

Моделирование на высокопроизводительных вычислительных системах процессов распространения многокомпонентных примесей в водоеме

Шабас И.Н.
ЮГИНФО ЮФУ



Параллельные вычислительные технологии (PaVT) 2014

*Ростов-на-Дону
1-3.04.2014*

Постановка задачи

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial t} - \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(M^{\alpha} \frac{\partial \bar{S}}{\partial x_{\alpha}} \right) \right) + \gamma \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} (V^{\alpha} \bar{S}) + (1-\gamma) \sum_{\alpha=1}^3 V^{\alpha} \frac{\partial \bar{S}}{\partial x_{\alpha}} + \mathcal{B}(\bar{S})\bar{S} = \bar{f}(x, y, z), \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \bar{v}_i = 0, \quad (2)$$

$$G \frac{\partial \bar{S}}{\partial n} + R \bar{S} \Big|_{\partial \Omega} = P, \quad (3)$$

$$\bar{S} \Big|_{t=0} = \bar{S}_0(x, y, z). \quad (4)$$

$(x_1, x_2, x_3) \in \Omega$, Ω область расчета с границей $\partial \Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$

$\bar{S} = \{S_i\}_{i=1}^k$ вектор концентрации веществ, $\gamma \in [0, 1]$

$V^{\alpha} = \{v_i^{\alpha}\}$, $M^{\alpha} = \{\mu_i^{\alpha}\}$ диагональные матрицы размера $k \times k$

G, R, P матрицы размера $k \times k$

$\mathcal{B}(\bar{S})$ матрица взаимодействия веществ в среде

Горизонтальные коэффициенты диффузии

$$\mu^{xy}(x, y) = \mu_0 + \mu_s L^2 \cdot \sqrt{2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2},$$

$$\mu_0 \approx \varepsilon^{1/3} L^{4/3},$$

L – характерный горизонтальный масштаб сетки;

$$\varepsilon = 5;$$

μ_s – числовая константа.

Вертикальные коэффициенты диффузии

$$\mu_z(z) = \begin{cases} 0,00001; & 0 \leq R_i \leq \frac{1}{4}; \\ 0,000001; & \frac{1}{4} < R_i; \\ 0,001; & R_i < 0. \end{cases}$$

$$R_i = \frac{g\rho_0 \frac{\partial \rho}{\partial z}}{\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)^2}$$

g ускорение свободного падения

ρ, ρ_0 плотность соленой воды и средняя плотность пресной воды

Радионуклидные загрязнения

- ▲ Растворенная фаза C
- ▲ Взвешенная фаза C^s
- ▲ Донный осадок C^b

Растворенная фаза

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\bar{v}_c \cdot \nabla)C = \nabla \cdot (\bar{M}_c \nabla C) - \lambda C - a_{1,2}S(K_d C - C^s), \quad (5)$$

$$K_d = C^s / C, \quad t \rightarrow \infty,$$

- C — концентрация растворенной фазы радионуклида
 $\bar{M}_c = \{\mu_c^{xy}, \mu_c^{xy}, \mu_c^z\}$ вектор коэффициентов диффузии
 $\bar{v}_c = \{u, v, w\}$ вектор скоростей
 K_d — коэффициент распределения радионуклида в водной системе в состоянии равновесия
 λ — константа радионуклидного распада
 $a_{1,2}$ — коэффициент сорбции

Растворенная фаза

граничные условия:

$$\mu_c^z \frac{\partial C}{\partial z} - wC \Big|_{\Gamma_3} = 0,$$

$$\mu_c^z \frac{\partial C}{\partial z} - \rho_s (1 - \varepsilon) Z_* a_{1.3} SK_{db} C \Big|_{\Gamma_4} =$$

$$= \rho_s (1 - \varepsilon) Z_* a_{1.3} SC^b.$$

ρ_s плотность осадка

K_{db} коэффициент распределения радионуклида в донных осадках в состоянии равновесия

Z_* эффективная толщина ила

ε пористость дна

Взвешенная фаза

$$\begin{aligned} \frac{\partial SC^s}{\partial t} + (\bar{v}_{c^s} \cdot \nabla)(SC^s) = \\ = \nabla \cdot (\bar{M}_{c^s} \nabla(SC^s)) - \lambda SC^s + a_{1.2} S(K_d C - C^s), \end{aligned} \quad (6)$$

граничные условия:

$$(w - w_s)SC^s - \mu_{c^s}^z \frac{\partial SC^s}{\partial z} \Big|_{\Gamma_3} = 0,$$

$$w_s SC^s + \mu_{c^s}^z \frac{\partial SC^s}{\partial z} \Big|_{\Gamma_4} = C^s q^s - C^b q^b$$

