии. Детерминированная маршрутизация может быть статической или динамической.

При статической маршрутизации запись в таблицу маршрутов вводится и изменяется вручную администратором каждый раз, когда происходит изменение топологии коммуникационной среды. К достоинствам статической маршрутизации можно отнести легкость отладки и конфигурирования в коммуникационных сетях небольшой размерности. Однако статическая маршрутизация не обладает устойчивостью к изменению

топологии и поэтому не может быть использована в СМПО-10G. Статическая маршрутизация применялась в системах межпроцессорного обмена первого поколения в 2000—2005 гг. [3, 4].

При динамической маршрутизации запись в таблице маршрутов обновляется автоматически, что позволяет постоянно держать таблицу маршрутов в актуальном состоянии и вычислять оптимальные маршруты на основе текущей топологии сети.

Динамическая маршрутизация требует разработки *менеджера* коммуникационной сети, который отвечает за обнаружение, инициализацию, активацию и поддержание сети. При работе менеджер сети оказывает дополнительную нагрузку на коммуникационную сеть ВС, причем наибольшая нагрузка приходится на область узла, на котором запущен менеджер сети. При увеличении размера ВС повышается нестабильность коммуникационной сети, что может приводить к ситуациям, когда коммутаторы не успевают синхронизировать свои маршрутные таблицы. Централизованная динамическая маршрутизация реализована в менеджере сети OpenSM для коммуникационных сетей на основе архитектуры InfiniBand. Работы над этим программным пакетом продолжаются в течение 15 лет [5—7].

Одной из особенностей архитектуры СМПО-10G является размещение коммутаторов в ВМ. Отключение по какой-либо причине любого ВМ приводит к отключению его коммутатора СМПО-10G и, в свою очередь, к изменению топологии коммуникационной сети. Регулярные решетчатые топологии становятся иррегулярными с большим количеством циклов, что значительно осложняет построение свободных от взаимных блокировок маршрутов.

В связи с трудно преодолимыми недостатками детерминированной маршрутизации, как статической, так и динамической, принято решение положить в основу системы маршрутизации СМПО-10G локальную адаптивную маршрутизацию.

Адаптивная маршрутизация — это механизм, позволяющий изменять маршрут следования сообщения в сети, если часть сети вышла из строя, с выбором наиболее оптимального маршрута. Локальная адаптивная маршрутизация — распределенная маршрутизация с учетом локальной информации о состоянии сети. Она основана на использовании маршрутных таблиц, в которых для каждого узла получателя указано

несколько вариантов выходных трактов, упорядоченных по степени их предпочтительности.

К основным недостаткам адаптивной маршрутизации относятся:

- увеличение сложности коммутатора. В коммутатор требуется добавить блок выбора выходного канала: в зависимости от текущего состояния выходных портов коммутатор должен выбрать из группы возможных выходных портов оптимальный для передачи сообщения;
- не гарантированный порядок доставки пакетов от источника до приемника.

Наряду с перечисленными недостатками адаптивная маршрутизация имеет неоспоримые достоинства:

- возможность динамически изменять маршрут следования сообщения в коммуникационной сети, если часть сети по каким-либо причинам вышла из строя. Это особенно актуально для СМПО-10G, коммутаторы которой размещаются в вычислительных узлах, выключение любого из которых приводит к изменению топологии коммуникационной сети;
- нет необходимости постоянно отслеживать состояние коммуникационной сети и пересчитывать маршрутные таблицы. Вследствие этого отпадает необходимость в разработке менеджера коммуникационной сети. Отсутствие постоянно исследующего коммуникационную сеть менеджера снижает нагрузку на нее;
- более равномерная нагрузка на коммуникационную сеть по сравнению с детерминированной маршрутизацией за счет прокладки маршрута по наименее загруженным связям;
- возможность избежать состояния взаимной блокировки для иррегулярных коммуникационных сетей, содержащих циклы.

Механизм инициализации распределенной коммуникационной среды СМПО-10G

Процесс инициализации коммуникационной среды СМПО-10G начинается после того, как завершена ее физическая инициализация. Физическая инициализация означает, что порты смежных коммутаторов соединены линией связи и

приведены в состояние готовности передачи служебных сообщений. Линия связи считается готовой к передаче служебных сообщений, когда порты на ее концах находятся в состоянии инициализации.

Механизм инициализации состоит из двух частей — первоначальной инициализации вычислительной системы и инициализации отдельных групп узлов в процессе работы.

Механизм первоначальной инициализации вычислительной системы начинает действовать после того, как на вычислительный комплекс будет подано электропитание и пройдет процесс его физической инициализации. Старт первоначальной инициализации осуществляется запуском специальной утилиты на любом ВМ мультипроцессорной системы. Эта утилита осуществляет запись в коммутатор СМПО-10G данного ВМ его координат (x, y, z) , размерности (m, n, k) всей решетчатой топологии, признака топологии (решетка или тор) и идентификатора процесса инициализации. Получив эти данные, коммутатор заносит их в свою память и выставляет флаг, сообщающий о том, что его инициализация выполнена.

После того, как первый коммутатор был проинициализирован, он должен инициализировать смежные с ним коммутаторы. Для этого коммутатор отправляет через все свои инициализированные порты служебные сообщения. Сообщение содержит вычисленные координаты (x, y, z) соответствующие данному порту коммутатора, размерность (m, n, k) всей решетчатой топологии, признак топологии (решетка или тор) и идентификатор процесса инициализации.

Алгоритмы вычисления номеров смежных коммутаторов различаются для топологий *решетка* и *тор*. В основном эти различия касаются коммутаторов, имеющих среди своих координат равные 0, а также $m - 1$, $n - 1$, $k - 1$.

В любом коммутаторе имеется информация о том, на изменение какой координаты $(x, y$ или $z)$ и какое именно изменение (увеличение (+) или уменьшение (-)) "направлен" каждый его порт. На основании этой информации и своих координат коммутатор вычисляет координаты смежных с ним коммутаторов коммуникационной сети.

Рис. 1 (см. также цветную вкладку) иллюстрирует процесс первоначальной инициализации ВС.

