

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЗАЩИТА ИНФОРМАЦИИ

УДК 519.63

В.А. Ирхин

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМ
РЕАЛИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА
В СЛОЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ
РАЗВЕТВЛЕННОГО ТИПА**

Предлагается вычислительный алгоритм для определения параметров теплообмена в сложных технологических системах разветвленного типа. Строится математическая модель процессов теплообмена на графах. Применяются неявные конечноразностные схемы для аппроксимации уравнений теплообмена. Разрабатывается алгоритм решения полученных систем уравнений с помощью методов блочных итераций, параметрической прогонки и сжатия графов. Представляется алгоритм распараллеливания построенных алгоритмов. Приводятся результаты вычислительного эксперимента, а также изучаются ускорение и эффективность параллельных алгоритмов.

Введение

Моделирование нестационарных процессов переработки нефти, описывающих динамику двухфазных потоков многокомпонентных смесей в технологических сетях, представляет собой математическое описание основных технологических аппаратов (реакторов, печей, теплообменников, емкостей, ротационного оборудования, трубопроводов и др.). Весь процесс характеризуется несколькими сотнями динамических переменных (расходов, температур, давлений, составов и пр.) и параметров (геометрических, механических и термодинамических величин, часть из которых представляет собой фундаментальные постоянные или известные физические величины, а другая требует идентификации по данным с конкретной установки). Динамические свойства каждого аппарата и установки в целом описываются системой уравнений гидравлики, химической кинетики, материального и энергетического балансов. Описание стандартной установки включает в себя несколько сот нелинейных дифференциальных и алгебраических уравнений. Их число меняется в зависимости от требований по глубине и точности моделирования, налагаемых спецификой конкретного проекта.

1. Основные принципы построения математической модели

Модель основных технологических процессов строится как динамическая [1, 2], т. е. обеспечивается возможность ее применения к нестационарным процессам. При идентификации параметров модели используются эмпирические данные реальных технологических процессов, а также справочные зависимости для коэффициентов переноса.

Анализ структурной схемы различных технологических блоков и процессов, имеющих место при их работе, показывает, что основным физическим процессом, на котором основана работа, является теплопередача между различными потоками теплоносителей. Этот процесс осложнен фазовыми переходами между жидкой и газовой фазами при изменении температуры в газопродуктовой смеси и химическими реакциями, происходящими в реакторах.

Технологические блоки нефтеперерабатывающего предприятия обязательно содержат следующие элементы: трубопроводы, теплообменники, парогенераторы, холодильники, печи, колонны, реакторы, сепараторы, компрессоры, насосы, запорную арматуру (задвижки, клапаны) и автоматические регуляторы [3, 4]. Рассмотрим модель реакторного блока установки гидроконверсии вакуумного газойля, которая включает все вышеуказанные элементы, объединенные в одну технологическую сеть. Построение такой модели базируется на основных законах сохранения: массы, импульса, энергии и массы компонента. Рассмотрим произвольный объем

сплошной среды V , ограниченный замкнутой поверхностью S . Для этого объема записываются законы сохранения [5–8]:

– массы

$$\iiint_V \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} dV + \iint_S \hat{\rho} \cdot \nu_n dS = 0;$$

– импульса

$$\iiint_V \frac{\partial(\hat{\rho} \cdot \bar{\nu})}{\partial t} dV + \iint_S \hat{\rho} \cdot \bar{\nu} \cdot \nu_n dS = - \iint_S \hat{p} \cdot \bar{n} dS + \iint_S \bar{\tau}_n dS + \iiint_V \hat{\rho} \cdot \bar{F} dV;$$

– энергии

$$\begin{aligned} \iiint_V \frac{\partial}{\partial t} \left[\hat{\rho} \cdot \left(\hat{\varepsilon} + \frac{\nu^2}{2} \right) \right] dV + \iint_S \hat{\rho} \cdot \left(\hat{\varepsilon} + \frac{\nu^2}{2} \right) \cdot \nu_n dS = - \iint_S \hat{p} \cdot \nu_n dS + \iint_S \bar{\tau}_n \cdot \bar{\nu} dS + \\ + \iiint_V \hat{\rho} \cdot \bar{F} \cdot \bar{\nu} dV + \iiint_V \hat{Q} dV - \iint_S \bar{W} \cdot \bar{n} dS + \sum_{i=1}^{N_C} \iint_S \hat{\varepsilon}_i \cdot \hat{\rho} \cdot \hat{D}_i \cdot \frac{\partial \hat{c}_i}{\partial \bar{n}} dS; \end{aligned}$$

– массы компонента

$$\iiint_V \frac{\partial(\hat{\rho} \cdot \hat{c}_i)}{\partial t} dV + \iint_S \hat{\rho} \cdot \hat{c}_i \cdot \nu_n dS - \iint_S \hat{p} \cdot \hat{D}_i \cdot \frac{\partial \hat{c}_i}{\partial \bar{n}} dS = 0, \quad i = \overline{1, N_C - 1}; \quad \hat{c}_{N_C} = 1 - \sum_{i=1}^{N_C - 1} \hat{c}_i,$$

где $\hat{\rho}$ – плотность смеси; \hat{p} – давление смеси; $\bar{\nu}$ – скорость смеси; \hat{c}_i – массовая концентрация i -го компонента смеси; $\nu_n = \bar{\nu} \cdot \bar{n}$ – проекция $\bar{\nu}$ на внешнюю единичную нормаль \bar{n} к элементу поверхности dS ; $\bar{\tau}$ – тензор вязких напряжений; $\tau_n = \bar{\tau} \cdot \bar{n}$ – напряжение, обусловленное действием сил вязкого трения на поверхности dS с внешней нормалью \bar{n} ; \bar{F} – удельная массовая сила; $\hat{\varepsilon}$ – удельная внутренняя энергия смеси; \hat{Q} – удельная мощность источников тепла; \bar{W} – вектор плотности потока тепла в смеси; \hat{D}_i – коэффициент диффузии i -го компонента смеси, N_C – число компонент смеси. Для замыкания системы уравнений задаются уравнения состояния, описывающие термодинамические соотношения между неизвестными функциями, и соответствующие краевые условия.