C^s концентрация взвешенной фазы радионуклида

$$\bar{M}_{c^s} = \left\{ \mu_{c^s}^{xy}, \mu_{c^s}^{xy}, \mu_{c^s}^z \right\} \quad \bar{v}_{c^s} = \left\{ u, v, w - w_s \right\}$$

w_s скорость оседания частицы

q^s, q^b количественная оценка оседающих и поднимающихся со дна частиц

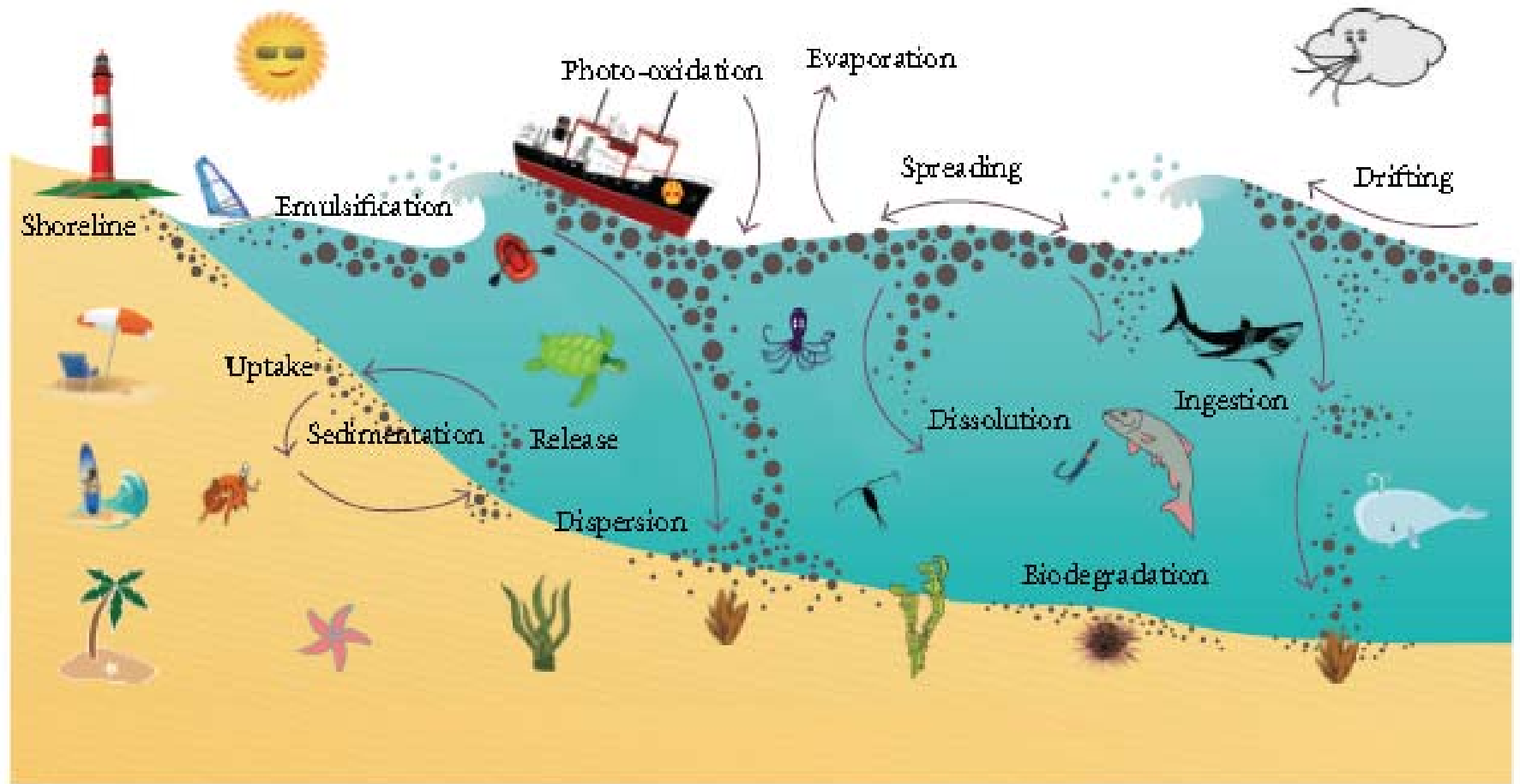
Донный осадок

$$\frac{\partial(Z_* C^b)}{\partial t} = a_{1.3} Z_* (K_{db} C - C^b) - \frac{1}{\rho_S (1 - \varepsilon)} (C^s q^s - C^b q^b) \quad (7)$$

$$\rho_S (1 - \varepsilon) \frac{\partial Z_*}{\partial z} = q^s - q^b \quad (8)$$

C^b	концентрация радионуклида в придонном слое
ρ_S	плотность осадка
K_{db}	коэффициент распределения радионуклида в донных осадках в состоянии равновесия
Z_*	эффективная толщина загрязненного ила
ε	пористость дна
$a_{1.3}$	коэффициент сорбции
q^s, q^b	количественная оценка оседающих и поднимающихся со дна частиц

Распространение нефти в водоеме



Процессы распространения нефти

- Растекание
- Деструкция
- Дрейф



Режимы растекания нефти по поверхности водоема

1. Инерционный

$$R = K_i \sqrt[4]{(\Delta \cdot g \cdot V \cdot t^2)}.$$

2. Гравитационно-вязкий

$$R = K_v \sqrt[6]{\left(\frac{\Delta \cdot g \cdot V^2 \cdot \sqrt[3]{t^2}}{\sqrt{\nu_E}}\right)}.$$

3. Режим поверхностного натяжения

$$R = K_t \sqrt[4]{\left(\frac{\sigma^2 \cdot t^3}{\rho_E^2 \nu_E}\right)}.$$

$\Delta = \frac{\rho_B - \rho_H}{\rho_B}$ – относительная плотность воды,

ν_E – кинематическая вязкость воды

$$K_i = 1,14; K_v = 1,45; K_t = 2,30$$

J.A.Fay "The spread of oil slicks on a calm sea" In: Oil on the sea, Plenum Press. - New-York, 1969, p.53-63.

