

Государственное научное учреждение
«ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ИНФОРМАТИКИ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

УДК 517.951 : 536.25 + 004.94 : 502.3/.7

ШАЛЬКЕВИЧ
Павел Константинович

**МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМЫ
ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ МИГРАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ
В ПРИРОДНЫХ ДИСПЕРСНЫХ СРЕДАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ
ТЕХНОЛОГИЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Минск 2019

Научная работа выполнена в учреждении образования «Международный государственный экологический институт имени А.Д. Сахарова» Белорусского государственного университета.

Научный руководитель **Кундас Семен Петрович**, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Теплогазоснабжение и вентиляция» Белорусского национального технического университета

Официальные оппоненты: **Дудкин Александр Арсентьевич**, доктор технических наук, профессор, заведующий лабораторией идентификации систем государственного научного учреждения «Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси»

Герменчук Мария Григорьевна, кандидат технических наук, доцент, заведующая отделом радиационной безопасности государственного научного технического учреждения «Центр по ядерной и радиационной безопасности» МЧС Республики Беларусь

Оппонирующая организация Учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Защита состоится «11» июня 2019 г. в 14.30 на заседании совета по защите диссертаций Д 01.04.01 при государственном научном учреждении «Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси» по адресу: 220012, г. Минск, ул. Сурганова, 6.

Телефон ученого секретаря (+37517)284-21-68, e-mail: lipn@newman.bas-net.by.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института проблем информатики Национальной академии наук Беларуси.

Автореферат разослан «___» _____ 2019 г.

Ученый секретарь
совета по защите диссертаций
доктор технических наук, доцент

Липницкий С.Ф.

КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Проблемы миграции радионуклидов в различных природных средах особенно остро стали проявляться в Республике Беларусь после катастрофы на Чернобыльской атомной электростанции (АЭС) в 1986 г. Авария привела к выбросу 30 МКи радионуклидов, осевших в основном на поверхности почвы, что привело к загрязнению более 145 тысяч км² территории Украины, Республики Беларусь и Российской Федерации. В настоящее время не представляется возможным оценить ущерб окружающей среде, вызванный этим радиоактивным загрязнением, поскольку причинно-следственные связи, отражающие воздействие радиоактивного загрязнения на различные ее компоненты, достаточно сложны. Одним из важнейших компонентов, влияющих на радиационную безопасность населения и окружающей среды, являются почвы, которые, согласно рекомендациям Международной комиссии по радиологической защите также являются объектом радиационной защиты.

Анализ процессов, влияющих на миграцию радионуклидов в природных дисперсных средах, к которым относятся грунт, почва, торф и т. п. показывает, что для осуществления моделирования и прогнозирования в этой области необходимо учитывать большое количество факторов, связанных как с особенностями самого загрязняющего вещества, так и с условиями его распространения. В силу этого большинство разработанных моделей либо значительно упрощают реальные процессы, не учитывая при этом отдельные факторы, либо являются математически сложными. Модели, учитывающие наибольшее число факторов неизотермического переноса влаги и растворенных в ней загрязняющих веществ, представляют собой системы нелинейных уравнений в частных производных, для решения которых необходимо использовать численные методы, наибольшее распространение из которых получил метод конечных элементов (МКЭ) ввиду его гибкости и масштабируемости в практическом применении на ЭВМ. Однако, численное решение подобных моделей при долгосрочном прогнозировании требует больших затрат вычислительных мощностей, которые могут быть обеспечены современными компьютерными технологиями при применении соответствующих подходов и вычислительных алгоритмов. Поставленную задачу можно успешно решить с применением технологий параллельных вычислений. Однако применение этих технологий для прогнозирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах требует разработки новых моделей и алгоритмов, что является актуальной научной и практической задачей, решению которой посвящена диссертационная работа.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Связь работы с научными программами и темами

Тема диссертационной работы находится на стыке двух приоритетных направлений научных исследований Республики Беларусь на 2016–2020 годы: «Экология и природопользование» (10) и «Информатика и космические исследования» (5), утвержденных постановлением Совета Министров Республики Беларусь от 12 марта 2015 г. № 190.

Работа выполнена в рамках следующих научных программ и тем:

1. Задание в рамках ГПНИ «Радиация, экология и техносфера»: «Разработать математические модели, численные методы прогнозирования переноса загрязняющих веществ в зоне аэрации и грунтовых водах с учетом поверхностного стока и инфильтрации. Разработать программные средства для прогнозирования переноса загрязняющих веществ в зоне аэрации и грунтовых водах и рекомендации по их использованию в системе радиационного мониторинга и долгосрочного прогнозирования», ГР № 20115200 (2010–2013 гг.).

