

В.А. Богаенко

## Методика численного моделирования процесса электрокинетической очистки грунтов в неизотермических условиях

Рассмотрены вопросы численного моделирования процесса электрокинетической очистки грунтов. Предложены математическая модель и конечно-элементная схема решения задач относительно нее, а также особенности реализации схемы на кластерных системах и графических процессорах. Приводятся результаты численных экспериментов, показывающих высокую эффективность параллельных вычислительных схем.

The Problems of electrokinetic soil remediation numerical modeling were considered. The mathematical model and a finite element scheme for solving the problems on it have been suggested. The realization peculiarities of this scheme on clusters and graphical processing units have been considered. The numerical experiments results which show a high efficiency of parallel computational schemes have been presented.

Розглянуто питання чисельного моделювання процесу електрокінетичного очищення ґрунтів. Запропоновано математичну модель та скінченно-елементну схему розв'язання задач щодо неї, а також особливості реалізації цієї схеми на кластерних системах та графічних процесорах. Наведено результати чисельних експериментів, які показують високу ефективність паралельних обчислювальних схем.

**Введение.** Электрокинетическая очистка [1, 2] – эффективный метод выведения из грунтов растворимых загрязняющих веществ. Суть метода в наведении в грунтовом массиве напряжения, под действием которого ионы двигаются в направлении электродов, откуда в дальнейшем выводятся из грунта. Для расчета точек приложения, величины напряжения и скорости протекания такого процесса необходимо проведение математического моделирования, учитывающего такие сопутствующие факторы, как неизотермичность и релаксационность. Разработана серия математических моделей [3–8], достаточно адекватно описывающих процессы миграции загрязняющих веществ в грунтах, но не учитывающих влияние на эти процессы электрического поля. Процедуры решения задач касательно таких моделей имеют высокую вычислительную сложность, что обуславливает необходимость их адаптации для высокопродуктивных вычислительных систем, в частности кластеров.

В статье предлагается математическая модель процесса электрокинетической очистки грунтов и алгоритмы, в частности параллельные, решения задач.

### Математическая модель

Математическую модель движения засоленной жидкости в грунте под действием электрического поля строим на основе моделей,

описанных в [7–9], расширив их на случай произвольного количества солей у поровой жидкости, с учетом химических реакций между ионами этих солей, электроосмотических и электрокинетических процессов.

Модель строится, отталкиваясь от:

- обобщенного закона Дарси, учитывающего явления химического, термо- и электроосмоса:

$$\vec{u} = \text{grad}(-kH + \sum_{i=1}^{N_c} v_i C_i + \mu T + v_1 \varphi),$$

где  $\vec{u}$  – скорость фильтрации,  $H(\vec{x}, t)$  – избыточный напор,  $C_i(\vec{x}, t)$  – массовые концентрации ионов в поровой жидкости,  $T(\vec{x}, t)$  – температура,  $\varphi(\vec{x}, t)$  – потенциал электрического поля,  $k$  – коэффициент фильтрации,  $v_i$ ,  $\mu$ ,  $v_1$  – коэффициенты химического, термо- и электроосмоса,  $N_c$  – количество ионов растворенных солей;

- уравнения линейного закона уплотнения с учетом теплового расширения:

$$\text{div } \vec{u} + \frac{k}{C_v} \frac{\partial H}{\partial t} = \beta_T \sigma \frac{\partial T}{\partial t},$$

где  $C_v$  – коэффициент консолидации,  $\beta_T$  – коэффициент термического расширения,  $\sigma$  – среднее значение пористости грунта;

- учета явления термодиффузии и электрокинетики в уравнении для потоков веществ, растворенных в поровой жидкости:

$$\bar{q}_i = (\bar{u} + v_{ei} \text{grad } \varphi) C_i - D_i \text{grad}(C_i) - D_T \text{grad}(T), \quad v_{ei} = \frac{D_i e_i F}{RT},$$

где  $\bar{q}_i$  – поток для вещества  $i$ ,  $D_i$  – коэффициенты молекулярной диффузии компонентов раствора,  $e_i$  – заряды ионов, содержащихся в поровой жидкости,  $F$  – константа Фарадея,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $D_T$  – коэффициент термодиффузии.

Систему уравнений для трехмерного случая запишем в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial t} &= \text{div}(C_v \text{grad } H) - \text{div}(\text{grad } G) + \\ &+ \alpha_T \frac{\partial T}{\partial t}, \quad \alpha_T = \frac{\sigma \beta_T C_v}{k}, \\ \sigma \frac{\partial C_i}{\partial t} &= D_i \text{div}(\text{grad } C_i) + \text{div}(C_i \bar{u}_i) + D_T \text{div}(\text{grad } T) + \\ &+ \sum_{l=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{N_c} k_{ilm} C_l C_m + \sum_{l=1}^{N_c} k_{2il} C_l, \quad i=1, 2, \dots, N_c, \\ C_T \frac{\partial T}{\partial t} &= \lambda \text{div}(\text{grad } T) + \rho C_p \text{div}(T \bar{v}), \\ \varepsilon \text{div}(\text{grad } \varphi) &= \sum_{i=1}^{N_c} M_i e_i C_i, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \bar{u}_i &= \text{grad}(kH - \sum_{j=1}^{N_c} v_j C_j - \mu T - (v_1 - v_{ei})\varphi), \quad v_{ei} = \frac{D_i e_i F}{RT}, \\ G &= \sum_i \kappa_i C_i + \theta T + \nu \varphi, \quad \kappa_i = \frac{v_i C_v}{k}, \quad \theta = \frac{\mu C_v}{k}, \quad \nu = \frac{v_1 C_v}{k}, \\ \bar{v} &= \text{grad}(kH - \sum_{j=1}^{N_c} v_j C_j - \mu T - \nu_1 \varphi), \end{aligned}$$