Реакторный блок – это сеть, образованная различными технологическими элементами (рис. 1). По существу, реакторный блок представляет собой гидродинамические тракты, состоящие главным образом из последовательно соединенных элементов, с относительно небольшим процентом разветвлений, вводов, отводов и байпасов. Поскольку большинство потоков для газопродуктовой смеси высокотемпературные, течения сопровождаются теплообменом через стенки каналов с окружающей средой или другими потоками, омывающими наружные поверхности этих стенок. Следовательно, основой для моделирования этих процессов должны быть уравнения тепломассопереноса. В силу того что нужно моделировать весь комплекс, выдвигаются жесткие требования к скорости расчетов. По этой причине исходная трехмерная модель (с учетом того факта, что движением в направлении, перпендикулярном основному, можно пренебречь) преобразуется к одномерной модели [9, 10]

$$\frac{\partial(\rho S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \nu S)}{\partial x} = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho \nu S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \nu^2 S)}{\partial x} = -S \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \rho g \frac{dz}{dx} \right) - \mu \rho \nu |\nu|; \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho S \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho v S \left(\varepsilon + \frac{v^2}{2} \right) \right] = - \frac{\partial (p v S)}{\partial x} - \rho v g S \frac{dz}{dx} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k S \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho S \sum_{i=1}^{N_c} \left(\varepsilon_i D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) \right) + Q(T); \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho c_i S)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho c_i v S)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho S D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \right), \quad i = \overline{1, N_c - 1}, \quad c_{N_c} = 1 - \sum_{i=1}^{N_c - 1} c_i. \quad (4)$$

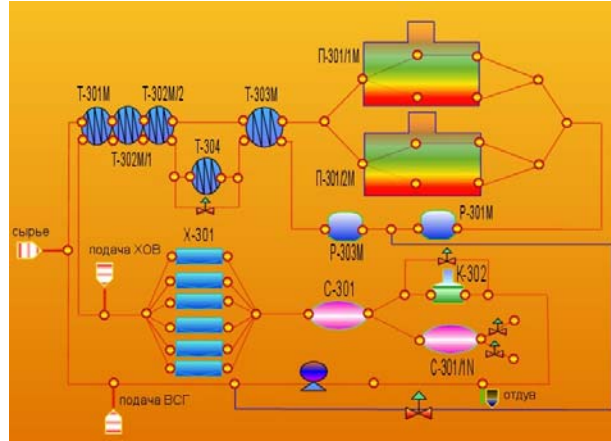


Рис. 1. Структурная схема реакторного блока

Закон сохранения энергии переписывается в энтальпийной форме, для этого используется известное соотношение термодинамики

$$\varepsilon = h - \frac{p}{\rho},$$

где $h = h(T, p, \bar{c})$ – энтальпия смеси.

Последний член в (3) может описывать как теплопередачу к стенкам канала, так и внутреннее тепловыделение. В первом случае его можно представить как [11]

$$Q = \sum_{i=1}^N \alpha_i \Pi_i (T - T_{\omega_i}),$$

где предполагается, что периметр канала разделен на n зон, имеющих разную температуру; α_i – коэффициент теплопередачи для i -й зоны; Π_i – периметр i -й зоны; T_{ω_i} – температура i -й зоны.

Для описания тепловых процессов в печах теплопередача представляется законами лучистого теплообмена [11]:

$$Q = \sum_{i=1}^N r \xi \sigma \left(T^4 - (T_{\omega_i})^4 \right),$$

где r – эффективный радиус канала; ξ – излучательный коэффициент; σ – постоянная Стефана – Больцмана.

С введением функции массового расхода $G = \rho v S \left(\left[G \right] = \frac{\text{кг}}{\text{с}} \right)$ исходная система переписывается в терминах массовых расходов.

Построенная одномерная модель может быть преобразована в квазидвухмерную, что значительно влияет на скорость расчета, но в то же время позволяет более детально моделировать аварийные ситуации, связанные с разрывом трубопровода (рис. 2).

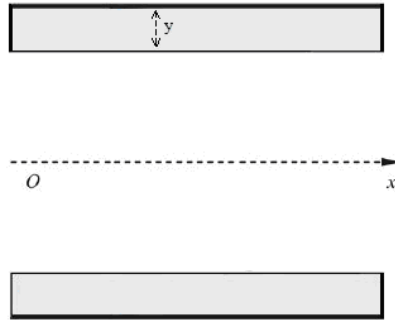


Рис. 2. Моделирование теплопроводности для стенок элементов

В данном случае для стенок элементов записывается уравнение теплопроводности и ставятся соответствующие граничные условия:

$$\frac{\partial T_b}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T_b}{\partial y^2};$$

$$-\lambda \frac{\partial T_b}{\partial t} \Big|_{y=0} = \alpha (T - T_b|_{y=0}) + r \xi \sigma (T^4 - (T_b|_{y=0})^4);$$

$$T_b|_{y=l} = T_0.$$

2. Постановка граничных условий и условий сопряжения

Моделируемый участок представляется как сеть, состоящая из соединенных между собой в определенном порядке технологических элементов. Подобного рода сеть может быть графом, в котором каналам соответствуют ребра, а точкам соединения каналов – вершины.