Получив служебное инициализационное сообщение, коммутатор коммуникационной сети про-

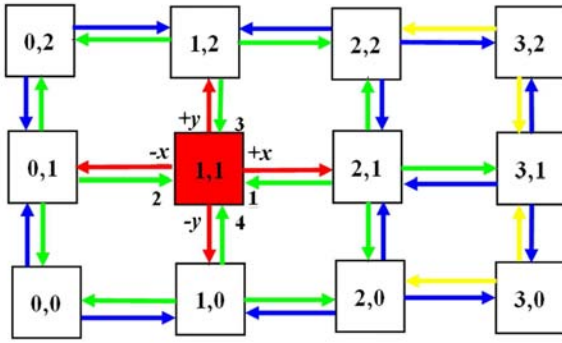


Рис. 1. Механизм первоначальной инициализации ВС

веряет состояние своего флага инициализации. Если он "опущен", коммутатор сохраняет присланные данные, "поднимает" флаг инициализации и запускает процесс рассылки служебных инициализационных сообщений, содержащих координаты смежных ему узлов. Иначе, если флаг инициализации поднят, проверяется идентификатор процесса инициализации. В случае, если присланное значение не совпадает с хранящимся в коммутаторе, считается, что запущен новый процесс инициализации коммуникационной сети — присланные данные сохраняются и запускается процесс рассылки служебных инициализационных сообщений. Иначе, когда флаг инициализации поднят и присланный идентификатор процесса инициализации совпал с идентификатором, хранящимся в коммутаторе, сообщение отбрасывается как повторное и узел больше не распространяет служебных инициализационных сообщений.

Таким образом, начавшись в одном произвольном узле, процесс инициализации распространится через всю коммуникационную сеть и завершится, когда все коммутаторы будут проинициализированы. Контролировать инициализацию коммутаторов можно при помощи системы мониторинга СМПО-10G.

В процессе работы ВС возможны случаи выключения отдельных ВМ или даже их групп вследствие возникновения неисправностей либо с целью выполнения профилактических работ. Коммутаторы СМПО-10G, размещаемые внутри ВМ, тоже отключаются. Впоследствии при включении ВМ необходимо провести инициализацию коммутаторов включаемых ВМ. Этот механизм проиллюстрирован на рис. 2 (см. также цветную вкладку).

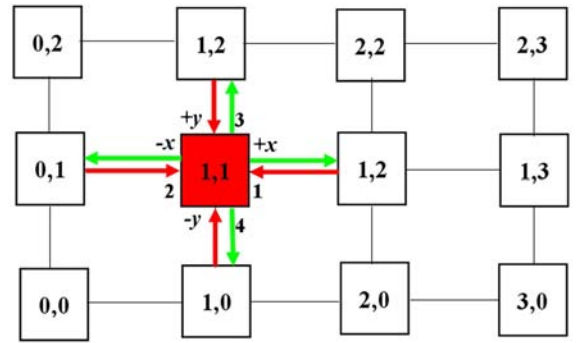


Рис. 2. Механизм инициализации повторно включаемых ВМ

При включении коммутатора происходит физическая инициализация портов и переход порта на смежном коммутаторе из состояния *выключен* в состояние *инициализирован*. Обнаружив это изменение, смежный коммутатор вычисляет координату вновь включенного коммутатора, создает служебное инициализационное сообщение и посылает его в подключившийся порт. Затем он переводит порт в активное состояние. Приняв это сообщение, коммутатор выполняет алгоритм инициализации, описанный выше.

Таким образом, изменения в топологии коммуникационной сети, вызываемые включением ВМ, обрабатываются автоматически и без возрастания нагрузки на сеть.

Механизм адаптивной маршрутизации сообщений в СМПО-10G

В процессе создания механизмов системы маршрутизации СМПО-10G было рассмотрено несколько методов выбора оптимального выходного канала для передаваемого информационного сообщения [8]. Наиболее предпочтительным был признан метод, названный авторами методом *алгоритмически коммутируемой маршрутизации*. Его идея заключается в том, что вычисление оптимального выходного порта для передачи каждого транзитного информационного сообщения осуществляется коммутатором непосредственно в момент передачи.

Заголовок передаваемого пакета содержит адрес узла получателя, который представляет собой его координаты (Dx, Dy, Dz). Выделив эти координаты из заголовка пришедшего пакета, коммутатор сравнивает их со своими координатами (x, y, z), полученными при инициализации. Для этого из значений координат узла

получателя (Dx, Dy, Dz) вычитаются соответствующие им координаты текущего узла (x, y, z) и получается разность (Rx, Ry, Rz). Если координаты совпали, т. е. значения Rx, Ry и Rz равны 0, делается вывод, что пакет достиг узла назначения. Иначе, если существует хотя бы одно ненулевое значение в полученной разности, пакет считается транзитным и начинается выполнение алгоритма выбора оптимального выходного порта.

Основным достоинством метода алгоритмически коммутируемой маршрутизации является то, что нет необходимости заранее вычислять маршруты (при высокой вероятности изменения топологии вычислительной системы это становится нетривиальной задачей) и затрачивать на их хранение память коммутатора. Использование данного метода маршрутизации позволяет создавать ВС с неограниченным числом компонентов.

Недостатком этого метода является возможное увеличение задержки при пересылке сообщений по сравнению с табличным методом, поскольку коммутатор вычисляет для каждого сообщения оптимальный выходной порт непосредственно во время пересылки.

Алгоритм выбора оптимального выходного порта

Для выбора оптимального выходного порта проанализируем полученную разность (Rx, Ry, Rz). Анализ всегда начинается с Rx .

Если $Rx = 0$, переходим к анализу следующей координаты разности (Rx, Ry, Rz). Иначе, если $Rx > 0$, выходным портом считаем порт $+x$, если $Rx < 0$, то выходной порт $-x$.

Полученный выходной порт необходимо проверить на возможность передачи сообщения (порт должен быть в активном состоянии и очередь выходных пакетов должна иметь свободные места). Если порт подходит, он считается оптимальным, и анализ завершается. Иначе, если передача сообщения через выбранный порт невозможна (порт не в активном состоянии либо очередь выходных пакетов заполнена), а $Ry \vee Rz = 0$, в качестве выходного порта выбирается первый из портов $+y, -y, +z, -z$, способный к передаче сообщений. Он считается оптимальным, и анализ завершается. В ситуации, когда все порты коммутатора не способны к передаче сообщений через определенный промежуток времени,

пакет уничтожается, освобождая место в приемном буфере. Выполнение этих условий предотвращает возникновение состояний взаимной блокировки в коммуникационной сети.