где  $C_T, C_p$  – объемная и удельная теплоемкости поровой жидкости,  $\rho$  – плотность поровой жидкости,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности,  $M_i$  – молярные массы ионов,  $\varepsilon$  – электрическая проницаемость грунта,  $k_{ilm}$  – коэффициенты скорости химических реакций вида  $C_l + C_m \rightarrow C_i$ ,  $k_{2il}$  – коэффициенты скорости химических реакций вида  $C_l \rightarrow C_i + \dots$ ;  $\bar{x} = (x_1, x_2, x_3) \in R^3$ ,

$$\begin{aligned} \text{grad}(H) &= \left( \frac{\partial H}{\partial x_1}, \frac{\partial H}{\partial x_2}, \frac{\partial H}{\partial x_3} \right), \quad \text{div}(H) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial H}{\partial x_i}, \\ \text{div}(\text{grad}(H)) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 H}{\partial x_i^2}. \end{aligned}$$

Систему уравнений (1) дополним следующими начальными и краевыми условиями:

$$\begin{aligned} H(\bar{x}, 0) &= 0, \quad H(\bar{x}, t)|_{\Gamma_1} = H_1, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{n}} H(\bar{x}, t)|_{\Gamma_2} = 0, \\ H(\bar{x}, t)|_{\bar{A}_3} &= 0, \quad C_i(\bar{x}, 0) = 0, \quad C_i(\bar{x}, t)|_{\Gamma_1} = C_{i0}, \\ \frac{\partial}{\partial \bar{n}} C_i(\bar{x}, t)|_{\Gamma_2} &= 0, \quad C_i(\bar{x}, t)|_{\Gamma_3} = 0, \quad T(\bar{x}, 0) = T_0, \\ T(\bar{x}, t)|_{\Gamma_1} &= T_1, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{n}} T(\bar{x}, t)|_{\Gamma_2} = 0, \\ T(\bar{x}, t)|_{\Gamma_3} &= 0, \quad \varphi(\bar{x})|_{\bar{A}_4} = \varphi_b(\bar{x}), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\Gamma_1$  – часть границы области моделирования  $\Omega$ , где происходит контакт с жидкостью,  $\Gamma_2$  – непроницаемая часть границы,  $\Gamma_3$  – граница проницаемой основы,  $\Gamma_4$  – поверхность электродов,  $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4$ .

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \alpha'_T &= \frac{\alpha_T T_0}{H_1}, \quad t' = C_v t, \quad H' = H / H_1, \quad D'_i = \frac{D_i}{C_v}, \\ r_i &= \frac{D_T T_0}{C_v C_{i0}}, \quad \lambda' = \frac{\lambda}{C_T C_v}, \quad C'_i = C_i / C_{i0}, \\ T' &= T / T_0, \quad \kappa'_i = \frac{\kappa_i C_{i0}}{C_v H_1}, \quad \theta' = \frac{\theta T_0}{C_v H_1}, \quad \nu' = \frac{\nu}{C_v H_1}, \\ u' &= \frac{k H_1}{C_v}, \quad v'_i = \frac{v_i C_{i0}}{C_v}, \quad \mu' = \frac{\mu T_0}{C_v}, \quad \nu'_{li} = \frac{\nu_1 - v_{ei}}{C_v}, \\ u'_1 &= \frac{\rho C_p}{C_T} u', \quad \delta'_i = \frac{\rho C_p}{C_T} v'_i, \quad \gamma'_1 = \frac{\rho C_p}{C_T} \mu', \\ \nu'_2 &= \frac{\rho C_p}{C_T C_v} \nu_1, \quad k'_{ilm} = \frac{k_{ilm} C_{i0} C_{m0}}{C_v C_{i0}}, \quad k'_{2il} = \frac{k_{2il} C_{i0}}{C_v C_{i0}}. \end{aligned}$$

Тогда система (1) – (2) примет следующий вид (в дальнейшем знак штрих будем опускать):

$$\begin{aligned} \frac{\partial H'}{\partial t'} &= \text{div}(\text{grad } H') - \text{div}(\text{grad } G') + \alpha'_T \frac{\partial T'}{\partial t'}, \\ \sigma \frac{\partial C'_i}{\partial t'} &= D'_i \text{div}(\text{grad } C'_i) + C'_i \text{div} \bar{u}'_i + \\ &+ \bar{u}'_i \cdot \text{grad } C'_i + r_i \text{div}(\text{grad } T') + \\ &+ \sum_{l=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{N_c} k'_{ilm} C'_l C'_m + \sum_{l=1}^{N_c} k'_{2il} C'_l, \quad i=1, 2, \dots, N_c, \\ \frac{\partial T'}{\partial t'} &= \lambda' \text{div}(\text{grad } T') + T' \text{div} \bar{v}' + \bar{v}' \cdot \text{grad } T', \end{aligned}$$

$$\varepsilon \operatorname{div}(\operatorname{grad} \varphi) = \sum_{i=1}^{N_c} M_i e_i C_{i0}, \quad (3)$$

$$G' = \sum_{i=1}^{N_c} \kappa'_i C'_i + \theta' T' + \nu' \varphi,$$

$$\bar{u}'_i = \operatorname{grad}(u' H' - \sum_{j=1}^{N_c} \nu'_j C'_j - \mu' T' - \nu'_i \varphi),$$

$$\bar{v}' = \operatorname{grad}(u'_1 H' - \sum_{i=1}^{N_c} \delta'_i C'_i - \gamma'_1 T' - \nu'_2 \varphi),$$