Fay J.A. "Physical processes in the spread of oil on a water surface" In: Proc. of h- o Joint Conf. on prevention and control of oil spills. Washington, 1971 (cit. N8).

Режимы растекания нефти по поверхности водоема

Инерционный → Гравитационно-вязкий

$$\delta = \sqrt{v \cdot t.}$$

Гравитационно-вязкий → Режим поверхностного натяжения

$$h = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_{\text{в}} - \rho_{\text{н}})}}$$

Прекращение растекания

$$\sigma = \sigma_{\text{в/в}} - \sigma_{\text{н/в}} - \sigma_{\text{в/н}}$$

Карабалин У.С. Методы ликвидации и предупреждения аварийных ситуаций при освоении месторождений углеводородного сырья. Монография. Алматы, 2008, 185с.
Т. Сериков, Б.Б. Оразбаев, Ш.К. Коданова Математическое моделирование аварийных нефтяных загрязнений на акватории моря

Деструкция

- Испарение
 - Образование эмульсий «вода в нефти», «нефть в воде»
 - Растворение
 - Биоразложение
 - Изменения температурного режима
 - Волнение моря
-



- Уменьшение массы нефти
- Увеличение плотности и вязкости нефти

Дрейф

- Воздействие ветра
- Течение
- Поверхностное волнение

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \bar{\nabla}(h\bar{v}) - \bar{\nabla}(D\bar{\nabla}h) = R_h,$$

$$\bar{v} = \left(u_x + \frac{\tau_x^w}{C_f}, u_y + \frac{\tau_y^w}{C_f} \right),$$

$$D = \frac{gh^2(\rho_w - \rho_{oil})}{\rho_w C_f},$$

h – толщина нефти, v – скорость дрейфа пленки, $\frac{\tau_x^w}{C_f}$ – сдвиговое ветровое напряжение, D – функция диффузии распространения пятна нефти, C_f – коэффициент трения между нефтяной пленкой и поверхностью воды

Граничные и начальные условия

- Начальное распределение

$$h|_{t=0} = \frac{V}{\pi R^2}$$

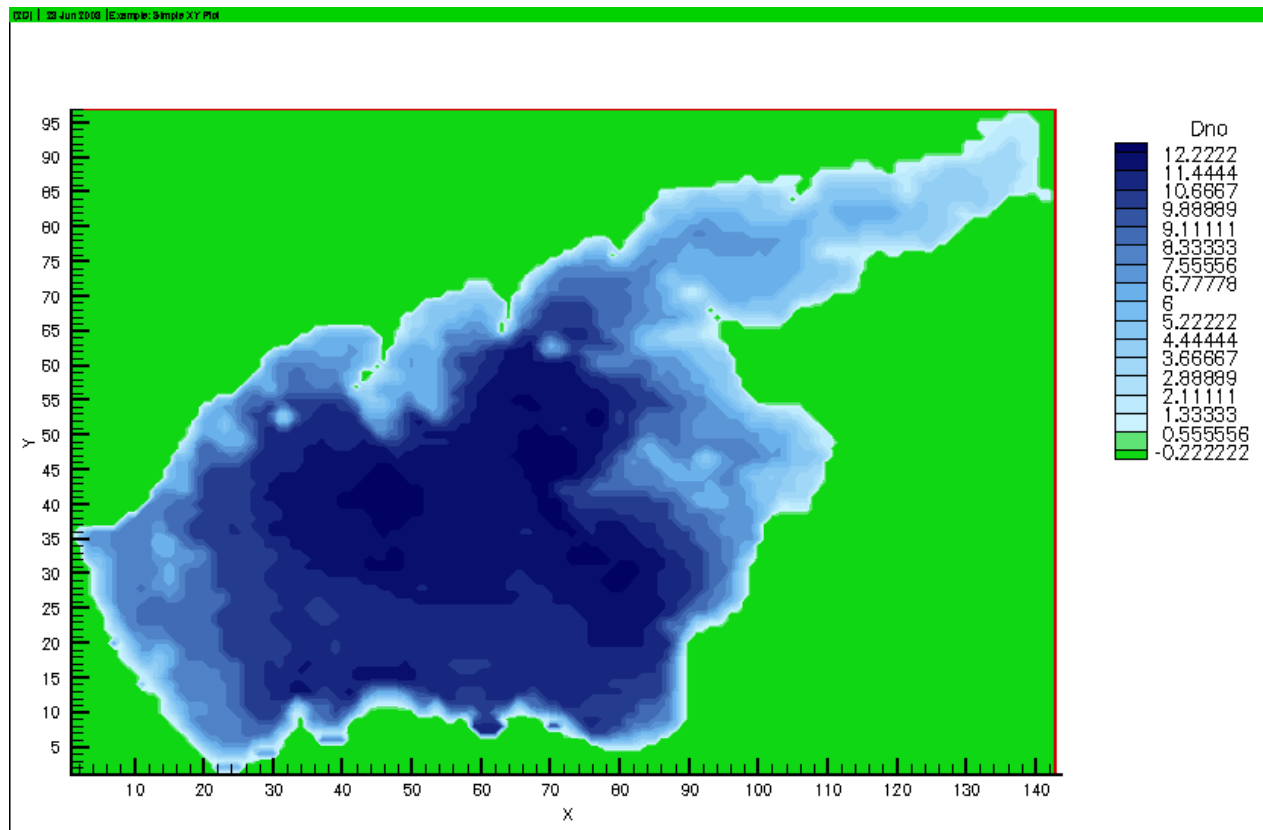
- На твердой непроницаемой боковой границе ставятся граничные условия непротекания:

$$\left. \frac{\partial h}{\partial n} \right|_{\Gamma_0} = 0$$

Модель Азовского моря

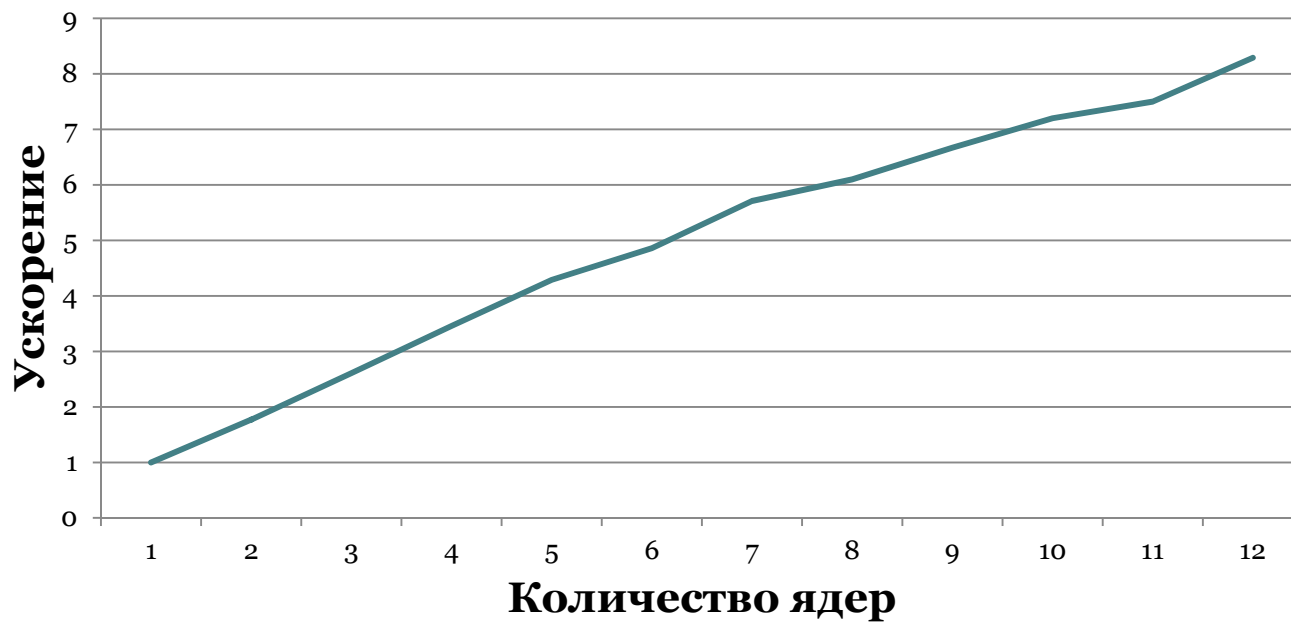
$$N_x=144, N_y=98, N_z=15$$

Общее число неизвестных ~ 53000



Высокопроизводительные вычислительные системы

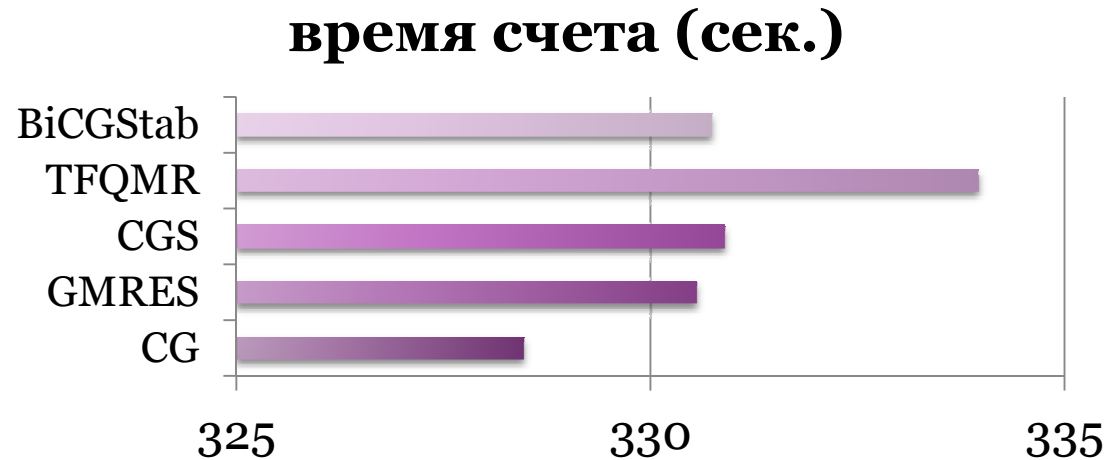
- **INFINI** – Linux-кластер, состоящий из 20 вычислительных узлов, соединенных скоростной коммуникационной сетью SDR Infiniband. Каждый вычислительный узел представляет собой компьютер с процессором Intel Pentium 4 3.4 ГГц и оперативной памятью DDR2 2Гб.
- **IBMX** – Linux-кластер, состоящий из 13 вычислительных узлов, соединенных скоростной коммуникационной сетью DDR Infiniband. Каждый вычислительный узел представляет собой компьютер с одним 2-х ядерным процессором Intel Xeon 5160 с тактовой частотой 3.0 ГГц и оперативной памятью 8Гбайт.