Графом называется пара (V, E) , где V – непустое множество вершин, E – множество пар вершин (ребер графа). На каждом ребре произвольным образом выбирается направление. Ориентированный граф – это пара (V, A) , где V – множество вершин, A – множество ориентированных ребер.

Вершины графа подразделяются на висячие (к которым примыкает только одно ребро), простые (число ребер, примыкающих к данной вершине, равно 2) и вершины с разветвлением (число примыкающих ребер больше 2). Путь называется набором ребер, соединенных последовательно простыми вершинами. Длина пути – число ребер, входящих в путь (рис. 3).

Таким образом, на всех ребрах графа задается построенная выше модель, в каждой простой вершине и вершинах разветвления необходимо задавать условия сопряжения, а в висячих – граничные условия.

В качестве условий сопряжения задаются следующие соотношения:

$$\sum_{i=1, In}^N G_{i, \text{кон}} = \sum_{j=1, Out}^M G_{j, \text{нач}};$$

$$P(t) = p_{i, \text{кон}} - \xi_{i, \text{кон}} \rho_{i, \text{кон}} v_{i, \text{кон}} |v_{i, \text{кон}}| = p_{j, \text{нач}} + \xi_{j, \text{нач}} \rho_{j, \text{нач}} v_{j, \text{нач}} |v_{j, \text{нач}}|, \quad \forall i \in In, \quad \forall j \in Out;$$

$$T_{i, \text{кон}} = T_{j, \text{нач}}, \quad \forall i \in In, \quad \forall j \in Out;$$

$$c_{k, i, \text{кон}} = c_{k, j, \text{нач}}, \quad \forall i \in In, \quad \forall j \in Out,$$

где $(*)_{\text{нач}}$ и $(*)_{\text{кон}}$ – значения параметра в начале и конце ребра соответственно; In – множество входящих в вершину ребер; Out – множество ребер, выходящих из вершины.

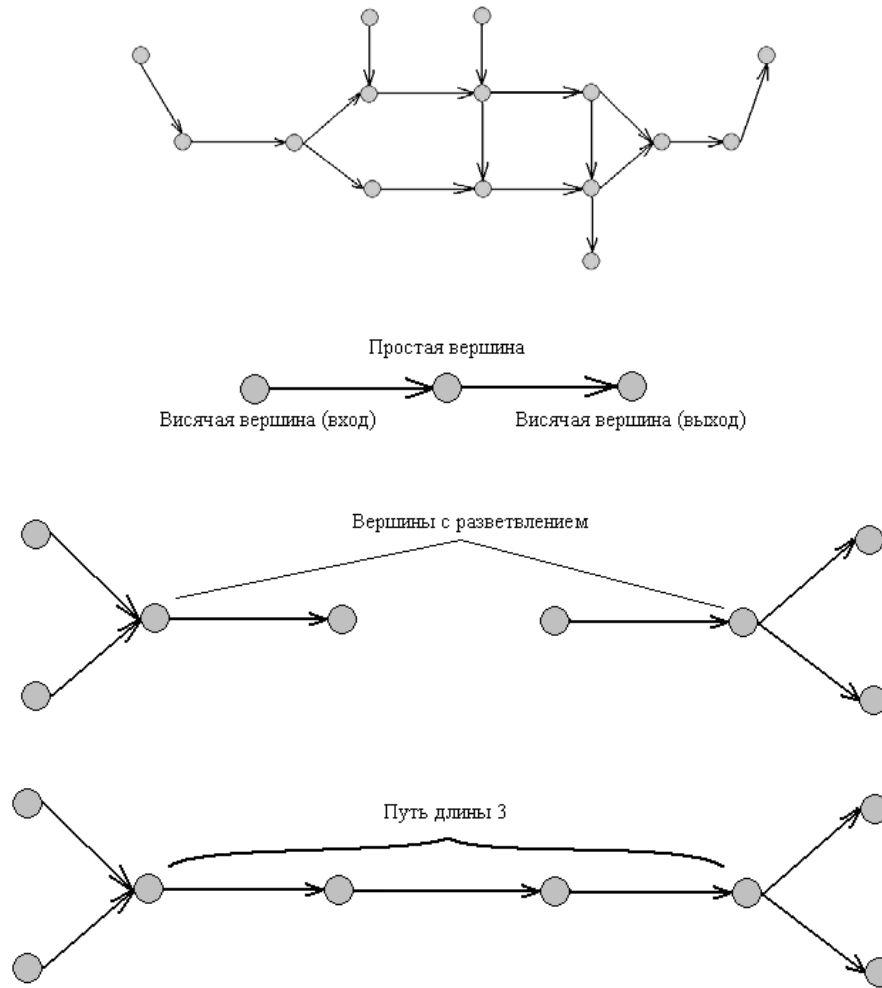


Рис. 3. Ориентированный граф и классификация вершин

Для каждой висячей вершины необходимо задать давление или массовый расход. Если $G_{i,нач} > 0$ для входящих висячих вершин, необходимо задать граничную температуру и вектор концентраций. Если $G_{i,кон} < 0$ для выходящих висячих вершин, необходима постановка граничной температуры и вектора концентраций.

3. Вычислительный алгоритм

На каждом ребре графа введем разностную сетку $\omega_{\tau h} = \omega_{\tau} \times \omega_h$, где $\omega_h = \{x_i = i \cdot h, i = \overline{0, N}, x_{i+0,5} = (i + 0,5) \cdot h, i = \overline{0, N-1}\}$ – равномерная сетка по пространству с целыми и полужелыми узлами и $\omega_{\tau} = \{t_n = t_{n-1} + \tau_{n-1}, n = \overline{0, j_0}, t_0 = 0, t_n = T\}$ – разностная сетка по времени. К полужелым узлам будем относить сеточные функции давлений, температур и векторы концентраций (однако обозначать их будем целыми числами (рис. 4)), а к целым – сеточные функции массовых расходов.