$$\begin{aligned} H'(\bar{x}, t')|_{\Gamma_1} &= 1, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{n}} H'(\bar{x}, t') \Big|_{\Gamma_2} = \\ &= 0, \quad H'(\bar{x}, t')|_{\Gamma_3} = 0, \\ C'_i(\bar{x}, 0) &= 1, \quad C'_i(\bar{x}, t')|_{\Gamma_1} = \\ &= C'_{i1} = \frac{C_{i1}}{C_{i0}}, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{n}} C'_i(\bar{x}, t') \Big|_{\Gamma_2} = \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} &= 0, \quad C'_i(\bar{x}, t')|_{\Gamma_3} = 0, \\ T'(\bar{x}, 0) &= 1, \quad T'(\bar{x}, t')|_{\Gamma_1} = T'_1 = \\ &= \frac{T_1}{T_0}, \quad \frac{\partial}{\partial \bar{n}} T'(\bar{x}, t') \Big|_{\Gamma_2} = 0, \quad T'(\bar{x}, t')|_{\Gamma_3} = 0, \\ \varphi(\bar{x})|_{\Gamma_4} &= \varphi_b(\bar{x}). \end{aligned}$$

### Конечно-элементная дискретизация

Систему (3) – (4) дискретизируем методом конечных элементов. Будем искать ее решение в виде

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \sum_{i=1}^{N_v} s_{1i}(t) N_i^{(1)}(\bar{x}) + W_1(\bar{x}), \\ \bar{T} &= \sum_{i=1}^{N_v} s_{2i}(t) N_i^{(2)}(\bar{x}) + W_2(\bar{x}), \\ \bar{\varphi} &= \sum_{i=1}^{N_v} s_{3i}(t) N_i^{(3)}(\bar{x}) + W_3(\bar{x}), \\ \bar{C}_i &= \sum_{j=1}^{N_v} s_{3+i,j}(t) N_j^{(3+i)}(\bar{x}) + W_{3+i}(\bar{x}), \\ \bar{F} &= \{F_1, \dots, F_{3+N_c}\} = \{\bar{H}, \bar{T}, \bar{\varphi}, \{\bar{C}_i\}_{i=1}^{N_c}\}, \\ \bar{S} &= \{S_1, \dots, S_{3+N_c}\} = \{\{s_{ji}(t)\}_{i=1}^{N_v}\}_{j=1}^{3+N_c}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $N_i^{(j)}(\bar{x})$  – базисные функции  $N_v$ -мерного подпространства пространства Соболева функ-

ций, удовлетворяющих краевым условиям первого рода для соответствующих величин ( $H$  для  $j=1$  и т.д.), а  $W_i(\bar{x})$  – известные функции, удовлетворяющие этим условиям.

В качестве базисных будем использовать в одномерном случае на диапазоне  $[0,1]$  функции вида  $N_1(x) = \frac{F(x) - F(1)}{F(0) - F(1)}$ ,  $N_2(x) = 1 - N_1(x)$ ,

где  $F(x)$  выбирается как  $F(x) = x$ ,  $F(x) = e^{\lambda(x-1)}$  или  $F(x) = e^{-\lambda x}$ . Базисные функции в трехмерном случае для шестигранников со сторонами, параллельными координатным плоскостям, выбирались как произведение одномерных. Для произвольных шестигранников проводилось их линейное преобразование к шестигранникам со сторонами, параллельными координатным плоскостям. Определенные интегралы, вычисление которых необходимо в процессе расчетов, вычислялись численно с помощью пятиточечной квадратуры Гаусса в одномерном случае и 125-точечной кубатуры Гаусса в трехмерном. Для повышения точности, область интегрирования разбивалась на части (три в одномерном случае, 27 в трехмерном) и соответствующие численные методы применялись к каждой области отдельно.

Перейдя к вариационной постановке задачи (3) – (4), учитывая (5) и то, что при исполнении условий (4) второго рода

$$\begin{aligned} (\operatorname{div}(\operatorname{grad} N_i^{(m)}), N_j^{(k)}) &= \int_{\Gamma} N_j^{(k)} \frac{\partial N_i^{(m)}}{\partial \bar{n}} d\Gamma - \\ &- \int_{\Omega} \operatorname{grad} N_i^{(m)} \cdot \operatorname{grad} N_j^{(k)} d\Omega = - \sum_{l=1}^3 \left( \frac{\partial N_i^{(m)}}{\partial x_l}, \frac{\partial N_j^{(k)}}{\partial x_l} \right), \\ (\operatorname{div}(N_n^{(l)} \operatorname{grad} N_i^{(m)}), N_j^{(k)}) &= (N_n^{(l)} \operatorname{div}(\operatorname{grad} N_i^{(m)}), \\ &N_j^{(k)}) + (\operatorname{grad} N_n^{(l)} \operatorname{grad} N_i^{(m)}, N_j^{(k)}) = \\ &= \int_{\Gamma} N_n^{(l)} N_j^{(k)} \frac{\partial N_i^{(m)}}{\partial \bar{n}} d\Gamma - \int_{\Omega} N_n^{(l)} \operatorname{grad} N_i^{(m)} \times \\ &\times \operatorname{grad} N_j^{(k)} d\Omega + \sum_{r=1}^3 \left( \frac{\partial N_n^{(l)}}{\partial x_r} \frac{\partial N_i^{(m)}}{\partial x_r}, N_j^{(k)} \right) = \\ &= \sum_{r=1}^3 \left( \frac{\partial N_n^{(l)}}{\partial x_r} \frac{\partial N_i^{(m)}}{\partial x_r}, N_j^{(k)} \right) - \sum_{r=1}^3 \left( N_n^{(l)} \frac{\partial N_i^{(m)}}{\partial x_r}, \frac{\partial N_j^{(k)}}{\partial x_r} \right), \end{aligned}$$