Если $Ry \vee Rz \neq 0$, переходим к анализу следующей координаты разности (Rx, Ry, Rz).

Повторяем анализ для каждой координаты Rx, Ry, Rz , пока не найдем свободного выходного порта.

Авторы разработали алгоритмы выбора оптимального выходного порта для топологий коммуникационной сети в виде двумерных и трехмерных решеток и торов. Эти алгоритмы реализованы в блоке управления коммутацией пакетов аппаратной части коммутатора СМПО-10G.

Адаптивный механизм широковещания СМПО-10G

При отсутствии менеджера коммуникационной сети, который отслеживает ее состояние, механизм широковещания СМПО-10G должен автоматически обеспечивать передачу широковещательных сообщений при высокой вероятности изменения топологии коммуникационной сети. В основу механизма широковещания СМПО-10G, названного *логическим деревом*, был положен принцип адаптивности. Идея этого механизма состоит в том, что широковещательный маршрут представляет собой дерево обменов, построенное на массиве узлов, занятых конкретной задачей. На рис. 3 (см. также цветную вкладку) приведена схема работы механизма широковещания *логическое дерево* второй степени.

ВМ — источник широковещательного сообщения — формирует пакет, в заголовке которого в качестве адреса получателя указываются координаты корневого узла логического дерева, а в качестве источника — координаты текущего уз-

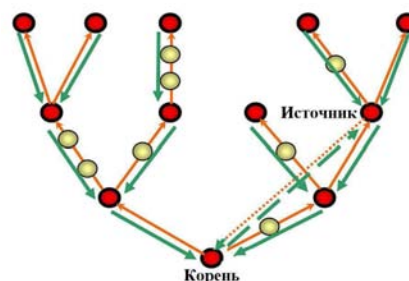


Рис. 3. Схема работы механизма широковещания *логическое дерево* второй степени

ла. После формирования пакета он передается в аппаратный модуль СМПО-10G источника.

Определив, что из ВМ получен широковещательный пакет, аппаратный модуль СМПО-10G сравнивает координаты источника и приемника сообщения. Если они не равны, значит, сообщение еще не достигло узла корня логического дерева — пакет передается получателю с помощью адаптивного механизма *точка-точка*, как указывает на рис. 3 точно-пунктирная стрелка (красного цвета). Если же координаты совпадают, аппаратный модуль СМПО-10G сразу начинает процесс рассылки широковещательных пакетов с использованием широковещательной маршрутной информации.

Получив широковещательный пакет из канала связи, корневой аппаратный модуль СМПО-10G сбрасывает пакет в ВМ и транслирует этот пакет дальше согласно имеющейся у него для данной задачи маршрутной информации. Формат маршрутной информации приведен на рис. 4, где TaskID — идентификатор задачи; DST1 — координаты первого узла получателя пакета — первые три байта, а четвертый байт отведен под CF (complete flag) — флаг завершения цепочки; DST2 — то же самое для второго узла получателя.

Аппаратный модуль СМПО-10G рассылает широковещательный пакет по адресам, указанным в маршрутной информации учитывая состояния полей CF в DST1 и DST2. Если значение CF в DST1 равно 1, то происходит замена координат получателя в заголовке пакета и его отправка. На рис. 3 эти операции показаны стрелками (на цветном рисунке — стрелки красного цвета), ведущими к *листьям* логического дерева. Иначе, если значение CF в DST1 равно 0, координаты получателя не рассматриваются и цепочка считается законченной. Далее происходит такой же анализ DST2. Ситуация, когда оба поля CF в DST1 и DST2 равны 0, означает, что достигнута конечная вершина логического дерева. Определив такую ситуацию, аппаратный модуль СМПО-10G формирует и отправляет подтверждающее сообщение об удачном завершении широковещательной операции согласно маршрутной

TaskID	DST1				DST2			
	x	y	z	CF	x	y	z	CF

Рис. 4. Формат прямой маршрутной информации

информации обратного хода. Формат маршрутной информации обратного хода представлен на рис. 5. На рис. 3 указанные операции обозначены стрелками, ведущими к корню логического дерева и пунктирной стрелкой — из узла корня в узел источника (на цветном рисунке — стрелки зеленого цвета). После того, как ВМ — источник широковещательного сообщения получит пакет-подтверждение, широковещательная операция будет считаться завершенной.

Время выполнения операции широковещания с подтверждением для механизма, представленного на рис. 3, при плотном распределении задачи по ВМ можно оценить по формуле

$$T = (d + 2 \log_2 N)t,$$

где d — диаметр области ВМ, занятой задачей, т. е. число транзитных участков между наиболее удаленными ВМ; N — количество ВМ, занятых задачей; t — время выполнения одной пересылки.

В процессе запуска MPI-приложения загрузчик задач распределяет процессы запускаемого приложения по ВМ вычислительного комплекса. После этого запускается механизм инициализации MPI-процессов. В ходе инициализации каждый MPI-процесс формирует локальную коммуникационную таблицу. Для этого на стадии инициализации (функция MPI_Init) производится вызов функции GetIDComm низкоуровневой библиотеки доступа. Получив все локальные коммуникационные таблицы, процесс *мастер* формирует глобальную коммуникационную таблицу. При этом каждая глобальная коммуникационная таблица MPI-процесса содержит необходимую информацию обо всех процессах, участвующих в межпроцессорных обменах в рамках одной задачи. Таблицы атрибутов располагаются в соответствии с рангами (rank) процессов, образуя хэш-таблицу с прямой адресацией.

Для организации механизма широковещания процесс *мастер* запускает функцию IPCS_10G_Multicast, которая вычисляет маршрутную информацию для операций ши-

TaskID	DST обратного хода				Степень дерева	Счетчик
	x	y	z	CF		

Рис. 5. Формат маршрутной информации обратного хода

роковещания и размещает ее в глобальной коммуникационной таблице.

После того, как глобальная информационная таблица создана, она рассылается на все узлы, занятые задачей. Информация, относящаяся к механизму маршрутизации, на каждом узле своя, она заносится в память аппаратного модуля СМПО-10G с помощью вызова функции PutMulticast низкоуровневой библиотеки доступа.

Освобождение ресурсов аппаратного модуля СМПО-10G происходит в функции MPI_Finalize посредством вызова функции EndMulticast низкоуровневой библиотеки доступа.

