

Математическое моделирование одного класса задач металлургической теплофизики на основе многопроцессорных параллельных вычислительных систем

Г.Г. ШВАЧИЧ

Национальная металлургическая академия Украины

Развивается процесс моделирования многомерных нестационарных задач на основе применения многопроцессорных вычислительных систем кластерного типа. Разработан алгоритм решения полной коэффициентной обратной задачи теплопроводности. Приводятся результаты машинного моделирования на параллельном вычислительном кластере для исследуемого класса задач металлургической теплофизики.

Розвивається процес моделювання багатовимірних нестационарних задач на основі застосування багатопроцесорних обчислювальних систем кластерного типу. Розроблено алгоритм розв'язку повної оберненої коефіцієнтної задачі теплопровідності. Наводяться результати машинного моделювання на паралельному обчислювальному кластері для досліджуваного класу завдань металургійної теплофізики.

The process of simulation of multidimensional nonstationary tasks develops on basis application of the multiprocessor calculating systems of cluster type. The solution algorithm of full coefficient inverse task of thermal conductivity is developed. Results of computer simulation on the parallel computing cluster are brought for the observable class of tasks of metallurgical thermal physics.

Актуальность темы исследований. В металлургическом производстве сталкиваются с множеством самых разнообразных и взаимосвязанных процессов. Это и теплоперенос, и массообмен, гидродинамические процессы в расплавах, а также изменение агрегатного состояния вещества, деформационные явления под действием силовых и термических нагрузок и т.п. Большинство таких процессов может быть описано на основе дифференциальных уравнений механики сплошной среды, отражающих объективные законы сохранения массы, количества движения и энергии. В математическом выражении это системы, многомерных нелинейных дифференциальных уравнений, которые вместе с законами химии и термодинамики описывают взаимосвязанные процессы, а также их взаимодействие. При этом, практика последних лет показывает, что ни интенсификация процессов металлургического производства, ни конструктивное совершенствование различного металлургического оборудования не возможны без изучения и анализа явлений теплопереноса методами математического моделирования [1-4]. Теоретическое исследование процесса тепло - и массообмена в значительной степени базируется на их численном моделировании с использованием ПЭВМ. Кроме того, с развитием кластерных вычислительных систем исчезают и принципиальные проблемы в потенциально бесконечном увеличении пиковой производительности компьютеров. Параллельные вычислительные системы развиваются очень быстро, а с появлением вычислительных кластеров [5] параллельные вычисления стали доступными многим. Для построения кластеров, как правило, используются массовые процессоры, стандартные сетевые технологии и свободно распространяемое программное обеспечение. Именно эти обстоятельства сделали подъемными так называемые большие задачи металлургической теплофизики [6-8].

При этом, проблемы, возникающие при разработке параллельных вычислительных систем, отвечающих заданным характеристикам, как правило, являются первостепенными и требуют глубокого изучения и исследования [9,10]. Действительно, распределенное (параллельное) компьютерное моделирование охватывает

весь спектр современной вычислительной техники: суперкомпьютеры, кластерные вычислительные системы, локальные и глобальные сети. Кроме того, распределенное моделирование позволяет решать задачи, требующие большого количества процессорного времени, интегрировать математические модели, которые обрабатываются на различных (в том числе и географически удаленных) вычислительных системах.

В настоящее время в мире наблюдается стремительный рост числа многопроцессорных вычислительных систем. Одновременно растет потребность в имитационных моделях сложных систем, требующих большого количества вычислительных ресурсов. Однако широкому внедрению машинного моделирования для многопроцессорных вычислительных систем препятствует отсутствие или недоступность систем распределенного моделирования. В этой связи, проблемы конструирования вычислительных кластеров, разработки вычислительных алгоритмов и особенности процесса математического моделирования для параллельного процессора являются актуальными и первостепенными.