2. Задание в рамках ГПНИ «Радиация, экология и техносфера»: «Разработать методы для долгосрочного прогнозирования взаимосвязанного тепловлагодпереноса и миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах с применением технологии параллельных вычислений», ГР № 20142167 (2014–2015 гг.).

Цель и задачи исследования

Цель работы – разработка моделей, алгоритмов и программных средств для долгосрочного прогнозирования взаимосвязанного тепловлагодпереноса и миграции радионуклидов в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений.

Для достижения цели были поставлены и решены следующие **задачи**:

1. Провести анализ современных технологий и методов в области компьютерного моделирования физических задач с помощью технологий параллельных вычислений, применительно к исследуемой предметной области;

2. Разработать численную математическую модель пространственного распространения радиоактивных загрязняющих веществ в природных дисперсных средах с возможностью применения современных подходов в области параллельных вычислений для ее решения;

3. Разработать вычислительные алгоритмы моделирования процессов миграции радионуклидов в природных дисперсных средах, обеспечивающие эффективное применение используемых для моделирования многопроцессорных ЭВМ;

4. Разработать программные средства для практической реализации используемых методов и предложенных алгоритмов и интеграция их в состав программного комплекса (ПК) SPS (Simulation Processes in Soil);

5. Верифицировать и применить разработанную модель и программное обеспечение для решения задач прогнозирования миграции радионуклидов;

6. Выработать рекомендации по практическому использованию, разработанной модели, алгоритмов и программных средств для решения практических задач прогнозирования последствий чернобыльской катастрофы, хозяйственной деятельности и чрезвычайных ситуаций, связанных с загрязнением почв, водных систем, а также в учебном процессе.

Объект исследования – процессы взаимосвязанного тепловлагодонпереноса в природных дисперсных средах. **Предмет исследования** – модели и алгоритмы для прогнозирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений.

Научная новизна

Впервые предложена численная модель, описывающая процесс пространственного распространения тепла, влаги и растворимых в ней радионуклидов в природных дисперсных средах, адаптированная для расчета МКЭ в трехмерной постановке на основе аналитической аппроксимации коэффициентов теплопроводности и давления жидкости, которая позволяет получать параметры пространственного распределения концентрации радионуклидов в почвах с последующей трехмерной визуализацией.

Впервые разработаны параллельные вычислительные алгоритмы для компьютерной реализации предложенной численной модели миграции радионуклидов в почвах, обеспечивающие максимально возможное для рассматриваемой модели ускорение вычислений, равномерное распределение нагрузки на все ядра процессоров ЭВМ, используемых для вычислений, с сохранением масштабируемости как на SMP, так и на MPP-архитектурах, что дает возможность применять при прогнозировании миграции радионуклидов современные компьютерные архитектуры.

Положения, выносимые на защиту

1. Численная модель, описывающая процесс распространения тепла, влаги и растворимых в ней загрязняющих веществ, в природных дисперсных средах, адаптированная для расчета МКЭ в трехмерной постановке на основе аналитической аппроксимации коэффициентов теплопроводности и давления жидкости, позволяющая прогнозировать миграцию радионуклидов в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений.

2. Параллельные вычислительные алгоритмы для компьютерной реализации предложенной численной модели, обеспечивающие максимально возможное для рассматриваемой модели ускорение вычислений, равномерную нагрузку используемой для расчетов многопроцессорной системы с сохранением масштабируемости как на SMP, так и на MPP-архитектурах.

3. Программный модуль в составе ПК SPS v.2.0, разработанный на основе предложенной иерархии классов, реализующий параллельные вычислительные алгоритмы, позволяющий прогнозировать параметры миграции радионуклидов в трехмерной области моделирования на современных ЭВМ различного пользовательского уровня с достаточной для практического применения точностью.

Личный вклад соискателя ученой степени

В диссертации представлены результаты работ, которые выполнены соискателем самостоятельно. В публикациях с соавторами вклад соискателя определяется рамками излагаемых в диссертации результатов. Участие научного руководителя заключалось в постановке целей и задач исследовательской работы, в обсуждении полученных результатов и определении структуры диссертации. Программный комплекс SPS v2.0, в котором используются разработанные лично автором параллельные вычислительные алгоритмы конечноэлементных математических моделей, разработан совместно с О.С. Хилько, В.И. Коваленко, И.А. Гишкелюком, С.П. Кундасом. Соискатель разработал вычислительные алгоритмы численного решения адаптированной им же трехмерной математической модели миграции радионуклидов в природных дисперсных средах, реализовал разработанные вычислительные алгоритмы в программном комплексе SPS v2.0, выполнил экспериментальную верификацию предложенной модели, разработанных вычислительных алгоритмов и программных средств.