- **LINUX** – вычислительный кластер из 10 узлов, соединенных вычислительной сетью Gigabit Ethernet. Каждый из узлов представляет собой компьютер с процессором Pentium 4 2.4 ГГц, с 512 Мб оперативной памяти.
- **WSD** – кластер из 8-ми рабочих станций DELL с двух ядерными процессорами Intel Core 2 Duo, оперативной памятью 4 Гб и коммуникационной сетью Gigabit Ethernet.



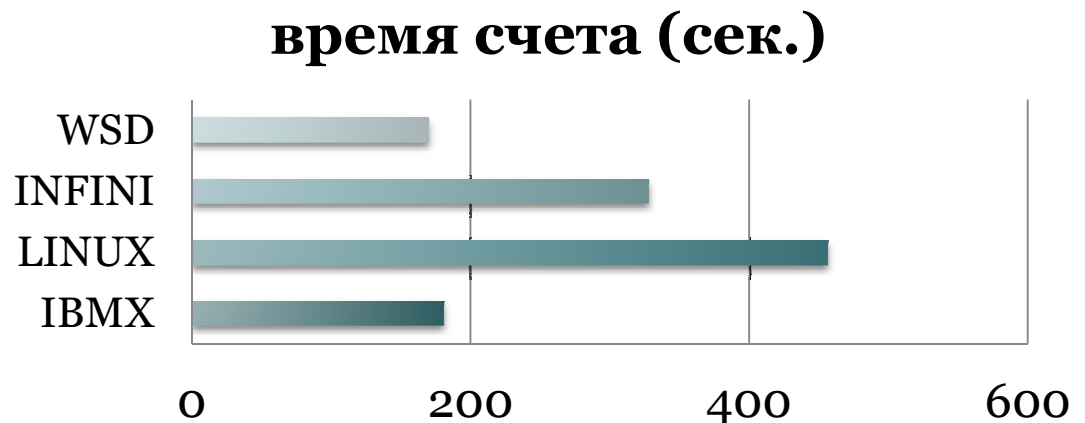
кол-во ядер	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
время счета (сек.)	360	203	138	104	84	74	63	59	54	50	48	44
ускорение	1	1,77	2,61	3,46	4,29	4,86	5,71	6,1	6,67	7,2	7,5	8,29

100 итераций

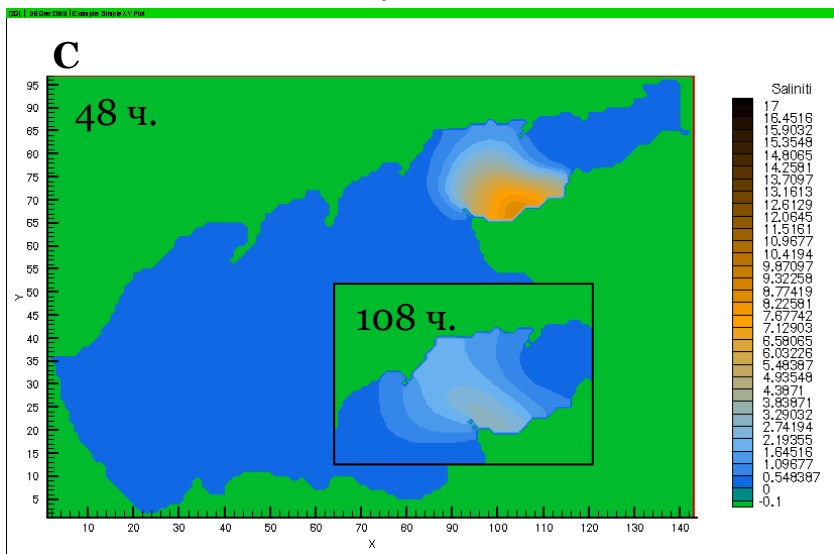
INFINI	
метод	время счета (сек.)
CG	328,46
GMRES	330,55
CGS	330,88
TFQMR	333,95
BiCGStab	330,73