В данной статье на основе предложенного в [5] параллельной вычислительной системы кластерного типа и разработанных алгоритмов распараллеливания освещаются вопросы математического моделирования многомерных нестационарных задач металлургической теплофизики.

Некоторые особенности математического моделирования задач исследования теплофизических свойств материалов. Эффективность предложенного в [5] подхода иллюстрируется некоторыми особенностями моделирования обратных задач исследования теплофизических свойств материалов. Рассмотрим особенности моделирования указанного класса задач.

Итак, рассматриваются тепловые задачи металлургической теплофизики. Их постановка формулируется с точки зрения соотношений причина – следствие. К причинным характеристикам теплообменного процесса в соответствии с принятой математической моделью отнесены граничные условия и их параметры, начальные условия, теплофизические свойства и т.д.

Заметим, что решение задач теплопроводности (ЗТ) дает возможность по заданным, известным из теплового или численного эксперимента температурным полям, определять различные причинные характеристики теплообменных процессов в системе твердое тело - окружающая среда. Под причинными характеристиками обычно подразумеваются коэффициенты уравнений, начальные поля, граничные условия, характеристики области интегрирования и т. д. Обратные задачи теплопроводности (ОЗТ) являются некорректно поставленными, поэтому методы их решения сложнее, чем соответствующих прямых задач. В статье сформулирован общий подход к решению широкого класса ОЗТ. Разработан алгоритм и выявлены особенности решения коэффициентных ОЗТ.

Математическая постановка проблемы исследований. При решении ОЗТ в первую очередь необходимо разобраться с условиями управляемости математических моделей (ММ), создающих возможность методами математического моделирования приведения системы в заданное тепловое состояние с помощью управляющих воздействий. Будем исходить из того, что ММ известна и включает ряд причинных характеристик, которые обозначим вектором R -входных параметров. Пусть дискретный аналог ММ и вычислительный алгоритм разработаны. Исследована также чувствительность ММ к вариациям вектора R , т.е. показано, что искомое решение конкретной задачи ММ определяется не только функция пространственных координат и времени, но и как функция входных параметров R . Таким образом, чтобы оценить достоверность полученного решения ММ, необходимо исследовать его поведение при вариациях входных данных. При исследовании чувствительности ММ вариации входных параметров предполагаются заданными. Не менее важны постановка и методы решения обратных задач, суть которых будет состоять в оценке входных параметров вектора R по фактической информации о моделируемой системе, известной из эксперимента. Процесс математического моделирования подобного класса задач включает несколько этапов.

Во-первых, разработку алгоритма и вычислительной программы решения прямой задачи ММ, вычислительный алгоритм решения которой реализует преобразование

$$T = T(x, t, R), \tag{1}$$

определяющее вектор температурного состояния ММ как функцию независим переменных и входных параметров вектора R .

Во-вторых, при решении ОЗТ в качестве критерия качества идентификации параметров R на решениях ММ в алгоритм необходимо ввести некоторый функционал, характеризующий модель в целом или отклонения между измеренными $T_3(t_j)$ и вычисленными значениями вектора состояния $T_p(t_j)$. Выберем в качестве меры уклонения среднеквадратическую невязку

$$J(T_p, T_3) = (T_p - T_3)^2 \tag{2}$$

где T_p – значение вектора теплового состояния, вычисленное с помощью модели ММ. Компоненты вектора $T_3(t_j)$ при этом могут определяются на дискретном множестве точек заданной области определения температурной функции. На практике, как правило, для оценки качества модели используется несколько таких критериев.