$$(\varphi, \psi) = \int_{\Omega} \varphi(\bar{x}) \psi(\bar{x}) d\Omega,$$

получаем в трехмерном случае систему, состоящую из  $N_v(2+N_c)$  обыкновенных дифференциальных уравнений и  $N$  линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов  $\bar{S}$ :

$$M_{11} \frac{\partial S_1}{\partial t} = (\bar{M}_{11} S_1 + w_{11}) - \sum_{i=1}^{N_c} \kappa_i (\bar{M}_{1,3+i} S_{3+i} + w_{1,3+i}) - \theta (\bar{M}_{12} S_2 + w_{12}) - \nu (\bar{M}_{13} S_3 + w_{13}) + \alpha_T M_{12} \frac{\partial S_2}{\partial t}, \quad (6)$$

$$M_{22} \frac{\partial S_2}{\partial t} = \lambda (\bar{M}_{22} S_2 + w_{22}) + u_1 \tilde{S}_{21}(S_2, S_1) - \gamma_1 \tilde{S}_{22}(S_2, S_2) - \nu_2 \tilde{S}_{23}(S_2, S_3) - \sum_{i=1}^{N_c} \delta_i \tilde{S}_{2,3+i}(S_2, S_{3+i}), \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \sigma M_{3+i,3+i} \frac{\partial S_{3+i}}{\partial t} &= D_i (\bar{M}_{3+i,3+i} S_{3+i} + w_{3+i,3+i}) + \\ &+ r_i (\bar{M}_{3+i,2} S_2 + w_{3+i,2}) + u \tilde{S}_{3+i,1}(S_{3+i}, S_1) - \\ &- \mu \tilde{S}_{3+i,2}(S_{3+i}, S_2) - \nu_{1i} \tilde{S}_{3+i,3}(S_{3+i}, S_3) - \\ &- \sum_{j=1}^{N_c} \nu_j \tilde{S}_{3+i,3+j}(S_{3+i}, S_{3+j}) + \\ &+ \sum_{l=1}^{N_c} k_{2il} (M_{3+i,3+l} S_{3+l} + w_{3+l,3+i}^{(1)}) + \\ &+ \sum_{l=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{N_c} k_{1ilm} (\bar{S}_{3+i,3+i,m}^{(1)}(S_{3+l}) S_{3+m} + W_{3+l,3+m,3+i}^{(2)} S_{3+m} + \\ &+ W_{3+m,3+i,3+l}^{(2)} S_{3+l} + w_{3+m,3+l,3+i}^{(21)}), \quad i = 1, \dots, N_c, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\varepsilon (\bar{M}_{33} S_3 + w_{33}) = \sum_{i=1}^{N_c} M_i e_i C_{i0} (M_{3,3+i} S_{3+i} + w_{3+i,3}^{(1)}), \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} M_{IJ} &= \{ \{ (N_j^{(I)}, N_i^{(J)}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v}, \\ \bar{M}_{IJ} &= \{ \{ \sum_{k=1}^3 (\frac{dN_j^{(I)}}{dx_k}, \frac{dN_i^{(J)}}{dx_k}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v}, \\ \tilde{S}_{ij}(S_k, S_l) &= \bar{S}_{ij}^{(0)}(S_l) S_k + W_{jii} S_l + W_{jii} S_k + \\ &+ w_{jii}^{(2)} + \bar{S}_{jii}^{(2)}(S_l) S_k + W_{jii}^{(4)} S_l + W_{jii}^{(3)} S_k + w_{jii}^{(22)}, \\ \bar{S}_{LJK}^{(0)}(S_J) &= \{ \{ \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^{N_v} S_{Jl} (\frac{dN_l^{(J)}}{dx_k}, \frac{dN_i^{(I)}}{dx_k}, N_j^{(K)}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v}, \\ \bar{S}_{LJK}^{(1)}(S_J) &= \{ \{ \sum_{l=1}^{N_v} S_{Jl} (N_l^{(J)} N_i^{(I)}, N_j^{(K)}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v}, \end{aligned}$$

$$\bar{S}_{LJK}^{(2)}(S_J) = \{ \{ \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^{N_v} S_{Jl} (N_l^{(J)} \frac{dN_i^{(I)}}{dx_k}, \frac{dN_j^{(K)}}{dx_k}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v},$$

$$W_{LJK} = \{ \{ \sum_{k=1}^3 (\frac{dW_l}{dx_k} \frac{dN_i^{(J)}}{dx_k}, N_j^{(K)}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v},$$

$$w_{LJ}^{(1)} = \{ (W_l, N_i^{(J)}) \}_{i=1}^{N_v},$$

$$W_{LJK}^{(2)} = \{ \{ (W_l N_i^{(J)}, N_j^{(K)}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v},$$

$$W_{LJK}^{(3)} = \{ \{ \sum_{k=1}^3 (W_l \frac{dN_i^{(J)}}{dx_k}, \frac{dN_j^{(K)}}{dx_k}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v},$$

$$w_{LJ} = \{ \sum_{k=1}^3 (\frac{dW_l}{dx_k}, \frac{dN_i^{(J)}}{dx_k}) \}_{i=1}^{N_v},$$

$$W_{LJK}^{(4)} = \{ \{ \sum_{k=1}^3 (\frac{dW_l}{dx_k} N_i^{(J)}, \frac{dN_j^{(K)}}{dx_k}) \}_{i=1}^{N_v} \}_{j=1}^{N_v},$$

$$w_{LJK}^{(2)} = \{ \sum_{k=1}^3 (\frac{dW_l}{dx_k} \frac{dW_j}{dx_k}, N_i^{(K)}) \}_{i=1}^{N_v},$$

$$w_{LJK}^{(21)} = \{ (W_l W_j, N_i^{(K)}) \}_{i=1}^{N_v},$$

$$w_{LJK}^{(22)} = \{ \sum_{k=1}^3 (\frac{dW_l}{dx_k} W_j, \frac{dN_i^{(K)}}{dx_k}) \}_{i=1}^{N_v}.$$