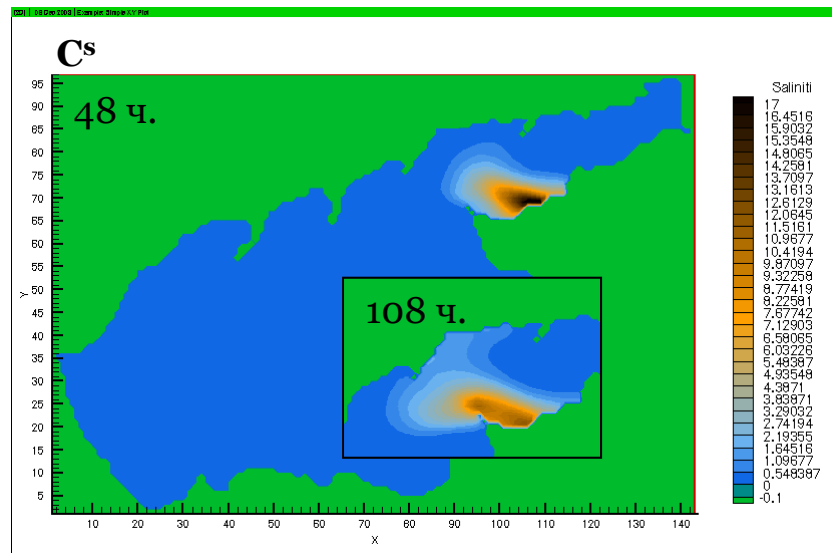
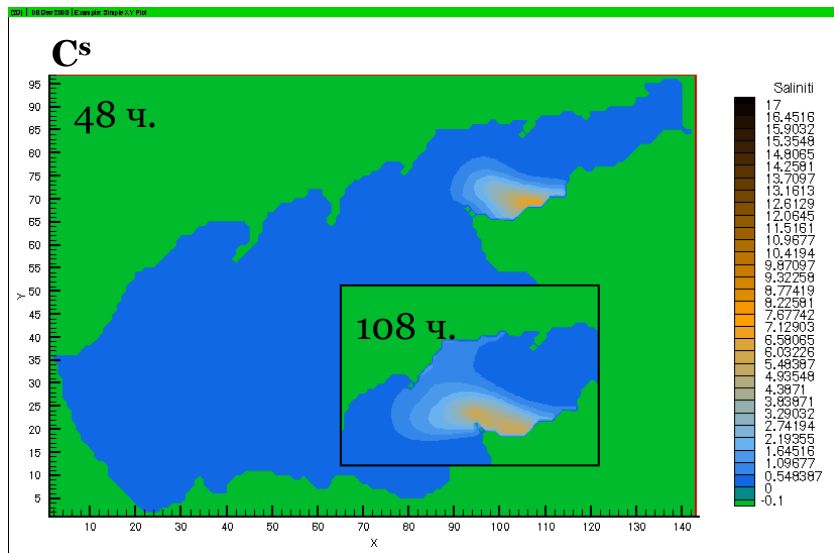
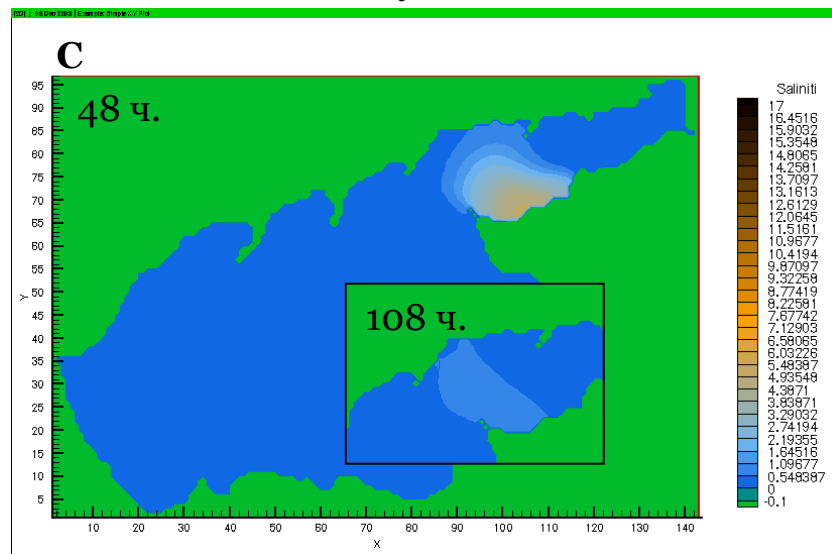
BiCGStab	
платформа	время счета (сек.)
IBMX	180,61
LINUX	456,14
INFINI	327,11
WSD	169,05



S=1y.e.

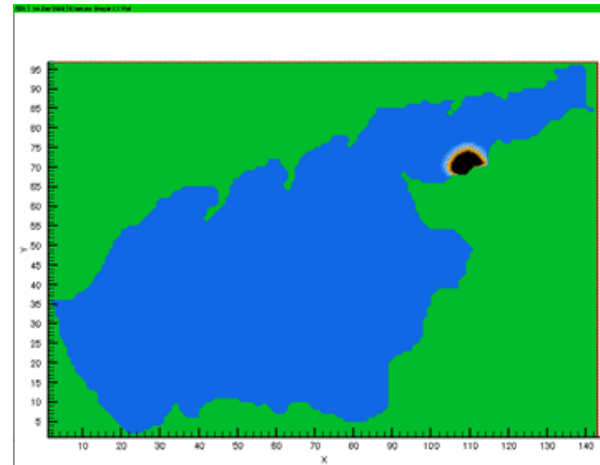


S=3y.e.