Таким образом, мы пришли к одному из перспективных направлений в решении обратных задач теплообмена, соответствующего их экстремальной постановке с использованием известных численных методов теории оптимизации. Учитывая, что вычисление вектора $\text{grad}J()$, присущее этим методам, представляет серьезную математическую проблему, покажем как этого можно избежать. Заметим, что если ММ реализует преобразование (1), то на каждом акте таких преобразований становится возможным и вычисление значений функционала (2). Это позволяет, многократной вариацией входных параметров вектора R , построить такую последовательность изменения функционала (2), которая включала бы и точку его минимума. Таким образом, если это реализуемо, то решение ОЗТ сводится к минимизации функции многих переменных. Наиболее просто выглядит этот алгоритм для одной переменной вектора R . Алгоритм решения ОЗТ при этом включает процедуру отделения интервала, содержащего точку минимума функционала, и процедуру его уточнения. Процедура уточнения координаты минимума может быть реализована следующим образом. Пусть функционал $J(R)$ (2) обладает достаточным запасом аналитичности по входным параметрам вектора R . Представим в окрестности минимума его значение отрезком ряда Тейлора

$$J_{p+\varepsilon_R,1}(R) = J_{p,1} + \varepsilon_R J_{p,2} + \varepsilon_R^2 J_{p,3} + \dots \tag{3}$$

где

$$\varepsilon_R = \frac{R - R_p}{R_{p+1} - R_p} \in [-1, +1],$$

$$J_{p,2} = (J_{p+1,1} - J_{p-1,1}) / 2, \tag{4}$$

$$J_{p,3} = (J_{p+1,1} + J_{p-1,1} - 2J_{p,1}) / 2$$

- известные тейлоровские компоненты, а $p=1,2,3,\dots$ - номера сеточных узлов.

Сохранив в разложении (3) первые три слагаемых, дифференцируя по ε_R , и приравнявая нулю, построим интерполяционную формулу

$$R = R_p - \frac{(R_{p+1} - R_p)}{2} \cdot \frac{J_{p,2}}{J_{p,3}}, \tag{5}$$

где все обозначения соответствуют принятым выше. Таким образом, решение ОЗТ из этого класса сводится к процедуре отделения минимума и его уточнения итерациями по формуле (5). Ниже этот алгоритм апробирован на решениях коэффициентных ОЗТ.

Особенности построения управляемых ММ для коэффициентных ОЗТ. Рассмотрим одномерную задачу нестационарной теплопроводности, описываемую квазилинейным уравнением

$$C_{g,\gamma}(T) \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{1}{x^k} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^k \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right], x \in [0,1], \tau \in [0, \infty), \tag{6}$$

где

$$\begin{aligned} \tau &= a_0 t / L^2, a_0 = \lambda_0 / C_{v_0}, \\ x &= x / L, C_v = C_v / C_{v_0}, \\ \lambda &= \lambda / \lambda_0, k = \overline{0,1,2}, \end{aligned} \tag{7}$$

- обезразмеренные входные данные, k - параметр формы образца ($k=0$ -пластина, $k=1,2$ - цилиндр и шар).

Исследуемое дифференциальное уравнение в частных производных после дискретизации по времени, применительно к узлам сеточной области ($p=1,2,\dots,m_x-1$) преобразуется в СОДУ двухточечного типа

$$T_{p+\varepsilon_x,1}''(\varepsilon_x) + 2A_p T_{p+\varepsilon_x,1}'(\varepsilon_x) - B_p T_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x) = B_p T_{p,1}(\varepsilon_x), \quad (8)$$

где

$$\left. \begin{aligned} A_p &= \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_{p,2}}{\lambda_{p,1}} + k \frac{Dx1}{x_p} \right) \\ B_p &= \frac{Dx1}{Dt1} \frac{CV_{p,1}}{\lambda_{p,1}} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Функции $T_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x)$, $TO_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x)$ в (8) отнесены соответственно к текущему и предыдущему временным слоям.

Решение исследуемого дифференциального уравнения по схеме метода прямых в узлах сеточной области представляется в аналитическом виде

$$T_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x) = T_{p+\varepsilon_x,1}^*(\varepsilon_x) + C_p e^{\beta_1 \varepsilon_x} + D_p e^{-\beta_2 \varepsilon_x} \quad (10)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \beta_1 &= \Omega_p - A_p, \quad \beta_2 = \Omega_p + A_p, \\ \Omega_p &= \sqrt{A_p^2 + B_p} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

- корни характеристического уравнения; C_p , D_p - константы интегрирования; $T_{p+\varepsilon_x,1}^*(\varepsilon_x)$ - частное решение неоднородного уравнения (8).