К достоинствам предложенного механизма широковещания можно отнести следующее:

- заголовок широковещательного пакета имеет постоянный размер и не зависит от количества узлов, на которых размещена задача;
- маршрутная информация пересылается только на те узлы, на которых размещается задача в процессе ее инициализации;
- пересылка пакета подчиняется принципам адаптивности и становится не чувствительной к изменениям топологии вычислительного комплекса;
- предложенная организация маршрутизации широковещания может быть с пользой применена для выполнения обратной глобальной вычислительной операции (sum, min, max и др.) над данными, расположенными в различных ВМ, с выдачей результата одному ВМ и рассылкой всем остальным ВМ.

Авторы благодарят Ю. Г. Бартенева за ряд полезных замечаний и уточнений алгоритмов, описанных в данном разделе.

Заключение

В работе получены следующие результаты:

- обоснован тип системы маршрутизации для отечественной системы межпроцессорных обменов СМПО-10G, отвечающий всем требованиям, предъявляемым к современным системам маршрутизации;
- разработаны механизмы и алгоритмы, обеспечивающие инициализацию коммуникационной сети и адаптацию при отказах;
- разработаны и реализованы в аппаратуре СМПО-10G маршрутные алгоритмы для коммуникационных сред с топологиями двумерных и трехмерных решеток и торов;

– разработан адаптивный механизм широковещания СМПО-10G.

Направление дальнейших работ связано с адаптацией механизмов и алгоритмов системы маршрутизации СМПО-10G к новым топологиям коммуникационной среды, применение которых позволит увеличить производительность системы межпроцессорных обменов.

Список литературы

1. MPI: A Message Passing Interface standard // Message Passing Interface Forum. March 22, 1994. <http://www.mpi-forum.org>.
2. Flich J. J., Robles A., L'opez P., Duato J. Supporting fully adaptive routing in InfiniBand networks // IEEE Computer Society Press. April 2003. P. 165–172.
3. Попов В. С., Степаненко С. А., Холостов А. А. Архитектура аппаратных средств системы межпроцессорного обмена мультипроцессорной системы МП-Х // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 4. С. 61–64.
4. Байков Э. Г., Басалов В. Г., Варгин А. М. и др. Система межпроцессорных обменов для мультипроцессорных сред // Межд. семинар «Супервычисления и мат. моделирование». Саров, 6–10 октября 2003 г.
5. InfiniBand™ Architecture Release 1.0.a. Volume 1 — General Specifications. July 19, 2001.
6. Kharyorsky S. OpenSM and InfiniBand Management Update. <http://www.openfabric.org/archives/spring2008sonoma/wednesday/opensm.pdf>.
7. Bermudez A., Casado R., Quiles F. J. et al. Evaluation of a subnet management mechanism for InfiniBand networks // Proc. of Int. Conf. on Parallel Proc. USA, Kaohsiung. October 9, 2003. P. 117–124.
8. Dally W., Towles B. Principles and Practices of Interconnection Networks. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2004.

Статья поступила в редакцию 10.01.12.

УДК 519.688

РЕГУЛЯРНЫЕ ВЫРАЖЕНИЯ В РАСЧЕТАХ ЯДЕРНОЙ ТРАНСМУТАЦИИ

А. Р. Белозёрова

(ГНЦ НИИАР, г. Димитровград)

Математическое моделирование процессов ядерных превращений (трансмутаций) в веществе, происходящих под воздействием нейтронного облучения, позволяет изучить влияние облучения на ядерно-физические свойства и радиационные характеристики реакторных материалов. В качестве инструментального средства пользователя применяется Универсальная программа метролога (УПМ) под OS Windows 9x/2000/XP/NT.

Настоящая версия программы обеспечивает графический интерфейс для баз данных и имеет расширенное меню для расчетов ядерной трансмутации в конструкционных материалах, наведенной активности конструкционных материалов при реакторном облучении с использованием нейтронно-физических характеристик, химического состава материала и разветвленных схем нуклидных превращений, для восстановления нейтронного спектра по экспериментальным данным. В расчетах ядерной трансмутации и при обработке текстов с результатами расчетов широко используются регулярные выражения.

Ключевые слова: регулярные выражения, регулярный язык, ядерная трансмутация, формат ENDF/B-6, библиотека оцененных ядерных данных.

Введение

Процессы ядерных превращений (трансмутаций) в веществе, происходящие под воздействием нейтронного облучения, представляются особенно важными при выборе материалов, которые используют в качестве конструкционных для узлов и устройств ядерных реакторов различного типа. Ядерные трансмутации приводят к изменению химического и изотопного состава; происходит накопление радиоактивных и стабильных продуктов, содержание которых определяет сроки безопасной эксплуатации устройств, как радиационной, так и функциональной [1, 2], в ядерно-энергетических установках.

Моделирование процесса в рамках модели изонуклидной трансмутации позволяет прогнозировать динамику таких изменений [3]. Для непрерывного решения линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений ядерной трансмутации решается задача дискретной оптимизации схемы нуклидных превращений с применением эвристических алгоритмов из методов дискретной глобальной и локальной оптимизации с элементами математической теории принятия решений и теории искусственного интеллекта [4, 5].

В качестве инструментального средства пользователя под OS Windows 9x/2000/XP/NT разработана Универсальная программа метролога (УПМ). Настоящая версия УПМ предоставляет пользователю графический интерфейс для доступа к хранящимся в базе данных (БД) нейтронно-физическим характеристикам, данным по химическому составу материалов и схемам нуклидных превращений для расчетов эффектов ядерной трансмутации, повреждающей дозы в конструкционных материалах при реакторном облучении.

Нейтронно-физические данные в созданной для УПМ БД занимают 1,1 Мб. Они состоят из 162 записей по энергетическим спектрам нейтронов, измеренным или рассчитанным для различных точек

и конфигураций исследовательских реакторов. Данные по химическому составу конструкционных материалов сформированы на основе реально используемых в облучательных устройствах, конструкторских элементах исследовательских реакторов (чехлы экранных сборок, оболочки тепловыделяющих элементов и т. д.). Данные по разветвленным блочным схемам нуклидных превращений обновляются на основе проводимых расчетов ядерной трансмутации.