Задачу (6)–(9) будем решать с помощью линеаризированной неявной разностной схемы [7–8, 10], которая, учитывая что  $\bar{S}_{LJK}^{(i)}(S_l) S_J = \bar{S}_{LJK}^{(i)}(S_J) S_l$ ,  $i = 0, 1, 2$ , имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} M_{11} \hat{S}_1 + \frac{\alpha_T}{\tau} M_{12} \hat{S}_2 &= -\frac{1}{\tau} M_{11} \hat{S}_1 - \frac{\alpha_T}{\tau} M_{12} \hat{S}_2 + \\ &+ (\bar{M}_{11} \hat{S}_1 + w_{11}) - \sum_{i=1}^{N_c} \kappa_i (\bar{M}_{1,3+i} \hat{S}_{3+i} + w_{1,3+i}) - \\ &- \theta (\bar{M}_{12} \hat{S}_2 + w_{12}) - \nu (\bar{M}_{13} \hat{S}_3 + w_{13}), \quad (10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} M_{22} \hat{S}_2 - u_1 \tilde{S}_{21}^{(1)}(\hat{S}_2) S_1 - \sum_{i=1}^{N_c} \delta_i \tilde{S}_{2,3+i}^{(1)}(\hat{S}_2) S_{3+i} &= \\ -\frac{1}{\tau} M_{22} \hat{S}_2 + u_1 \tilde{S}_{21}^{(2)}(\hat{S}_2) - \sum_{i=1}^{N_c} \delta_i \tilde{S}_{2,3+i}^{(2)}(\hat{S}_2) + \\ + \lambda (\bar{M}_{22} \hat{S}_2 + w_{22}) - \gamma_1 \tilde{S}_{22}(\hat{S}_2, \hat{S}_2) - \nu_2 \tilde{S}_{23}(\hat{S}_2, \hat{S}_3), \quad (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\sigma}{\tau} M_{3+i,3+i} \hat{S}_{3+i} - u \tilde{S}_{3+i,1}^{(1)}(\hat{S}_{3+i}) S_1 + \\ + \sum_{j=1}^{i-1} \nu_j \tilde{S}_{3+i,3+j}^{(1)}(\hat{S}_{3+i}) S_{3+j} - \sum_{l=1}^{N_c} k_{2il} M_{3+i,3+l} \hat{S}_{3+l} - \\ - \sum_{l=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{N_c} k_{1ilm} (\bar{S}_{3+i,3+i,m}^{(1)}(\hat{S}_{3+l}) S_{3+m} + W_{3+l,3+m,3+i}^{(2)} S_{3+m}) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\sigma}{\tau} M_{3+i,3+i} \hat{S}_{3+i} + D_i (\bar{M}_{3+i,3+i} \hat{S}_{3+i} + w_{3+i,3+i}) + \\
&+ r_i (\bar{M}_{3+i,2} \hat{S}_2 + w_{3+i,2}) - \mu \tilde{S}_{3+i,2} (\hat{S}_{3+i}, \hat{S}_2) - \\
&- v_{1i} \tilde{S}_{3+i,3} (\hat{S}_{3+i}, \hat{S}_3) - \sum_{j=i}^{N_c} v_j \tilde{S}_{3+i,3+j} (\hat{S}_{3+i}, \hat{S}_{3+j}) + \\
&+ u \tilde{S}_{3+i,1}^{(2)} (\hat{S}_{3+i}) - \sum_{j=1}^{i-1} v_j \tilde{S}_{3+i,3+j}^{(2)} (\hat{S}_{3+i}) + \\
&+ \sum_{l=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{N_c} k_{ilm} (W_{3+m,3+i,3+l}^{(2)} \hat{S}_{3+l} + w_{3+m,3+l,3+i}^{(21)}) + \\
&+ \sum_{l=1}^{N_c} k_{2il} w_{3+l,3+i}^{(1)}, \quad i = 1, \dots, N_c, \quad (12)
\end{aligned}$$

$$\varepsilon \bar{M}_{33} S_3 = -\varepsilon w_{33} + \sum_{i=1}^{N_c} M_i e_i C_{i0} (M_{3,3+i} \hat{S}_{3+i} + w_{3+i,3}^{(1)}), \quad (13)$$

где  $\tilde{S}_{ij}^{(1)}(S_k) = \bar{S}_{ij}^{(0)}(S_k) + W_{jii} + \bar{S}_{ij}^{(2)}(S_k) + W_{jii}^{(3)} S_k$ ,  
 $\tilde{S}_{ij}^{(2)}(S_k) = W_{jii} S_k + w_{jii}^{(2)} + W_{jii}^{(4)} S_k + w_{jii}^{(22)}$ ,  $S_i$  – векторы коэффициентов на текущем шаге,  $\hat{S}_i$  – векторы коэффициентов на предыдущем шаге,  $\tau$  – шаг по времени.

### Алгоритмы решения

Нахождение решения задачи относительно модели (1) на следующем шаге по времени согласно вышеизложенной схеме можно разделить на два этапа: нахождения коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) (10) – (13) и ее решения.