Окончательно поузловое решение этой задачи принимает следующий вид

$$\begin{aligned} T_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x) &= T_{p+\varepsilon_x,1}^*(\varepsilon_x) + \\ &+ F1 \frac{e^{-\beta_1(1-\varepsilon_x)}}{Det} (1 - e^{-2\Omega_p(1+\varepsilon_x)}) + \\ &+ F2 \frac{e^{-\beta_1(1+\varepsilon_x)}}{Det} (1 - e^{-2\Omega_p(1-\varepsilon_x)}), \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\left. \begin{aligned} F1 &= (T_{p+1,1} - T_{p+1,1}^*), \\ F2 &= (T_{p-1,1} - T_{p-1,1}^*), \quad Det = (1 - e^{-4\Omega_p}) \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

- сеточные комплексы.

Алгебраический аналог исследуемой ММ в виде СЛАУ трехдиагональной структуры

$$C_p T_{p+1,1} - T_{p,1} + D_p T_{p-1,1} = f_{p,1}, \quad p = \overline{1, 2m-1}, \quad (14)$$

где

$$\left. \begin{aligned} C_p &= \frac{e^{-\beta_1}}{1 + e^{-2\Omega_p}} \\ D_p &= \frac{e^{-\beta_2}}{1 + e^{-2\Omega_p}} \\ f_{p,1} &= (C_p T_{p+1,1}^* - T_{p,1}^* + D_p T_{p-1,1}^*) \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Вид начальной функции $TO_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x)$ между узлами сеточной области конкретизируем квадратичной зависимостью аргумента ε_x

$$TO_{p+\varepsilon_x,1}(\varepsilon_x) = TO_{p,1} + \varepsilon_x TO_{p,2} + \varepsilon_x^2 TO_{p,3} \quad (16)$$

где

$$\left. \begin{aligned} TO_{p,2} &= \frac{1}{2} (TO_{p+1,1} - TO_{p-1,1}) \\ TO_{p,3} &= \frac{1}{2} (TO_{p+1,1} + TO_{p-1,1} - 2TO_{p,1}) \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

С учетом этих зависимостей, частное решение неоднородного уравнения, вошедшее в ММ (8) в неявной форме, принимает следующий вид

$$TO_{p+\varepsilon_x,1}^*(\varepsilon_x) = M_0 + \varepsilon_x M_1 + \varepsilon_x^2 M_2, \quad (18)$$

где

$$\left. \begin{aligned} M_0 &= TO_{p,1} + b_1 TO_{p,2} + 2b_2 TO_{p,3} \\ M_1 &= TO_{p,2} + b_1 TO_{p,3} \\ M_2 &= TO_{p,3} \\ b_1 &= 2 \frac{A_p}{B_p}, \quad b_2 = 4 \frac{A_p^2}{B_p^2} + \frac{1}{B_p} \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Решение СЛАУ (14) при заданных входных данных достаточно просто реализуется методом прогонки. Таким образом, можно считать, что первая ММ, необходимая для решения коэффициентной ОЗТ в изложенной выше постановке (экстремальной), разработана. Обозначим ее как Модель 1. К математической модели (14) (температурной) следует присовокупить и ее гра-

диентный аналог. Дифференцируя функцию (10) по ε_x и положив $\varepsilon_x=0$, построим градиентную Модель 2

$$T_{p,2}(\varepsilon_x)|_{\varepsilon_x=0} = \left\{ \begin{aligned} &T_{p,2}^*(0) + F1 \frac{e^{-\beta_1}}{Det} [\beta_1 + \beta_2 e^{-2\Omega_p}] - \\ &- F2 \frac{e^{-\beta_2}}{Det} [\beta_2 + \beta_1 e^{-2\Omega_p}] \end{aligned} \right\}, \quad (20)$$