В расчетах ядерной трансмутации и при обработке текстов с результатами расчетов широко используются регулярные выражения. Регулярные выражения предоставляют мощный, гибкий и эффективный метод обработки текста. Широкие возможности сопоставления шаблонов, предоставляемые регулярными выражениями, позволяют быстро анализировать большие объемы текста, проверять текст на соответствие шаблонам (например форматам интегрированных библиотек оцененных ядерных данных по сечениям реакций взаимодействия нейтронов с ядрами атомов ADL-3 [6], FENDL-2.0 [7], ENDF/B-VII.0 [8] и JEFF-3.1.1 [9]¹), извлекать, изменять, заменять или удалять подстроки текста, а также добавлять извлеченные строки в коллекцию для формирования отчетов.

Цель статьи — показать эффективность применения современных технологий программирования, используемых, как правило, для коммерческих, экономических, обучающих программ, на примере регулярных выражений, реализованных в УПМ для расчета ядерной трансмутации.

Применение регулярных выражений в УПМ

Общие сведения об УПМ. УПМ — это приложение с графическим интерфейсом пользователя, предполагающее псевдореально-мультизадачный режим выполнения. Программа разработана по принципу модульного проектирования, содержит пакет утилит PREPRO 2007 [11] и ряд самостоятельных подпрограмм в виде dll-файлов динамической библиотеки и exe-файлов. Интерфейсная часть УПМ и алгоритмы расчетных процедур написаны на языке C++.NET в среде разработки Microsoft Visual Studio.NET [12, 13]. Структура БД создана средствами управления БД Microsoft SQL Server 2000 [14]. Неоднократное тестирование используемого набора модулей подтвердило адекватность реализации каждого из них.

Пакет утилит PREPRO 2007 используется для предварительной обработки ядерных данных в формате ENDF/B. Это модульный набор компьютерных кодов, каждый из которых обеспечивает чтение и запись оцененных ядерных данных в формате ENDF. Каждый код исполняет одну или несколько независимых операций над данными. Предварительная обработка ENDF-форматированных данных необходима для последующего использования в приложениях. Утилиты пакета PREPRO 2007 являются независимыми и совместимыми с современными операционными системами любого типа компьютеров — от большого универсального до малых персональных компьютеров, таких как IBM-PC и Power MAC.

Общие сведения о регулярных выражениях [15]. Понятие регулярного языка играет важную роль в современной информатике, причем как в теоретических, так и в практических ее разделах. Регулярные языки являются важным классом формальных языков. Формальные языки классифицируются в соответствии с типами грамматик, которыми они задаются. Сложность языка определяется его типом. Наиболее сложные языки — с фразовой структурой (сюда можно отнести естественные языки), далее — контекстно-зависимые, контекстно-свободные языки и самые простые — регулярные языки.

Удобный и компактный способ конечного описания формального языка в виде регулярных выражений находит практическое применение во многих компьютерных приложениях, таких как текстовые редакторы, интерпретаторы командной строки и автоматические генераторы лексических анализаторов, информационно-поисковые системы.

Краткие сведения о формате ENDF/B-6. ENDF/B-6 является международным форматом для хранения оцененных ядерных данных (Приложение 1). Однажды подготовленные в форма-

¹Константное обеспечение комплекса состоит из указанных интегрированных библиотек, а также файла данных по распадам радионуклидов из библиотеки FENDL-2 [10].

те ENDF наборы оцененных данных могут преобразовываться в формы, пригодные для тестирования и непосредственных приложений с помощью обрабатывающих программ. Разработаны обрабатывающие программы, которые получают усредненные по группам сечения из библиотеки ENDF для использования в нейтронных расчетах. Эти программы выполняют такие функции, как восстановление детального хода сечений по параметрам резонансов, доплеровское уширение резонансных линий, усреднение по заданным энергетическим группам, и/или перевод в специальные интерфейсные форматы.

Описательная информация дается в виде серии карточных образов, каждая карта содержит в себе до 66 символов Холлерита [16].

Последняя оценка стандартов формата ENDF была выполнена в 2005 г.

Примеры регулярных выражений из УПМ

Подстроки. Для разработчиков приложений на C++ имеется возможность обращений к обработчику регулярных выражений, который содержится в платформе .NET Framework и представляется классом `System.Text.RegularExpressions.Regex` [17, 18]. Объект типа `Regex` инициализируется передачей строки в конструктор (см. ниже выделенную строку листинга). Тривиальным случаем регулярного выражения является строка, состоящая из одного символа алфавита регулярного языка, например, "=", "-", "\\n", "\\t"². Приведенный ниже пример из УПМ иллюстрирует процесс поиска подстроки "CROSS" в другой строке:

```
DirectoryInfo* di = new DirectoryInfo(Environment::CurrentDirectory);
DirectoryInfo* fi[] = di->GetDirectories();
String* l_strContents ,*l_strSourceFileName;
Regex* myDirectory = new Regex(S"CROSS");
for(int i=0;i<fi->Length; i++)
{
    l_strContents=String::Copy(fi->GetValue(i)->ToString());
    if(myDirectory->IsMatch(l_strContents)) break;
}
```

С помощью метода `IsMatch()` определяется, обнаружено ли в указанной входной строке соответствие образцу.

Приведенный образец поиска относится к простым регулярным выражениям, так как это уровень строчных методов. В таблице приведены примеры других подстрок для организации поиска в строках. Во фрагменте листинга для поиска подстроки "\\n" встречается обращение к методу `Split()`. Данный метод разделяет входную строку в позициях, которые определяются сопоставлением регулярного выражения с образцом.

Обработка образцов строк "SKALE", "Chart", "8457" аналогична обработке "CROSS".

Примеры поиска подстрок

Подстроки	Фрагменты листинга
"\\n"	<pre>Regex* myEqual = new Regex(S"\\n"); String* sim[]=myEqual->Split(l_strContents);</pre>
"->"	<pre>Regex* FirstRegex = new Regex(S"->"); if(FirstRegex->IsMatch(words)){...}</pre>
"ppm"	<pre>Regex* myOneRegex = new Regex(S"ppm"); if(!myOneRegex->IsMatch(m_ptrLVMaterial->get_Items()-> get_Item(MaterialIndex)->get_SubItems()->get_Item(j)-> get_Text()->ToString())){...}</pre>

²Соответствие escape-символов: \t — знак табуляции, \n — знак новой строки, \s — знак пробела, \d — любая десятичная цифра, \w — любой алфавитно-цифровой знак.