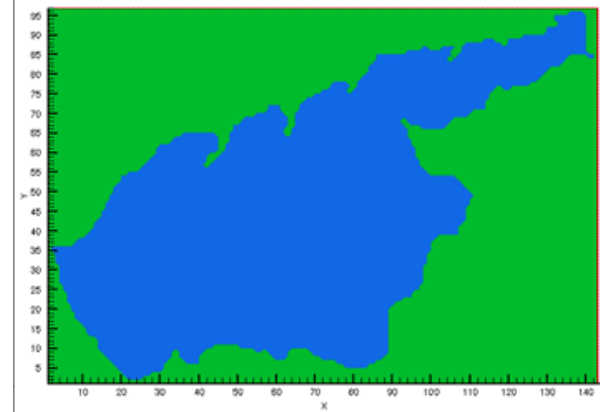
Растворенная фаза

C



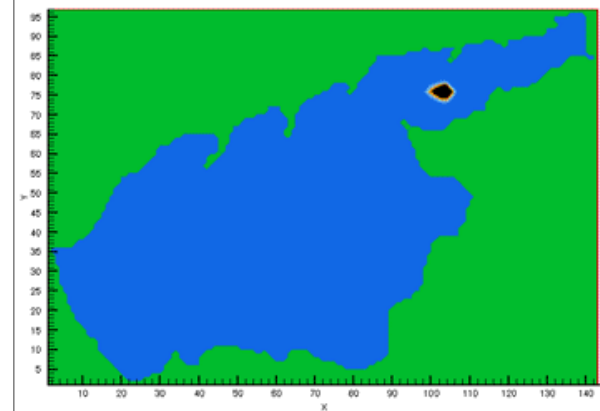
Взвешенная фаза

C^s

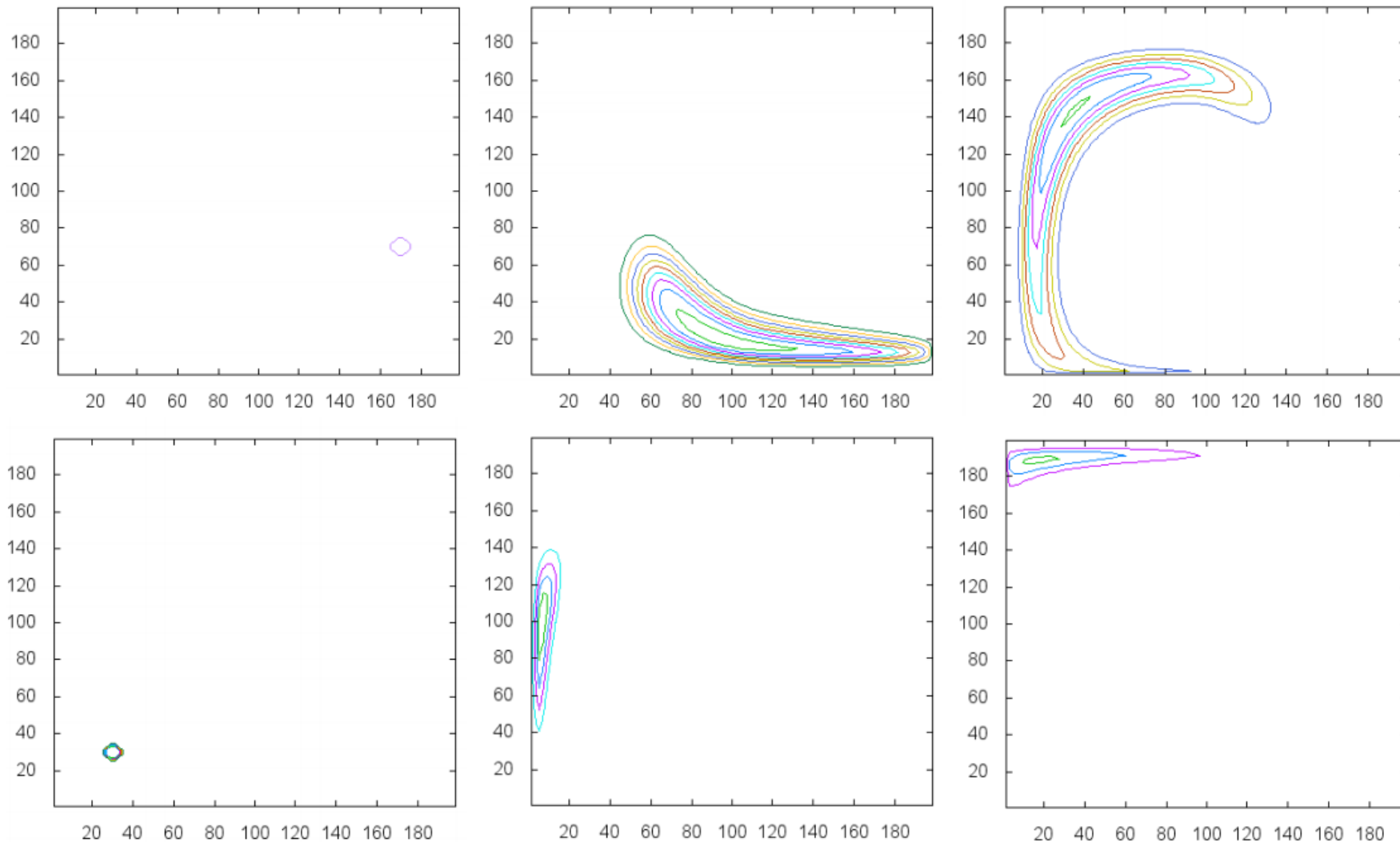


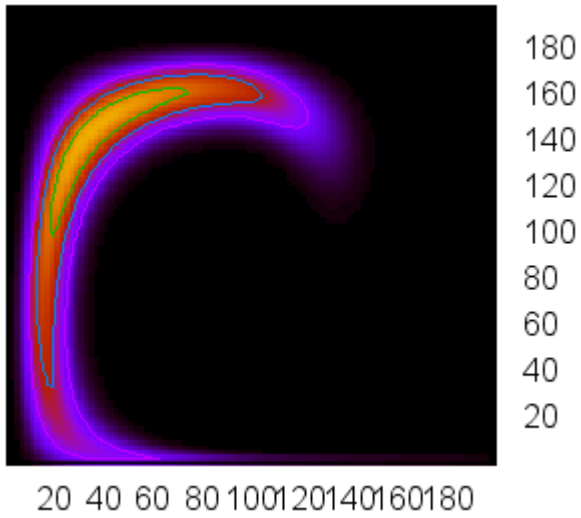