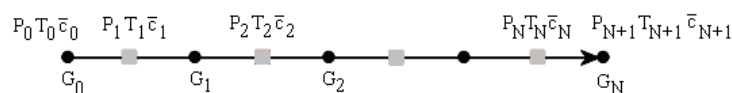


Рис. 4. Разностная сетка ω_h

Для численного анализа математической модели, используя интегроинтерполяционный метод [12], были построены чисто неявные разностные схемы:

– для уравнения баланса массы

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\tau} + \frac{G_i^{n+1} - G_{i-1}^{n+1}}{Sh} = 0, \quad i = \overline{1, N};$$

– уравнения баланса импульса

$$\begin{aligned} & \frac{G_i^{n+1} - G_i^n}{\tau} + \frac{(G_{i+1}^{n+1} + G_i^{n+1} - |G_{i+1}^{n+1} + G_i^{n+1}|)}{2\rho_{i+1}^{n+1}Sh} (G_{i+1}^{n+1} - G_i^{n+1}) + \\ & + \frac{(G_i^{n+1} + G_{i-1}^{n+1} + |G_i^{n+1} + G_{i-1}^{n+1}|)}{2\rho_i^{n+1}Sh} (G_i^{n+1} - G_{i-1}^{n+1}) + \frac{(G_i^{n+1})^2}{Sh} \left(\frac{1}{\rho_{i+1}^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^{n+1}} \right) = \\ & = -S \left(\frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{h} + \frac{(\rho_{i+1}^{n+1} + \rho_i^{n+1})}{2} g \frac{dz(x_i)}{dx} \right) - 2\mu \frac{G_i^{n+1} |G_i^{n+1}|}{(\rho_{i+1}^{n+1} + \rho_i^{n+1})S^2}, \quad i = \overline{1, N-1}; \\ & \frac{G_i^{n+1} - G_i^n}{\tau} + \frac{(G_{i+1}^{n+1} + G_i^{n+1} - |G_{i+1}^{n+1} + G_i^{n+1}|)}{2\rho_{i+1}^{n+1}Sh} (G_{i+1}^{n+1} - G_i^{n+1}) + \frac{2(G_i^{n+1})^2}{Sh} \left(\frac{1}{\rho_{i+1}^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^{n+1}} \right) = \\ & = -S \left(2 \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{h} + \rho_i^{n+1} g \frac{dz(x_i)}{dx} \right) - \mu \frac{G_i^{n+1} |G_i^{n+1}|}{\rho_i^{n+1}S^2}, \quad i = 0; \\ & \frac{G_i^{n+1} - G_i^n}{\tau} + \frac{(G_i^{n+1} + G_{i-1}^{n+1} + |G_i^{n+1} + G_{i-1}^{n+1}|)}{2\rho_i^{n+1}Sh} (G_i^{n+1} - G_{i-1}^{n+1}) + \frac{2(G_i^{n+1})^2}{Sh} \left(\frac{1}{\rho_{i+1}^{n+1}} - \frac{1}{\rho_i^{n+1}} \right) = \\ & = -S \left(2 \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{h} + \rho_{i+1}^{n+1} g \frac{dz(x_{i+1})}{dx} \right) - \mu \frac{G_i^{n+1} |G_i^{n+1}|}{\rho_{i+1}^{n+1}S^2}, \quad i = N; \end{aligned}$$

– уравнения баланса энергии

$$\begin{aligned} & \rho_i^{n+1} c_{pi}^{n+1} \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} + \nu_{-i}^{n+1} \frac{T_i^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}}{h_{-i}} + \nu_{+i}^{n+1} \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{h_{+i}} \right) = \varepsilon_T \frac{2}{h_{-i} + h_{+i}} \left(\frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{h_{+i}} - \frac{T_i^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}}{h_{-i}} \right) + \\ & + \frac{p_i^{n+1} - p_i^n}{\tau} + \nu_{-i}^{n+1} \frac{p_i^{n+1} - p_{i-1}^{n+1}}{h_{-i}} + \nu_{+i}^{n+1} \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{h_{+i}} + \mu \frac{|G_{i-1}^{n+1} + G_i^{n+1}|^3}{8(\rho_i^{n+1})^2 S^3} + \frac{1}{S} Q(T_i^{n+1}), \quad i = \overline{1, N}; \\ & \rho_i^{n+1} c_{pi}^{n+1} \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} + \nu_{+i}^{n+1} \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{h_{+i}} \right) = \frac{p_i^{n+1} - p_i^n}{\tau} + \nu_{+i}^{n+1} \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{h_{+i}} + \\ & + \mu \frac{|G_{i-1}^{n+1} + G_i^{n+1}|^3}{8(\rho_i^{n+1})^2 S^3} + \frac{1}{S} Q(T_i^{n+1}), \quad i = 0; \\ & \rho_i^{n+1} c_{pi}^{n+1} \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} + \nu_{-i}^{n+1} \frac{T_i^{n+1} - T_{i-1}^{n+1}}{h_{-i}} \right) = \frac{p_i^{n+1} - p_i^n}{\tau} + \nu_{-i}^{n+1} \frac{p_i^{n+1} - p_{i-1}^{n+1}}{h_{-i}} + \\ & + \mu \frac{|G_{i-1}^{n+1} + G_i^{n+1}|^3}{8(\rho_i^{n+1})^2 S^3} + \frac{1}{S} Q(T_i^{n+1}), \quad i = N+1, \end{aligned}$$