Классы символов. Класс символов определяет набор символов, хотя бы один из которых должен содержаться в строке ввода, чтобы поиск соответствия выполнялся успешно. Данный набор символов можно задать в виде группы в квадратных скобках, например [mM], [MNO]³, или/и как диапазон [*первый символ-последний символ*]⁴, например [0-9], [A-Z].

Классы символов состоят из языковых элементов. Класс символов соответствует какому-либо одному набору символов. Ниже приведены примеры регулярных выражений с классами символов:

```
"[\\b\\n\\t\\r]";5
"[/d\\.\\w-]+[/s\\t]{1}";
"[/w]+[-]{1}[/d]+[mM]?[/d]?";
"[0-9]{1}\\. [0-9]+[-+]{1}[0-9]+";
"[/s]+";
"$(<=\\b|v0|) [/d\\.\\w]{8}[/s\\t]{1}";
"(<=\\b|~0|) [/d\\.\\w]{8}[/s\\t]{1}$";
"[M,m]?";
"$[0-9][.]?[0-9]+[eE]?[-+]?[0-9]-$";
"[/s\\b\\t]+";
"[/d\\.\\w-]+".
```

Для проверки действительного числа с плавающей точкой в УПМ используется регулярное выражение вида "\$[0-9][.]?[0-9]+[eE]?[-+]?[0-9]-\$", где знак ?⁶ имеет смысл *0 или 1*, знак + (плюс) имеет смысл *один или несколько*, знак - (минус) имеет смысл *0 или более*.

Ограничим образец символами " и \$ (в начале и в конце образца). Эти специальные символы указывают, в какой части текста располагается образец. Символ " означает, что образец должен находиться в начале текста, а символ \$ — что образец должен быть в конце. Одновременное использование обоих символов исключает возможность наличия любого другого текста в проверяемой строке. Такой метод проверки очень полезен.

Теперь рассмотрим два регулярных выражения для проверки нуклидов:

$$"[/w]+[-]{1}[/d]+[mM]?[/d]?"; \tag{1}$$

$$"[0-9]{1,3}-[A-Za-z \\s]{2}-[0-9\\s]{3}[MNO]{0,1}"; \tag{2}$$

Здесь знак перехода \w указывает на любой из символов, составляющих слово, такой как буква, цифра или символ подчеркивания. Предполагается, что обозначение нуклида состоит из одного или двух символов, разделенных одним дефисом, после чего следуют символы десятичных цифр, за которыми может быть знак изомерности данного нуклида в виде символа m или M в случае (1) (соответствует формату ENDF/B-6, диалект INT для ADL-3) или символа M, N или O в случае (2) (соответствует формату ENDF/B-6 для остальных библиотек), а далее могут следовать символы десятичных цифр, которые указывают на номер уровня изомерности нуклида.

В соответствии с (1) корректными будут нуклиды He-4, Co-60, Co-60m, Zn-61m2, Zn-61m3. В соответствии с (2) корректными будут нуклиды 2-He-4, 27-Co-60, 27-Co-60M, 30-Zn-61N, 30-Zn-61O.

Конструкции группирования. Конструкции группирования с помощью регулярных выражений отображают части выражений и обычно *захватывают* части входной строки. Эти конструкции состоят из языковых элементов. Так, конструкция группирования (*часть выражения*)

³Группа символов может включать любую комбинацию одного или нескольких литеральных символов, escape-символов или классов символов.

⁴Диапазон символов — это непрерывная последовательность знаков, которая задается указанием первого и последнего символов последовательности и дефисом между ними. Два символа являются непрерывными, если они имеют соседние кодовые точки в Юникоде.

⁵Здесь и далее знаки ";" (точка с запятой) и "." (точка) после символа " к регулярным выражениям не относятся.

⁶Метасимвол (символ-джокер) — символ, который используется для замены других символов или их последовательностей, приводя, таким образом, к символьным шаблонам. Чаще всего употребляются два метасимвола: * для замены любой строки символов или пустой строки и ? для замены любого одиночного или отсутствующего символа.

захватывает соответствующую *часть выражения* — любой допустимый шаблон регулярного выражения. Используемые скобки нумеруются автоматически слева направо, основываясь на порядке открывающихся скобок в регулярном выражении, начиная с 1. *Захват* с номером 0 — это текст, соответствующий всему шаблону регулярного выражения.

Ранее уже была описана конструкция для проверки действительного числа с плавающей точкой. Представим второй вариант:

```
"([\d\.\w-]+\s\t{1})"
```

Данный образец регулярного выражения захватывает соответствующую часть выражения `[\d\.\w-]+\s\t{1}`, где класс символов `[\d\.\w-]` позволяет проверять одну или более стандартных десятичных цифр с возможным вхождением символа экспоненты и знака порядка числа, а класс символов `[\s\t]` позволяет проверять строго один символ пробела или табуляции. Здесь используется конструкция группирования, так как в обрабатываемом тексте каждая строка представлена двумя действительными значениями, между которыми встречается символ пробела либо символ табуляции.

Значения двумерного массива для описания нейтронного спектра обрабатываются и используются при составлении рабочих файлов пакета утилит PREPRO 2007 [11] для предварительной обработки ядерных данных в формате ENDF/B-6. Текстовый формат рабочего файла GROUPIE.LST представлен в виде фрагмента в Приложении 2.

Перечислим примеры конструкций группирования, реализованных в УПМ:

```
"([\bn\t\r]+)";
"([\w]+[-]{1}[\d+[mM]?[\d]?)";
"([\d\.\w-]+\s\t{1})";
"([\b]);
"([\n]);
"([\t]);
"([\ ]);
"([\d\.\w-]+)";
"([\d+]);
"([A-Z, a-z, A-Я, a-я, 0-9, \-\, \, ]+);
"([\.\w+]);
"([\w+[-\.\ ]+[\d+]);
"([\w+[-\.\ ]?[\d*\w?[-+]?[\d*]);
"([\w-]+)$";
"([\d]{3}-[\w]{2}-[\d]{3})"
```

Заключение

Некоторые регулярные выражения, используемые в УПМ, показывают возможности манипулирования произвольным текстовым форматом, предоставляемые инструментарием регулярных выражений. Регулярные выражения позволяют быстро анализировать текст и находить определенные шаблоны символов для извлечения, редактирования, замены или удаления текстовых подстрок, а также для добавления извлеченных строк в коллекцию при создании отчета. Эффективность применения регулярных выражений, в отличие от строковых типов, особенно наглядна в реализации для формата ENDF/B-6 оцененных ядерных данных при использовании интегрированных библиотек, таких как ADL-3, FENDL-2.0, ENDF/B-VII.0, JEFF-3.1.1.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 08-08-97000 р_поволжье_a).