где функция $T_{p+\varepsilon_x,2}^*(\varepsilon_x)$ вычисляется по формуле

$$T_{p+\varepsilon_x,2}^*(\varepsilon_x) = M_1 + 2 \varepsilon_x M_2$$

Таким образом, ММ идентификации, имеющая в составе Модель 1 (14) и Модель 2 (20), позволяют сформулировать решение полной коэффициентной ОЗТ в экстремальной постановке по схеме, описанной выше. Предложенный подход реализован в виде ППП.

Краткая иллюстрация работы ППП

В данном разделе статьи речь идет о ППП, предназначенном для обработки данных теплофизического эксперимента. При этом основная цель, которая преследовалась при создании ППП – это оказание существенной помощи исследователю на всех этапах обработки теплофизического эксперимента.

Заметим, что процедуры распараллеливания алгоритмов рассматриваемого класса задач, соответствуют исследованиям, изложенным в [5]. Кроме того, процесс моделирования проводился на вычислительном кластере МРР архитектуры [5].

Работа ППП иллюстрируется рисунками 2-5.

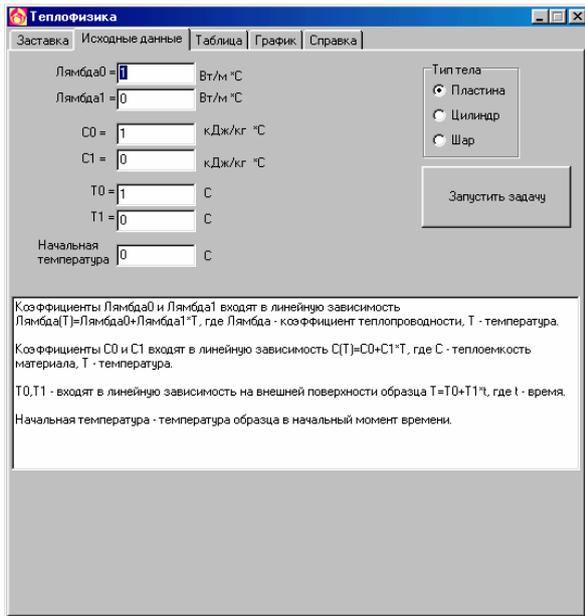


Рис. 2. Ввод исходных данных

Как показано на рис. 2 ввод исходных данных осуществляется в интерактивном режиме. Результаты решения задач выводятся как в виде таблиц, так и представляются требуемыми графическими зависимостями.

Решение тестовой коэффициентной ОЗТ методом математического моделирования. В качестве тестовой задачи рассмотрим образец цилиндрической формы, изготовленный из материала с теплофизическими свойствами [11] (кокс из газового угля, стр.41, Таблица 42-кокс формованный):

$$\lambda = 0.161 + 0.024 * 10^{-2} * T$$

$$C = 1.281 + 0.208 * 10^{-2} * T$$

Плотность кокса из газового угля $\rho = 1912, \text{ кг/м}^3$. С такими теплофизическими свойствами моделировалось температурное поле образца,

имеющего цилиндрическую форму ($\kappa = 1$). При заданном линейном по времени изменении температуры на границе образца ($TL = 20 + 100 * \tau$) температурное поле для конкретного момента времени $\tau = a_0 t / L^2 = 0.5$, где $a_0 = \lambda_0 / \rho c_0$ ($\lambda_0 = 1, c_0 = 1$), приведено на рис. 4, 5.