где ε_T – малый параметр;

$$h_{-,i} = \begin{cases} \frac{h}{2} & \text{при } i = \{1, N+1\}, \\ h & \text{при } i = \overline{2, N}; \end{cases} \quad h_{+,i} = \begin{cases} h & \text{при } i = \overline{1, N-1}, \\ \frac{h}{2} & \text{при } i = \{0, N\}; \end{cases}$$

$$v_{-,i}^{n+1} = \begin{cases} \frac{G_{i-1}^{n+1} + G_i^{n+1} + |G_{i-1}^{n+1} + G_i^{n+1}|}{4\rho_i^{n+1}S} & \text{при } i = \overline{1, N}, \\ \frac{G_{i-1}^{n+1} + |G_{i-1}^{n+1}|}{2\rho_i^{n+1}S} & \text{при } i = N+1; \end{cases}$$

$$v_{+,i}^{n+1} = \begin{cases} \frac{G_i^{n+1} - |G_i^{n+1}|}{2\rho_i^{n+1}S} & \text{при } i = 0, \\ \frac{G_{i-1}^{n+1} + G_i^{n+1} - |G_{i-1}^{n+1} + G_i^{n+1}|}{4\rho_i^{n+1}S} & \text{при } i = \overline{1, N}. \end{cases}$$

При аппроксимации с помощью неявных разностных схем уравнений математической физики, заданных на графе и описывающих неизоэтермические течения жидкости и газов, и применении модифицированного метода Ньютона необходимо решать системы линейных алгебраических уравнений с почти трехдиагональной матрицей. Такие задачи возникают для нахождения давлений и массовых расходов (первая стадия), температур (вторая стадия) и вектора концентраций (третья стадия). Применяемый итерационный метод называется методом блочных итераций (рис. 5).



Рис. 5. Метод блочных итераций

Для построения экономичного вычислительного алгоритма решения поставленной задачи воспользуемся формулами параметрической прогонки.

Рассмотрим ориентированный граф $G(V, E)$, где $V = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ – непустое множество вершин и $E = \{e_1, e_2, \dots, e_M\}$ – множество пар вершин (ребер графа). Пусть на e_i -м ребре графа задана система уравнений

$$A_i x_i = -f_i,$$

где

$$A_i = \begin{pmatrix} a_1^i & -c_1^i & b_1^i & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2^i & -c_2^i & b_2^i & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{K_i-1}^i & -c_{K_i-1}^i & b_{K_i-1}^i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{K_i}^i & -c_{K_i}^i & b_{K_i}^i \end{pmatrix}; \quad x_i = \begin{pmatrix} x_a^i \\ x_1^i \\ \dots \\ x_{K_i}^i \\ x_b^i \end{pmatrix}; \quad f_i = \begin{pmatrix} f_1^i \\ f_2^i \\ \dots \\ f_{K_i-1}^i \\ f_{K_i}^i \end{pmatrix}.$$

Здесь x_a^i, x_b^i – неизвестные в начальной и конечной вершинах i -го ребра графа.

В висячих вершинах графа (степень которых равна 1) задаются граничные условия: $x_{v_k} = r_{v_k}, k = \overline{1, N_1}, V_1 = \{v_{\xi_1}, v_{\xi_2}, \dots, v_{\xi_{N_1}}\} \in V$ – множество висячих вершин, а во внутренних – условия сопряжения:

$$a_u x_u = \sum_{i=1}^{N_{in}^u} a_{in,i} x_{K_i}^i + \sum_{j=1}^{N_{out}^u} a_{out,j} x_j^j + f_u, \quad \forall v_u \in V \setminus V_1. \quad (5)$$

Рассмотрим систему уравнений с трехдиагональной матрицей

$$Ax = -f,$$

где

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & -c_1 & b_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & -c_2 & b_2 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{N-1} & -c_{N-1} & b_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_N & -c_N & b_N \end{pmatrix}; \quad x_i = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \dots \\ x_N \\ x_{N+1} \end{pmatrix}; \quad f_i = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-1} \\ f_N \end{pmatrix};$$

формулы правой и левой параметрической прогонки имеют вид

$$x_{i+1} = \theta_{11,i+1} x_i + \theta_{12,i+1} x_{N+1} + \theta_{13,i+1}, \quad i = \overline{0, N};$$

$$x_{i-1} = \theta_{21,i-1} x_0 + \theta_{22,i-1} x_i + \theta_{23,i-1}, \quad i = \overline{1, N+1}.$$

Применяя метод параметрической прогонки к каждому ребру, получим

$$x_1^i = \theta_{11,1}^i x_a^i + \theta_{12,1}^i x_b^i + \theta_{13,1}^i; \quad (6)$$

$$x_{K_i}^i = \theta_{21,K_i}^i x_a^i + \theta_{22,K_i}^i x_b^i + \theta_{23,K_i}^i. \quad (7)$$

Подставив полученные выражения для неизвестных (6), (7) в уравнения (5), заданные для внутренних вершин графа, запишем

$$\tilde{a}_u x_u = \sum_{i=1}^{N_{in}^u} \tilde{a}_{in,i} x_{v_{in}}^i + \sum_{j=1}^{N_{out}^u} \tilde{a}_{out,j} x_{v_{out}}^j + \tilde{f}_u, \quad \forall v_u \in V \setminus V_1,$$

где $x_{v_{in}}^i, x_{v_{out}}^j$ – значения неизвестных в вершинах, соседних вершине v_u .

Получим систему уравнений

$$A_u x_u = -f_u,$$

где размерность матрицы A равна числу внутренних вершин. После решения этой системы значения неизвестных на ребрах графа определяются по формулам параметрической прогонки. В то же время для простых вершин графа задано уравнение с тремя неизвестными. Используя этот факт и применяя параметрическую прогонку ко всем путям (а не ребрам), размерность матрицы системы можно уменьшить до числа внутренних вершин с разветвлением. Если же пойти еще дальше и для полученного графа опять применить параметрическую прогонку, то опять уменьшится число неизвестных. Таким образом, получаем итерационную процедуру сведения исходного графа (узлы разностной сетки рассматриваем так же, как вершины графа) к его минору. Соответственно получим систему уравнений $\hat{A}_u \hat{x}_u = -\hat{f}_u$, где размерность матрицы \hat{A}_u равна числу вершин с разветвлением минора исходного графа. В случае когда минор не имеет вершин с разветвлением, неизвестные находятся по формулам скалярной прогонки.