Приложение 1. Файл данных по распадам радионуклидов decay-ENDF-VII0.endf

```

..... Первые 53 строки файла вырезаны.....
1.001000+3 9.991673-1 -1 0 0 1 2 1451 1
0.000000+0 0.000000+0 0 0 0 6 2 1451 2
0.000000+0 0.000000+0 0 0 4 7 2 1451 3
0.000000+0 0.000000+0 0 0 16 2 2 1451 4
1-H - 1 BNL EVAL-NOV05 A.A. Sonzogni (from NWC) 2 1451 5
/ENSDF/ DIST-DEC06 2 1451 6
--ENDF/B-VII MATERIAL 2 2 1451 7
---RADIOACTIVE DECAY DATA 2 1451 8
---ENDF-6 FORMAT 2 1451 9
***** Begin Description ***** 2 1451 10
** ENDF/B-VII RADIOACTIVE DECAY DATA FILE ** 2 1451 11
** Produced at the BNL from the Nuclear Wallet Cards database ** 2 1451 12
** Author: J.K. Tuli ** 2 1451 13
** Translated into ENDF format by A.A. Sonzogni, November 2005 ** 2 1451 14
***** 2 1451 15
Parent Excitation Energy: 0.0000 2 1451 16
Parent Spin & Parity: 1/2+ 2 1451 17
Parent half-life: STABLE 2 1451 18
Abundance: 99.985% 1 2 1451 19
***** End Description ***** 2 1451 20
1 451 22 0 2 1451 21
8 457 5 0 2 1451 22
0.000000+0 0.000000+0 0 0 0 0 2 1 099999
0.000000+0 0.000000+0 0 0 0 0 2 0 0 0
1.001000+3 9.991673-1 0 0 1 0 2 8457 1
0.000000+0 0.000000+0 0 0 6 0 2 8457 2
0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 2 8457 3
5.000000-1 1.000000+0 0 0 6 0 2 8457 4
0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 0.000000+0 2 8457 5
0.000000+0 0.000000+0 0 0 0 0 2 8 099999
..... Остальные 450532 строки файла вырезаны.....

```

Приложение 2. Рабочий файл GROUPIE.LST

Multi-Band Library Identification

 Groupie Test Run

MAT/MF/MT Ranges

 Minimum Maximum
 MAT MF MT MAT MF MT

1 1 1 9999 99 999

 Group Energy Boundaries

Energy-eV Energy-eV Energy-eV Energy-eV Energy-eV Energy-eV

```

.100000000 .105000000 .110000000 .115000000 .120000000 .127500000
.135000000 .142500000 .150000000 .160000000 .170000000 .180000000
.190000000 .200000000 .210000000 .220000000 .230000000 .240000000
.255000000 .270000000 .280000000 .300000000 .320000000 .340000000
.360000000 .380000000 .400000000 .425000000 .450000000 .475000000
.500000000 .525000000 .550000000 .575000000 .600000000 .630000000
.660000000 .690000000 .720000000 .760000000 .800000000 .840000000
.880000000 .920000000 .960000000 1.00000000 1.05000000 1.10000000

```

..... Эта часть файла вырезана.....

```

15700000.0 15800000.0 15900000.0 16000000.0 16100000.0 16200000.0
16300000.0 16400000.0 16500000.0 16600000.0 16700000.0 16800000.0
16900000.0 17000000.0 17100000.0 17200000.0 17300000.0 17400000.0
17500000.0 17600000.0 17700000.0 17800000.0 17900000.0 18000000.0
18100000.0 18200000.0 18300000.0 18400000.0 18500000.0 18600000.0
18700000.0 18800000.0 18900000.0 19000000.0

```

ENDF/B Tape Label

Список литературы

1. Конструкционные материалы ядерных реакторов. Ч. 2: Структура, свойства, назначение / Под ред. Н. М. Бескорвайного. М.: Атомиздат, 1977.
2. *Solonin M. I., Chernov V. M., Gorokhov V. A. et al.* Present status and future prospect of the Russian program for fusion low-activation materials // J. Nucl. Mater. 2000. Vol. 283—287. P. 1468—1472.
3. *Markina N. V., Shimansky G. A.* TRANS_MU computer code for computation of transmutant formation kinetics in advanced structural materials for fusion reactors // Ibid. 1999. Vol. 271—272. P. 30—34.
4. *Белозёрова А. Р., Шиманский Г. А.* Оптимизация схемы расчета трансмутации методом ветвей и границ // Сб. рефератов семинара "Физическое моделирование изменения свойств реакторных материалов в номинальных и аварийных условиях". Димитровград, 5—6 апреля 2004 г. Димитровград: ФГУП "ГНЦ РФ НИИАР", 2005. С. 75—77.
5. *Белозёрова А. Р., Мельников Б. Ф.* Применение комплекса эвристик в задаче составления схемы нуклидных превращений // Сб. тр. Второй всерос. науч. конф. "Методы и средства обработки информации". Москва, 5—7 октября 2005 г. М.: МГУ им. М. В. Ломоносова, 2005. С. 208—214.
6. *Грудзевич О. Т., Зеленецкий А. В., Игнатюк А. В., Пащенко А. Б.* Библиотека ядерно-физических данных для расчетов активации и трансмутации // Атомная энергия. 1994. Т. 76. Вып. 2. С. 124—130.
7. FENDL-2, May 1998 Version. CD ROM Edition, Request 2378.01. International Atomic Energy Agency, Division of Physical and Chemical Sciences, Nuclear Data Section. Austria. <http://www.nds.iaea.org/fendl/index.html>.
8. Special issue on ENDF/B-VII.1 library // Nuclear Data Sheets. December 2011. Vol. 112, Issue 12. P. 2887—2996. <http://www.nndc.bnl.gov/exfor/endl00.jsp>.
9. *Sublet J-Ch., Konings A. J., Forrest R. A., Kopecky J.* The JEFF-3.0/A Neutron Activation File — EAF-2003 into ENDF-6 format // JEFDOC-982. Saint Paul Lez Durance, France. November 2003. P. 34. http://www.nea.fr/dbforms/data/eva/evatapex/jeff_31/.