СЛАУ имеет свойство разреженности, а ее коэффициенты изменяются на каждом шаге по времени, так как она есть результат линеаризации системы обычных дифференциальных уравнений, полученной, в свою очередь, путем конечно-элементной дискретизации нелинейной системы дифференциальных уравнений в частных производных.

Изменяемость коэффициентов СЛАУ и разреженность системы приводит к тому, что время, потраченное на их нахождение сравнимо со временем, которое тратится на решение, что обуславливает требование к параллельным алгоритмам распараллеливать как решение СЛАУ, так и нахождение ее коэффициентов.

В случае распределенных вычислительных систем, таких, как кластеры, нахождение коэффициентов СЛАУ распараллеливается по дан-

ным, не требует обменов, и эффективность такого распараллеливания зависит только от равномерности загрузки процессоров. Тогда как решение разреженной СЛАУ итерационными методами требует выполнять обмены данными между процессами, объем которых зависит от распределения матрицы СЛАУ по системе. В связи с этим, возникает оптимизационная задача выбора оптимального по критерию быстродействия распределения данных.

Разработанный и программно реализованный параллельный алгоритм для кластерных систем учитывает особенности вычислительной схемы следующим образом:

- для решения СЛАУ (10) – (13) применяется параллельный алгоритм *BiCGStab* с блочно-строчным распределением матрицы, хранимой в сжато-строчном (*CSR*) формате;
- для минимизации обменов данными используется перенумерование строк и столбцов матрицы по алгоритму Катхила–МакКи;
- для оптимизации суммарной вычислительной эффективности нахождения коэффициентов и решения СЛАУ используется эвристический оптимизационный алгоритм, базирующийся на теоретических оценках времени работы алгоритмов с коэффициентами, вычисляющимися для конкретной системы в процессе работы.

При этом вычисления, проводимые каждым процессом, могут быть дополнительно распараллелены, используя многопоточность или графический процессор (*GPU*).

Во втором случае особенности вычислений на *GPU* и решаемой задачи учтены следующим образом:

- матрица СЛАУ для вычислений на *GPU* конвертируется в блочный сжато-строчный (*BCSR*) формат, использование которого улучшает характеристики алгоритмов решения разреженных СЛАУ в случае большого коэффициента заполненности [11], что наблюдается при решении рассматриваемой задачи;

- при вычислении коэффициентов СЛАУ, каждый блок потоков обрабатывает один конечный элемент, а каждый поток – одну из вершин этого элемента; граф связности элементов раскрашивается, и вычисления прово-

дятся последовательно по каждому цвету, что необходимо для обеспечения независимости вычислений и дает возможность использовать быструю локальную память для доступа к данным, общим для каждого конечного элемента.

### Вычислительные эксперименты

В качестве тестовой рассматривалась в одно- и трехмерном случае задача процесса электрокинетической очистки грунта. На границе области моделирования выделялись: зона поступления чистой жидкости (например, из озера), зона вытекания (например, в реку), поверхность электродов. Рассматривалась миграция в поровой жидкости следующих ионов:  $Cu^{2+}$  (индекс 0) и  $SO_4^{2-}$  (индекс 1), возникающих в процессе диссоциации сульфата меди  $CuSO_4$ ;  $H^+$  (индекс 2) и  $OH^-$  (индекс 3), возникающих в процессе электролиза. Также учитывалось образование молекул воды из ионов водорода и гидроксил иона.

Для этого взяты следующие значения коэффициентов модели (1):

- граничные и начальные условия:

$$C_{10} = 7,938 \text{ г/л}, C_{11} = 12 \text{ г/л},$$

$$C_{12} = 0,0125 \text{ г/л}, C_{13} = 0,0875 \text{ г/л}, T_0 = 10 \text{ С},$$

$$T_1 = 25 \text{ С}, H_1 = 5 \text{ м};$$

- характеристики грунтового массива:

$$\vec{l} = (1,1,1) \text{ м}, \sigma = 0,655, k = 0,01 \text{ м/сут}, a = 0,92,$$

$$c_v = \frac{k(1+\sigma)}{a\gamma} = 0,0179 \text{ м}^2/\text{сут}, \text{ где } a - \text{ коэффициент}$$

уплотнения грунта,  $\gamma = 1$  – удельный вес жидкости (все коэффициенты взяты для случая глинистых грунтов),  $\vec{l}$  – линейные размерности области моделирования;

- коэффициенты диффузии и осмоса:

$D_i = \tau D_i^u$ , где  $\tau$  – извилистость грунта (бралось значение  $\tau = 2$  из диапазона значений, измеренных в [12], а  $D_i^u$  – коэффициент ионной диффузии в воде [13]),  $D_1 = 0,00012 \text{ м}^2/\text{сут}$ ,  $D_2 = 0,000184 \text{ м}^2/\text{сут}$ ,  $D_3 = 0,0016 \text{ м}^2/\text{сут}$ ,

$$D_4 = 0,00091 \text{ м}^2/\text{сут}, \mu = 0,432 * 10^{-4} \text{ м}^2/\text{град} * \text{сут} [14];$$

$$v_1 = \sigma \frac{\varepsilon \zeta}{\eta} = 5 * 10^{-9} \frac{\text{м}^2}{\text{В} * \text{с}} = 4,32 * 10^{-4} \frac{\text{м}^2}{\text{В} * \text{сут}} [15],$$

$$v_i = \frac{k_p}{\eta} \lambda \frac{RTf}{M_i} = \frac{k}{\rho g} \lambda \frac{RTf}{M_i}, \text{ где } k_p - \text{ коэффициент}$$