4. Распараллеливание вычислительного алгоритма

В последнее время с развитием вычислительной техники (появлением многоядерных и многопроцессорных компьютеров, кластерных систем) выдвигается очень важное требование к разрабатываемым алгоритмам – необходимость их распараллеливания. В связи с этим предлагается алгоритм, позволяющий распараллеливать решение исходных систем (рис. 6). Как было показано выше, основная вычислительная сложность лежит на выполнении параметрической прогонки. В то же время прогонка для одного пути никак не связана с выполнением параметрической прогонки для другого.

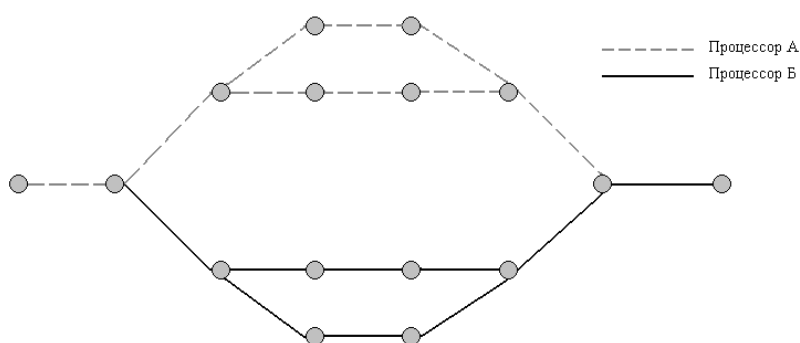


Рис. 6. Распараллеленный алгоритм для двух процессоров исходного тестового графа

Разработан следующий алгоритм:

1. Выделение множества путей в исходном графе $\Pi = \{\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{N_\Pi}\}$.
2. Сортировка путей в этом множестве по убыванию числа вершин $\hat{\Pi} = \{\hat{\Pi}_1, \hat{\Pi}_2, \dots, \hat{\Pi}_{N_\Pi}\}$.
3. Разделение множества на K_p (число процессоров, $K_p < N_\Pi$) подмножеств по порядку следования путей в отсортированном множестве $\hat{\Pi}$, т. е. $\pi_1 = \{\hat{\Pi}_1, \hat{\Pi}_{K_p+1}, \hat{\Pi}_{2K_p+1}, \dots\}$, $\pi_2 = \{\hat{\Pi}_2, \hat{\Pi}_{K_p+2}, \hat{\Pi}_{2K_p+2}, \dots\}$, \dots , $\pi_{K_p} = \{\hat{\Pi}_{K_p}, \hat{\Pi}_{2K_p}, \hat{\Pi}_{3K_p}, \dots\}$.
4. Назначение множества π_i i -му процессору.
5. Выполнение параметрической прогонки и заполнение неизвестных значений параметров на отдельном процессоре.

5. Вычислительный эксперимент

Для определения ускорения и эффективности распараллеленных алгоритмов была проведена серия экспериментов на двухъядерном компьютере (Pentium 4, 3 ГГц, ОЗУ 2 Гб).

Ускорением параллельного алгоритма называется отношение

$$S_p = \frac{T_1}{T_p},$$

где T_p – время вычисления задачи на p процессорах.

С ускорением связана эффективность параллельного алгоритма. Эффективностью параллельного алгоритма называется величина

$$E_p = \frac{S_p}{p}.$$

Эксперимент 1 (рис. 7, а; табл. 1): число интервалов разбиения по каждому ребру равно 100, максимальный шаг по времени 0,1 с.

Таблица 1

Данные эксперимента 1

Параметры	Модельное время, с		
	100	1000	10 000
Время расчета алгоритма	1,75	20,85	144,18
Время расчета распараллеленной версии алгоритма	1,68	17,31	138,50
Ускорение	1,041	1,040	1,041
Эффективность	0,502	0,502	0,502

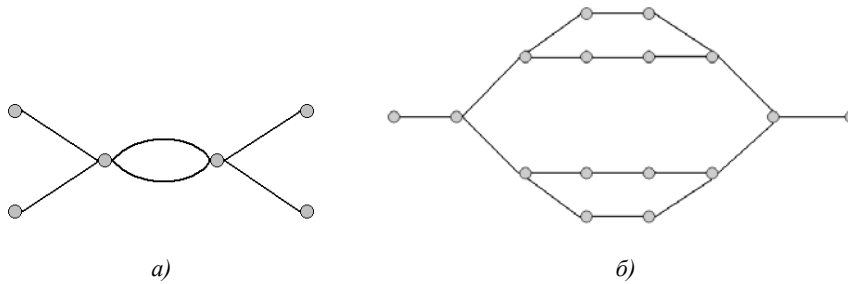


Рис. 7. Изображения графа: а) для экспериментов 1 и 2; б) для эксперимента 3

Эксперимент 2 (рис. 7, а; табл. 2): число интервалов разбиения по каждому ребру равно 1000, максимальный шаг по времени 0,1 с.

Таблица 2

Данные эксперимента 2

Параметры	Модельное время, с		
	10	100	1000
Время расчета алгоритма	1,57	13,29	125,68
Время расчета распараллеленной версии алгоритма	1,33	11,24	106,42
Ускорение	1,182	1,182	1,181
Эффективность	0,591	0,591	0,591

Эксперимент 3 (рис. 7, б; табл. 3): число интервалов разбиения по каждому ребру равно 100, максимальный шаг по времени 0,1 с.