10. *Firestone R. B.* Table of Isotopes. CD ROM Edition, Version 1.0, March 1996. Office of Energy Research, Office of High Energy and Nuclear Physics, Nuclear Physics Division of the US Department of Energy.
11. PREPRO 2007. ENDF/B Pre-processing Codes (ENDF/B-VII Tested) Owned, Maintained and Distributed by the Nuclear Data Section International Atomic Energy Agency. Vienna, Austria. <http://www-nds.iaea.org/ndspub/endl/prepro2007/>.
12. *Торстеинсон П., Оберг Р.* Архитектура .NET и программирование на Visual C++: Пер. с англ. М.: Вильямс, 2002.
13. *Саранг П. Г., Корера А., Фрейзер С. и др.* Visual C++.NET: Пособие для разработчиков C++: Пер. с англ. М.: ЛОРИ, 2003.
14. *Артёмов Д. В.* Microsoft SQL Server 2000. Новейшие технологии. М.: Русская редакция, 2001.
15. *Мельников Б. Ф.* Недетерминированные конечные автоматы. Тольятти: ТГУ, 2009.
16. *Кит С.* Рид-Грин. История переписи населения в США и обработки ее данных // В мире науки. 1989. № 4. С. 70—76.
17. Microsoft, 2012. <http://msdn.microsoft.com/ru-ru/library/system.text.regularexpressions.regex.aspx>.
18. *Бекер П.* Регулярные выражения / Журнал для профессионалов. Программирование на C/C++. ООО "Инфопресс", 2006. № 10 (34). С. 1—7.

Статья поступила в редакцию 22.07.11.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Янилкин Ю. В., Шмелёв В. А., Колобянин В. Ю., Беляев С. П.</i> Монотонный метод частиц для моделирования двумерных газодинамических течений	3
<i>Бартенев Ю. Г., Бондаренко Ю. А., Спиридонов В. Ф.</i> Прогноз параметров подсистем вычислительной системы эксафлопсного класса	15
<i>Воропинов А. А., Новиков И. Г., Соколов С. С.</i> Методы мелкозернистого распараллеливания в методике ТИМ-2D	24
<i>Конюхов В. М., Конюхов И. В., Краснов С. В.</i> Математическое обеспечение программно-технического комплекса ИСКЕНДЕР	34
<i>Ганина С. М., Гинкин В. П., Буденкова О. Н., Саади Б., Ашани Л., Фотрель И.</i> Моделирование кристаллизации бинарных расплавов на примерах численного и экспериментального бенчмарков	45
<i>Байков Э. Г., Дерюгин Ю. Н., Лёвкин С. А., Устинов С. М., Холостов А. А.</i> Численное моделирование конструкции серверного шкафа с насадкой, равномерно-распределяющей входной охлаждающий поток	57
<i>Басалов В. Г., Вялухин В. М.</i> Адаптивная система маршрутизации для отечественной системы межпроцессорных обменов СМПО-10G	64
<i>Белозёрова А. Р.</i> Регулярные выражения в расчетах ядерной трансмутации	71

CONTENTS

<i>Yanilkin Yu. V., Shmelev V. A., Kolobyainin V. Yu., Belyaev S. P.</i> The monotone particle method for 2D gas dynamics simulations	3
<i>Bartenev Yu. G., Bondarenko Yu. A., Spiridonov V. F.</i> Prediction of exascale computer subsystem parameters	15
<i>Voropinov A. A., Novikov I. G., Sokolov S. S.</i> Fine-grain paralleling methods in the TIM-2D code	24
<i>Konyukhov V. M., Konyukhov I. V., Krasnov S. V.</i> Mathematical apparatus of the ISKENDER hardware and software package	34
<i>Ganina S. M., Ginkin V. P., Budenkova O. N., Saadi B., Ashani L., Fotrel I.</i> Modeling of binary melt crystallization in numerical and experimental benchmarks	45
<i>Baikov E. G., Deryugin Yu. N., Levkin S. A., Ustinov S. M., Kholostov A. A.</i> Numerical modeling of a server cabinet structure with a nozzle to provide uniform distribution of incoming cooling flow	57
<i>Basalov V. G., Vyalukhin V. M.</i> Adaptive routing system for the domestic interconnect SMPO-10G	64
<i>Belozerova A. R.</i> Regular expressions in nuclear transmutation simulations	71

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Л. В. Мазан,
Е. Н. Старченко

Корректоры В. В. Барышникова,
А. В. Федоренко

Подписано в печать 22.08.12	Формат 60×84/8
Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 10	Уч.-изд. л. ~ 12
Тираж 1000 экз. Зак. тип. 8 статей	Индекс 3642

Оригинал-макет подготовлен в Математическом отделении
Всероссийского научно-исследовательского института
экспериментальной физики

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188 г. Саров Нижегородской обл.

ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате WinWord или LaTeX (с использованием стандартного стиля article).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);

2) разрешение на открытое опубликование от организации, в которой выполнена работа.

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны полностью соответствовать указанным в представленной рукописи. Необходимо также сообщить номер телефона или электронный адрес для обратной связи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием статьи необходимо указать УДК. Разделы и подразделы текста должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, соответствующее стандартам по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например, a и α ("альфа"), v и ν ("ню"), c и C) желательнее делать пометки. При этом строчные (малые) буквы следует помечать двумя черточками сверху (например, \bar{c} , \bar{k} , \bar{z} , \bar{d}), а прописные (большие) — двумя черточками снизу (например, \underline{C} , \underline{K} , \underline{Z} , \underline{Q}). Для отличия цифры 0 от буквы O цифру следует перечеркивать кривой чертой. Должны различаться по написанию единица, штрих и запятая в индексах, а также буквы e и l , I и J . Необходимо выделять (жирным шрифтом или стрелкой) векторные величины.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисочные подписи. Рисунки также необходимо представить в виде графических файлов в формате .eps или .jpg. Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют символьными (цифровыми) обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисочной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы (отчеты) не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАНТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail:sokol@vniief.ru