проницаемости грунта,  $\eta$  – вязкость поровой жидкости,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – абсолютная температура,  $f$  – количество молей вещества, на которые диссоциирует 1 моль растворенной в поровой жидкости соли,  $g$  – ускорение свободного падения,  $\lambda$  – коэффициент отражения грунта, как полупроницаемой мембраны,  $\zeta$  – зета-потенциал интерфейса между грунтом и поровой жидкостью, откуда (для  $T = 300 \text{ К}$  и  $\lambda = 0,025$ ) [16]

$$v_1 = 0,00212 \text{ м}^5/\text{кг} * \text{сут}, v_2 = 0,00132 \text{ м}^5/\text{кг} * \text{сут};$$

- термические коэффициенты:

$$C_T = 2 * 10^6 \text{ Дж/кг} * \text{м}^3 * \text{град},$$

$$C_p = 0,8 * 10^3 \text{ Дж/кг} * \text{град}, \rho = 1100 \text{ кг/м}^3,$$

$$\lambda = 69120 \text{ Дж/м} * \text{град} * \text{сут}, \beta_T = 3,02 * 10^{-4} \text{ К}^{-1}$$

(для воды при температуре 30С) [13]

$$D_T = 0,0 \text{ м}^2/\text{сут}.$$

Граничные условия задавались следующим образом.

На зоне втекания чистой жидкости:

$$T = 0,4, C_{1\{1,2\}} = 0, C_{1\{3,4\}} = 0,$$

$T = 0,4, C_{1\{1,2\}} = 1, C_{1\{3,4\}} = 0, H = 1$  (для одномерного случая),  $H = 0$  (для трехмерного).

На зоне вытекания:  $H = 0, T = 0,25, C_{1\{1,2\}} = 0, C_{2\{3,4\}} = 0.$

На электродах:  $H = 0, T = 0,5, C_{1\{1,2\}} = 0, \varphi = \{10, -10\}, C_{13} = \{1, 0\}, C_{14} = \{0, 1\}.$

Для одномерного случая считалось, что анод совпадает с зоной втекания и является точкой  $x = 0$ , а катод – с зоной вытекания и является точкой  $x = 1$ .

Решение задачи в одномерном случае получалось, используя  $F(x) = e^{2(x-1)}$  в качестве параметра базисных функций. Ее нормализованные решения для момента безразмерного времени  $t = 0,01$ , полученные с шагом  $\tau = 5 * 10^{-6}$ , приведены на рис. 1 для  $F = 10 \text{ В}$ . Количество конечных элементов дискретизации области равнялась  $N_v = 100$ , а точность решения СЛАУ составляла  $10^{-10}$ .

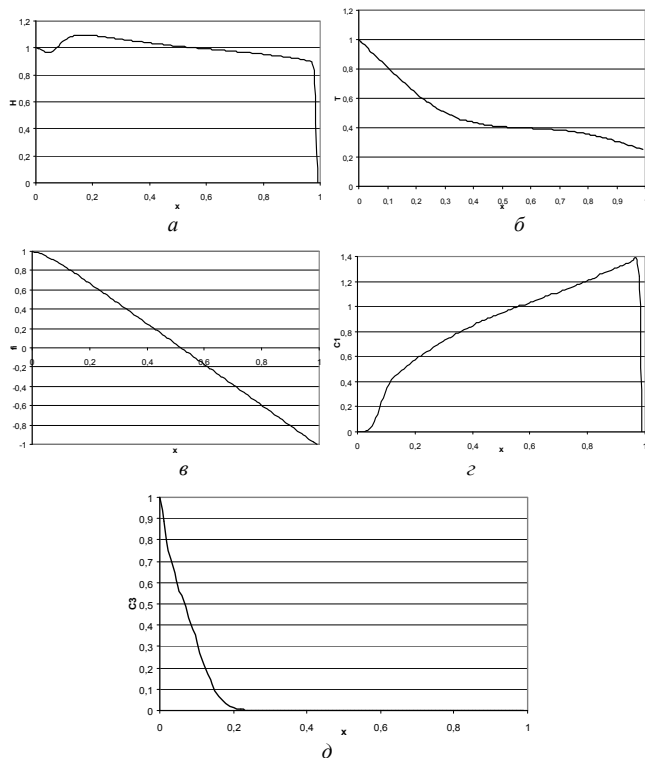


Рис. 1. Нормализованные решения задачи моделирования процесса электрокинетической очистки грунта при  $t = 0,01$ :  $a$  – избыточный напор;  $б$  – поле температуры;  $в$  – напряженность электрического поля;  $г$  – концентрация  $Cu^{2+}$ ;  $д$  – концентрация  $H^+$

В трехмерном случае концентрации веществ устанавливались так:  $C_{10} = 0,7938$  г/л,  $C_{11} = 1,2$  г/лб  $C_{12} = 0,0125$  г/л,  $C_{13} = 0,0875$  г/л, приложенный к электродам потенциал –  $\varphi = -5V$ . Решение на момент безразмерного времени  $t = 0,05$  получено с шагом  $\tau = 2,5 \cdot 10^{-5}$  и с дискретизацией области решения на 8000 конечных элементов. Решение было получено, используя  $F(x) = x$  в качестве параметра базисных функций.

Решая трехмерную задачу проводилась серия тестов по оцениванию эффективности реализованных параллельных алгоритмов на кластерах СКІТЗ Института кибернетики НАНУ. Замерялось время исполнения одной итерации вычислений и его составляющие: время вычисления коэффициентов и решения СЛАУ. Полученные данные касательно времени работы приведены в табл. 1–3, а данные относительно ускорения – на рис. 2.