Сорбирующее вещество S

S

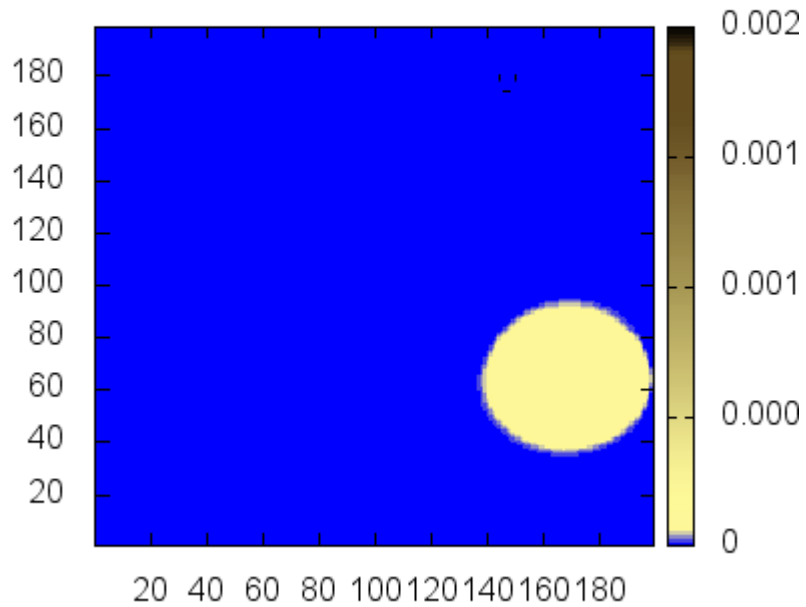


Распространение нефтяного пятна

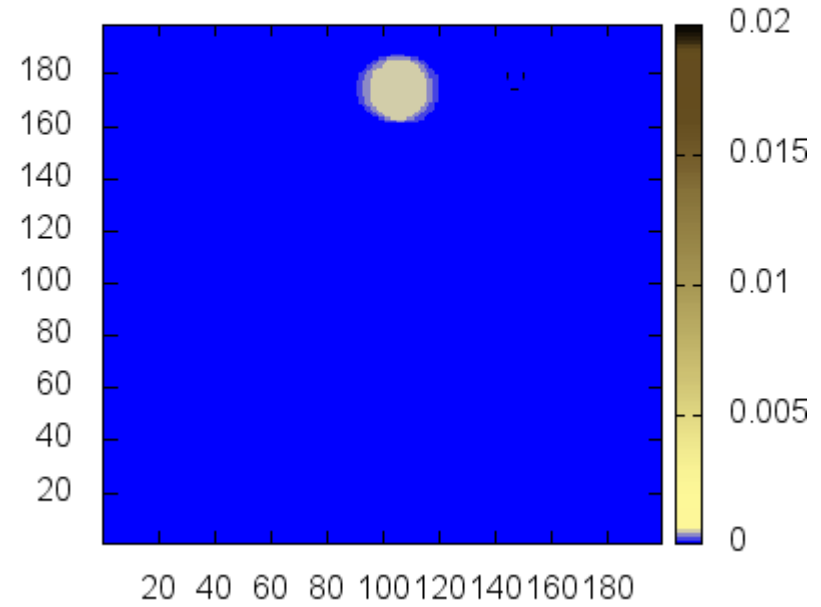




* Slick *



* Slick *



Спасибо за внимание!