Таблица 3

Данные эксперимента 3

Параметры	Модельное время, с		
	100	1000	10 000
Время расчета алгоритма	6,17	67,67	748,11
Время расчета распараллеленной версии алгоритма	5,52	60,42	667,96
Ускорение	1,119	1,120	1,120
Эффективность	0,56	0,56	0,56

Эксперимент 4 проводился на графе (в нем 155 вершин и 160 ребер), описывающем схему реакторного блока. В основе этого эксперимента лежал процесс запуска реакторного блока и вывод его на нормальный режим работы.

Опишем технологические процессы, протекающие в реакторном блоке. Циркулирующий водородсодержащий газ компрессором ЦК-301 подается на смешение с сырьем. Смесь сырья и водородсодержащего газа – газосырьевая смесь – проходит последовательно теплообменники Т-301М, Т-302М, Т-303М по межтрубному пространству, где нагревается за счет тепла газопродуктовой смеси и направляется далее в печь П-301М для нагрева до температуры реакции 390–415°C (в начале и в конце цикла реакции) в режиме гидрокрекинга. Из печи П-301М газосырьевая смесь направляется в реактор гидроконверсии Р-301М, где при давлении на входе 55–57 кг/см² и температуре 390–415°C проходят реакции гидроочистки (в большей степени) и гидрокрекинга (частично). Газопродуктовая смесь из реактора Р-301М направляется в реактор гидроконверсии Р-303М, где при давлении на входе 53–55 кг/см² и температуре 390–415°C за счет реакции гидрокрекинга достигается заданная степень превращения сырья. Процесс гидроконверсии в реакторе Р-301М протекает с выделением тепла, поэтому для поддержания требуемой температуры на входе в реактор Р-303М предусмотрена подача водородсодержащего газа от компрессора ЦК-301. После реактора Р-303М газопродуктовая смесь проходит по трубному пространству теплообменника Т-303М, где охлаждается газосырьевым потоком. Затем газопродуктовый поток направляется в трубное пространство теплообменника Т-304, где отдает тепло сырью колонны стабилизации. Для регулирования температуры питания колонны стабилизации предусмотрена возможность перепуска части потока газопродуктовой смеси по байпасу. Далее продуктовая смесь проходит последовательно по трубному пространству теплообменников Т-302М и Т-301М, где отдает свое тепло газосырьевой смеси и поступает в воздушный холодильник Х-301. Смесь газопродуктового потока и промывной воды проходит воздушные холодильники Х-301 (шесть штук), где охлаждается до 50–55 °С и поступает в сепаратор С-301. В сепараторе С-301 газопродуктовая смесь разделяется на газ и жидкость. Водородсодержащий газ из сепаратора С-301 направляется на очистку от сероводорода в абсорбер К-302 и дальше опять подается на компрессор ЦК-301. Жидкая фаза из сепаратора С-301 направляется дальше на разделение в трехфазный сепаратор С-301/1N. В сепараторе С-301/1N выделяется углеводородный газ, а также происходит разделение жидкости на водную фазу – сероводородную воду и углеводородную фазу – нестабильный гидрогенизат.

Эксперимент 4 (рис. 8, табл. 4): число интервалов разбиения по каждому ребру равно 10, максимальный шаг по времени 0,1 с.

Таблица 4

Данные эксперимента 4

Параметры	Модельное время, с	
	1000	10 000
Время расчета алгоритма	854,23	9001,97
Время расчета распараллеленной версии алгоритма	589,12	6294,4
Ускорение	1,45	1,43
Эффективность	0,725	0,715