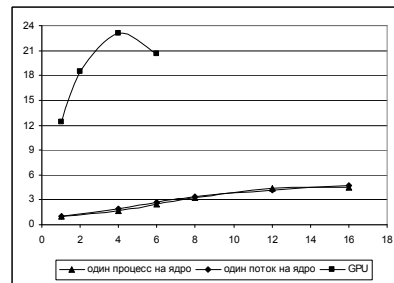


Рис. 2. Общее ускорение алгоритмов

Таблица 1. Время работы параллельного алгоритма (один процесс на ядро)

Количество задействованных ядер	Время работы, мс	Время вычисления коэффициентов СЛАУ, мс	Время решения СЛАУ, мс
1	13850	9630	4220
4	8320	4480	3840
8	4260	1530	2730
12	3130	1090	2040
16	3050	940	2110

Таблица 2. Время работы параллельного алгоритма (один поток на ядро)

Количество задействованных ядер	Время работы, мс	Время вычисления коэффициентов СЛАУ, мс	Время решения СЛАУ, мс
1	13850	9630	4220
4	7270	3560	3710
8	4050	1890	2160
12	3360	1560	1800
16	2960	1180	1780

Таблица 3. Время работы параллельного алгоритма (с использованием GPU)

Количество задействованных GPU	Время работы, мс	Время вычисления коэффициентов СЛАУ, мс	Время решения СЛАУ, мс
1	1120	670	380
2	750	410	260
4	600	290	230
6	670	250	340

**Заключение.** Из полученных данных можно сделать следующие выводы:

- ускорение параллельных алгоритмов при вычислении коэффициентов СЛАУ близкое к линейному, но в многопоточном варианте исполнения оно меньше из-за необходимости синхронизации потоков;

- ускорение решения СЛАУ больше в многопоточном варианте, так как в этом случае при неизменном времени, которое тратится на вычисления, уменьшается время, потраченное на обмен данными. Для рассматриваемой задачи

такая особенность – следствие равномерного заполнения разреженной матрицы;

• в целом, использованием многопоточности удалось ускорить вычисления не более чем на 13% и только при задействовании небольшого количества процессорных ядер;

• использование *GPU* в качестве сопроцессора существенно ускорило работу алгоритмов, однако масштабируемость в этом случае ниже, чем в варианте без использования *GPU*, что объясняется необходимостью обмена данными не только между процессами, но и между процессором и *GPU*.

1. Королев В.А. Очистка грунтов от загрязнений. – М.: Наука, Интерпериодика, 2001. – 365 с
2. Acar Yalcin B, Alshawabkeh Akram N. Principles of electrokinetic remediation // Environmental Science & Technology. – 1993. – 27 (13). – P. 2638–2647.
3. Бомба А.Я., Булавацький В.М., Скопецький В.В. Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки. – К.: Наук. думка, 2007. – 292 с.
4. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Математичне моделювання консолідації ґрунтів в процесі фільтрації сольових розчинів. – Рівне: Вид-во УДУВГП, 2004. – 211 с.
5. Власюк А.П., Мартинюк П.М. Математичне моделювання консолідації ґрунтів при фільтрації сольових розчинів в неізотермічних умовах. – Там же, 2008. – 416 с.
6. Булавацький В.М. Математическое моделирование динамики консолидационного процесса насыщенной бинарным солевым раствором пористой среды // Компьютерная математика. – 2008. – № 2. – С. 3–12.
7. Булавацький В.М., Скопецький В.В. Математическое моделирование динамики одного неізотермічного консолидационного процесса // Математичне

та комп'ютерне моделювання. Сер.: Фізико-математичні науки: Зб. наук. пр. – Кам'янець-Подільський: Нац. ун-т, 2010. – 3. – С. 28–36.

8. Булавацький В.М., Скопецький В.В. Об одной неізотермічній консолидационній математическій моделі геоінформатики // Пробл. упр. и інформатики. – 2010. – № 6. – С. 35–45.
9. Богаєнко В.О. Паралельні алгоритми моделювання процесу фільтраційної консолидації під дією двокомпонентного розчину // Математичне та комп'ютерне моделювання. Сер.: Фізико-математичні науки: Зб. наук. пр. – Кам'янець-Подільський: Нац. ун-т, 2011. – 5. – С. 28–36.
10. Самарський А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. – М: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
11. Abhijeet Gaikwad, Ioane Muni. Toke GPU based Sparse Grid Technique for Solving Multidimensional Options Pricing PDEs // Supercomputing'09, Proc. of the 2nd Workshop on High-Performance Computational Finance – SC09-WHPCF09, ACM Press, 2009, Article. – N 6.
12. Nkongolo N.V., Plassmeyer C.J. Effect of vegetation type on soil properties at Lincoln University Living Laboratory // Res. J. For. 4(1), 2010. – P. 1–13.
13. CRC handbook of chemistry and physics: A ready-reference book of chem. a. phys. data: 1987–1988. 68th / Weast R.C. (Ed.). – Cleveland (Ohio): CRC press, 1987. – 2475 p.
14. Дерягин Б.В., Чураев Н.В. Вода в дисперсных системах // Химия. – 1989. – 285 с.
15. Mitchell J.K., Soga K. Fundamentals of soil behavior. – Hoboken, 2005. – NJ: John Wiley & Sons. – 577 p.
16. Ana María Francisca Garavito Rojas. Chemical Osmosis in Clayey Sediments: Field Experiments and Numerical Modelling, Vrije Universiteit, Faculty of Earth and Life Sciences, Dept. of Hydrology and Geo-environmental Sciences, 2005. – 140 p.

Поступила 20.07.2012

Тел. для справок: +38 044 526-4167 (Київ)

E-mail: sevab@ukr.net

© В.А. Богаєнко, 2013

## Внимание !

**Оформление подписки для желающих  
опубликовать статьи в нашем журнале обязательно.**

**В розничную продажу журнал не поступает.**

**Подписной индекс 71008**