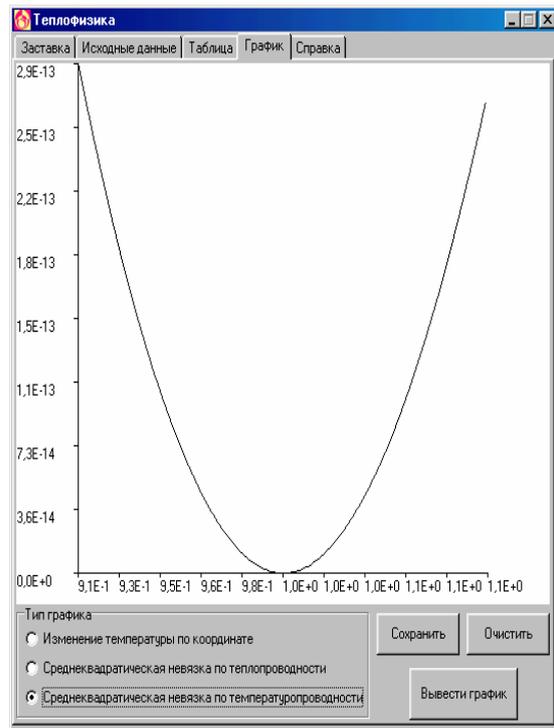


Рис. 3. Минимизация функционала на решениях Модели 1

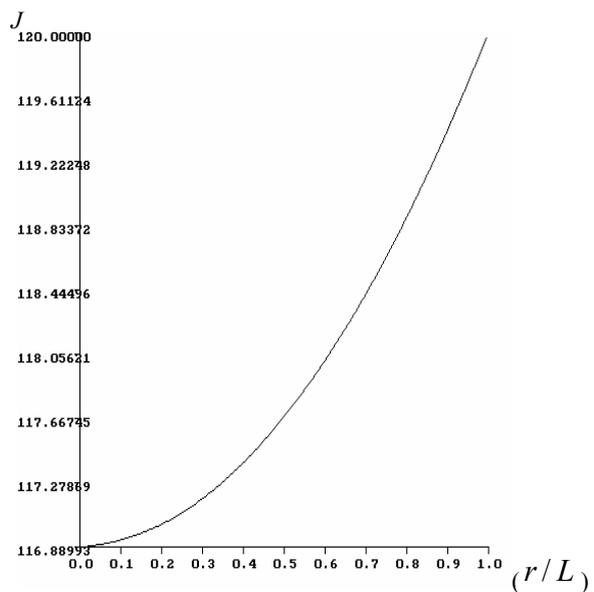


Рис. 4. Изменение температуры по сечению образца в момент времени $\tau = \tau_1 = 0.5$.

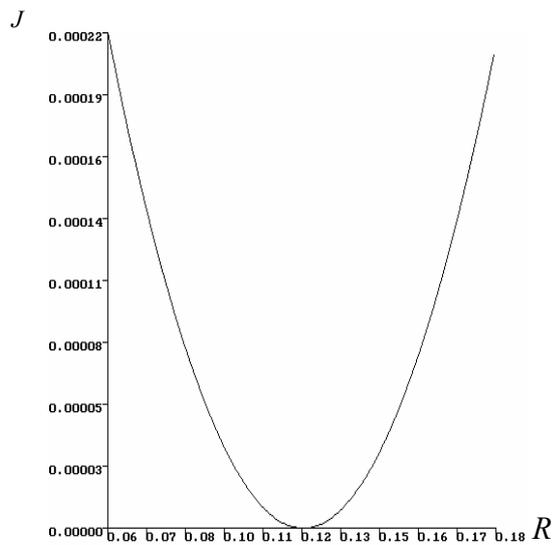


Рис. 5. Решение коэффициентной ОЗТ при $R = a$ с управлением относительно коэффициента теплопроводности.

Точные значения коэффициента теплопроводности и температуропроводности соответственно равны $\lambda(f_2) = 0.16598, a(f_2) = 0.1253$,

где f_2 – изменение температуры во втором узле по сечению образца. Минимумы невязок, представленных на рис. 5 в точности соответствуют этим значениям.