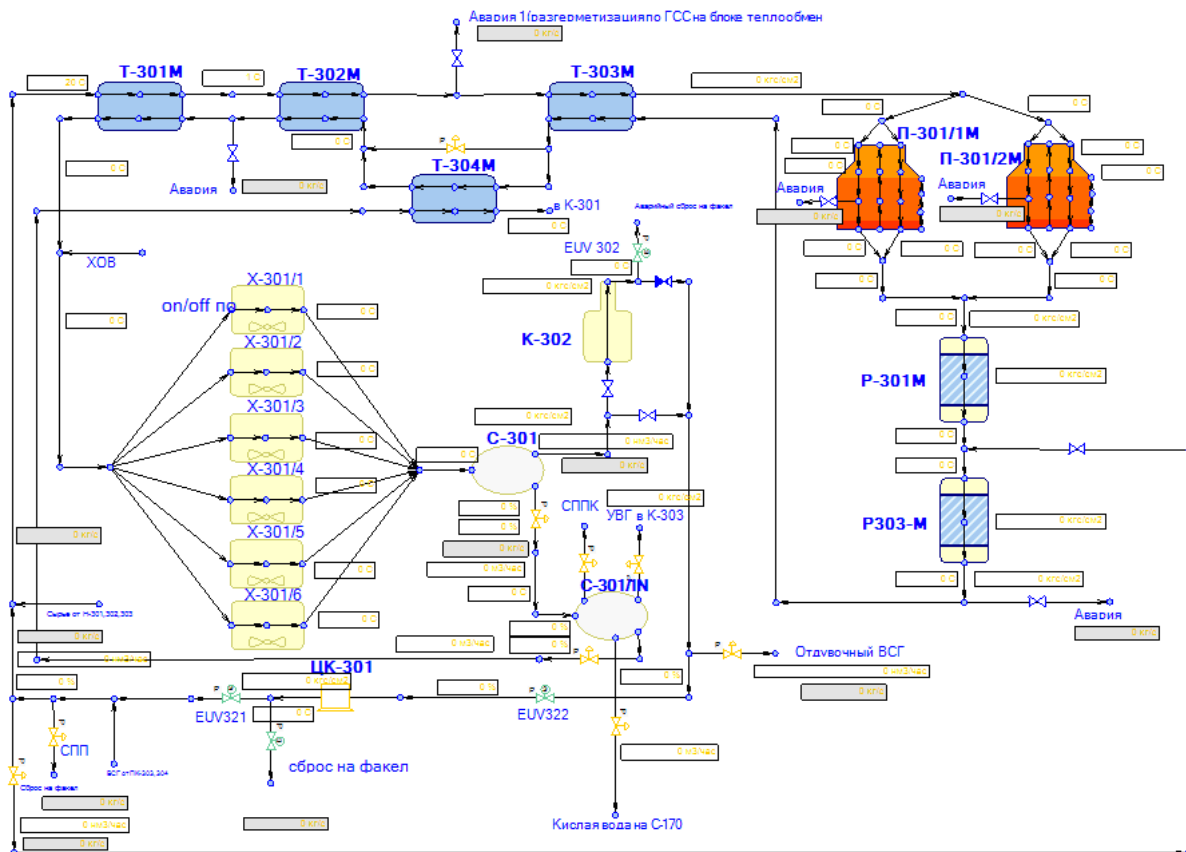


Рис. 8. Граф для эксперимента 4

В ходе вычислительного эксперимента контролировались: перепады давлений на каждом элементе (на входе и выходе), а также в целом по реакторному блоку, температуры в нескольких местах каждого элемента; массовые расходы в точках ввода различных потоков (подача водородсодержащего газа, сырья, химочищенной воды и отвод потоков через сепараторы), а также состав смеси на каждом участке реакторного блока. Все эти параметры находились в интервалах значений, определенных регламентом.

Заключение

На основе проведенных экспериментов можно сделать следующие выводы относительно распараллеливания вычислительного алгоритма: для графов с небольшим числом вершин и ребер эффективность возрастает в случае довольно детального разбиения ребер на интервалы, при увеличении числа вершин и ребер графа эффективность распараллеленного алгоритма тоже возрастает. Между тем для различных модельных времен эффективность остается одинаковой, чего и следовало ожидать. Таким образом, алгоритм является работоспособным и может применяться для решения сложных прикладных задач. Тот факт, что эффективность все же не стремится к 1, объясняет наличие в рассмотренном алгоритме двух довольно трудоемких этапов, которые не распараллелены: решение системы уравнений для вершин с разветвлением и копирование данных при переходах между итерациями и временными слоями.

Список литературы

1. Селезнев, В.Е. Математическое моделирование трубопроводных сетей и систем каналов: методы, модели и алгоритмы / В.Е. Селезнев, В.В. Алешин, С.Н. Прялов. – М. : МАКС Пресс, 2007. – 695 с.
2. Сарданашвили, С.А. Расчетные методы и алгоритмы (трубопроводный транспорт газа) / С.А. Сарданашвили. – М. : Изд-во «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2005. – 580 с.

3. Основы расчета и проектирования теплообменников воздушного охлаждения / А.Н. Бессонный [и др.]. – СПб. : Недра, 1996. – 512 с.
4. Степанов, А.И. Центробежные и осевые компрессоры, воздуходувки и вентиляторы. Теория, конструкция и применение / А.И. Степанов ; пер. с англ. – М. : Машгиз, 1960. – 348 с.
5. Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М. : Изд-во МГУ, 1999. – 799 с.
6. Hoffmann, K.A. Computational Fluid Dynamics. Vol. I. 4th ed. / K.A. Hoffmann, S.T. Chiang. – Cansas : Engineering Education Systems, 2000. – 486 p.
7. Kays, W.M. Convective Heat and Mass Transfer / W.M. Kays, M.E. Crawford. – 4th Ed. – N.Y. : McGraw-Hill Higher Education, 2004. – 546 p.
8. Patankar, S.V. Numerical heat transfer and fluid flow / S.V. Patankar. – N.Y. : Hemisphere, 1980. – 197 p.
9. Irkhin, U. Mathematical modelling of nonstationary processes of heat-mass transfer at the oil-refinery plant / U. Irkhin // Abstracts of the 3^d International Conference Computational Methods in Applied Mathematics : СМАМ-3. – Minsk, 2007. – P. 40.
10. Ирхин, В.А. Построение математической модели и эффективных вычислительных алгоритмов для моделирования технологических процессов на нефтеперерабатывающем заводе / В.А. Ирхин, О.Н. Гайдук // Тез. 2-й Междунар. конф. «Математическое моделирование и дифференциальные уравнения». – Минск, 2009. – С. 50–52.
11. Кутателадзе, С.С. Основы теории теплообмена / С.С. Кутателадзе. – 5-е изд. – М. : Атомиздат, 1979. – 416 с.
12. Самарский, А.А. Численные методы / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М. : Наука, 1989. – 432 с.

Поступила 15.03.10

*Институт математики
НАН Беларуси,
Минск, ул. Сурганова, 11
e-mail: vovair@im.bas-net.by*

U.A. Irkhin

CONSTRUCTION OF A MATHEMATICAL MODEL OF HEAT AND MASS TRANSFER IN COMPLICATED BRANCHED TECHNOLOGICAL SYSTEMS AND ITS EFFICIENT IMPLEMENTATION

A computational algorithm for definition of parameters of heat and mass transfer in complicated branched technological systems is suggested. The mathematical model of the processes of heat and mass transfer on graphs is proposed. Implicit finite difference schemes for the equations of heat and mass transfer are applied. Algorithms for solving systems of equations with the help of methods of block iterations, parametrical rollback and graph compression are developed. A parallel version of the algorithm is suggested and results of corresponding experiments on the computational efficiency are reported.