Выводы

1. Суперкомпьютеры в настоящее время мало доступны вследствие огромной стоимости и цены обслуживания. В этой связи реальной альтернативой является применение вычислительных систем кластерного типа, результаты моделирования, при помощи которых освещаются в данной статье.

2. Являясь достаточно новой технологией, параллельные вычислительные системы кластерного типа эффективны при решении широкого класса нестационарных многомерных задач, позволяя при этом повысить производительность и качество вычислений.

4. Разработанные программные средства могут применяться для планирования и обработки результатов теплофизического эксперимента. Разработанные алгоритмы достаточно просто перестраиваются для решения других коэффициентных и граничных задач теплопроводности.

5. Разработанные алгоритмы решения теплофизических задач отличаются высокой точностью и эффективностью: тестовый вариант решения ОЗТ при точных входных данных абсолютно совпадает с теплофизическими характеристиками материала образца.

6. Разработанное программное обеспечение для обработки результатов теплофизического эксперимента является саморегуляризирующимся и достаточно про-

сто перестраивается на решение других и, в частности, граничных ОЗТ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Роуч П. Вычислительная гидродинамика / Пер. с англ. – М.: Мир, 1980. – 616с.
2. Коздоба Л. А. Вычислительная теплофизика. – Киев: Наук. Думка, 1992. – 224 с.
3. Иващенко В.П., Швачич Г.Г., Шмукин А.А. Некоторые аспекты проблемы математического моделирования задач металлургической теплофизики на основе применения параллельных вычислительных систем кластерного типа // Сучасні проблеми металургії. Наукові праці. Том 7. Дніпропетровськ: «Системні технології», 2005. С. 23-30.
4. Швачич Г. Г., Шмукин А. А. Особенности конструирования параллельных вычислительных алгоритмов для ПЭВМ в задачах тепло- и массообмена // Восточно Европейский журнал передовых технологий. 2(8) 2004. С. 42-47.
5. Швачич Г.Г., Шмукин А.А. О технологии параллельного компьютерного моделирования на многопроцессорных вычислительных комплексах кластерного типа // Математичне моделювання. Науковий журнал. №2(17), 2007. С. 99-106.
6. Швачич Г. Г., Шмукин А. А. О концепции неограниченного параллелизма в задачах теплопроводности // Восточно Европейский журнал передовых технологий. 3(9) 2004. С. 81-84.
7. Швачич Г. Г., Шмукин А. А. Особенности векторизации вычислений при моделировании процессов тепло – и массообмена // Математическое моделирование. 1(13) 2005. С. 23-28.
8. Швачич Г.Г., Шмукин А.А. К вопросу конструирования и моделирования алгоритмов построения граничных условий в задачах тепло- и массообмена для неограниченных областей // Збірник наукових праць НГУ № 28. – Дніпропетровськ: РВК НГУ, 2007. – С. 75-84.
9. Швачич Г.Г. О параллельных компьютерных технологиях кластерного типа решения многомерных нестационарных задач // Materiály IV mezinárodní vědecko – praktická konference «Vědecký potenciál světa - 2007». – Díl 7. Technické vědy. Matematika. Fyzika. Moderní informační technologie. Výstavba a architektura: Praha. Publishing House «Education and Science» s.r.o – Stran. 35-43.
10. Швачич Г.Г. Об одном подходе к решению проблемы латентности вычислительных кластеров МРР архитектуры // Материали за 5 – а международна научна практична конференция, «Ставайки съвременни наука»,- 2007. Том 10. Математика. Физика. Съвременни технологии на информации. Физическа култура и спорт. София. «Бял ГРАД-БГ» ООД.- С. 27-35.
11. Ильченко К. Д., Чеченев В. А., Иващенко В. П., Терещенко В. С. Теплофизические свойства промышленных материалов, Справочник, Днепропетровск.: Січ, 1999.- 152с.

пост. 19.03.08