Апробация диссертации и информация об использовании ее результатов

Материалы диссертации докладывались и обсуждались на следующих международных и республиканских научных конференциях и семинарах: 12, 13, 14, 15, 16 и 17-й Международных научных конференциях «Сахаровские чтения: экологические проблемы XXI века» (Минск, Беларусь, 2012–2017 гг.); 9-й Международной научно-практической конференции «Управление информационными ресурсами» (Минск, Беларусь, 2012 г.); Республиканской научно-практической конференции «Радиация, экология и техносфера» (Гомель, Беларусь, 2015 г.); 3-ем Белорусско-Китайском молодежном инновационном форуме (Минск, Беларусь, 2016 г.); шести Международных научных конференциях молодых ученых, аспирантов, магистрантов, студентов «Актуальные экологические проблемы» (Минск, Беларусь, 2012–2016 гг.).

Опубликование результатов диссертации

Основное содержание диссертации опубликовано в 22 научных работах. В их числе: 4 статьи в научно-технических журналах, входящих в перечень ВАК Беларуси (1,7 авторских листа); 1 статья в научно-практическом журнале «Экологический вестник»; 1 статья в сборнике научных статей «Математическое и компьютерное моделирование систем и процессов»; 16 тезисов докладов в сборниках материалов международных и республиканских научных конференций; 1 свидетельство о регистрации компьютерной программы. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации составляет 3,75 авторских листа.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из общей характеристики работы, введения, четырех глав с выводами по каждой главе, заключения, библиографического списка и приложений. Общий объем диссертации составляет 136 страниц, включая 90 страниц основного текста, 62 иллюстрации, 15 таблиц и библиографический список из 125 наименований.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

В первой главе проведен анализ физических процессов переноса загрязняющих веществ и выявлено, что наибольшее влияние на миграцию загрязняющих веществ в природных дисперсных средах оказывают следующие

группы факторов: физико-химические свойства изотопа, форма и время его выпадения; физико-химические характеристики почвы (гранулометрический состав, кислотность, содержание органических веществ и обменных катионов, влажность); климатические характеристики местности (количество осадков, температура, скорость и направление ветра); рельефно-ландшафтные характеристики местности (уклон поверхности, тип рельефа и т.п.); деятельность человека (строительство гидротехнических сооружений, лесомелиоративные и агротехнические мероприятия, в т.ч. распаханность и внесение удобрений различного типа).

Согласно современным представлениям о прогнозировании миграции загрязняющих веществ, в том числе радионуклидов, в почве имеют место два подхода: эмпирическое моделирование, которое базируется на данных прямых экспериментальных измерений; теоретическое моделирование, базирующееся на физических закономерностях переноса веществ в окружающей среде. Эмпирическое моделирование требует больших объемов экспериментальных измерений и справедливо в рамках условий и пространственно-временных масштабов, при которых они были получены. Особенностью теоретического моделирования является применение моделей, параметры которых имеют прозрачный физический смысл и могут быть измерены непосредственно. Более того, теоретические модели, как правило, имеют высокий потенциал по учету внешних воздействий, что позволяет эффективно использовать их в более обширном классе задач, чем тот, на котором они идентифицировались и верифицировались. Особенно значимыми работами в области теоретического моделирования миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах являются исследования Э.Д. Ершова, Б.В. Дерягина, Н.В. Чураева, Г.П. Бровки, Дж. Шимунека.

Анализ компьютерных архитектур и программных средств для реализации параллельной обработки данных в мультимпьютерных и мультипроцессорных системах показал необходимость применения технологий параллельных вычислений для решения задачи прогнозирования миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах. Выбор компьютерной архитектуры для параллельных вычислений во многом зависит от условий, при которых необходимо решать конкретные задачи, а также от требований, предъявляемых к скорости решения. Современные технологии параллельных вычислений подразумевают использование одной из двух компьютерных архитектур: мультимпьютерной либо мультипроцессорной.

Во второй главе проведено исследование возможностей применения технологий параллельных вычислений для прогнозирования миграции

загрязняющих веществ в почве и выполнена разработка численной модели переноса тепла и влаги в природных дисперсных средах, адаптированной для расчета МКЭ в трехмерной постановке на основе предварительной аппроксимации нелинейных членов, что позволяет решать задачу взаимосвязанного тепловлагопереноса веществ в дисперсных средах через аналитический расчет коэффициентов теплопроводности и давления жидкости.

Учитывая, что система уравнений взаимосвязанного тепловлагопереноса состоит из усложненных нестационарных уравнений теплопроводности и влагопереноса, каждое из них было преобразовано к следующему виду:

$$[c^{(e)}] \frac{\partial \{\Phi\}}{\partial t} + [k^{(e)}] \{\Phi\} + \{f^{(e)}\} = 0. \quad (1)$$

где $[c^{(e)}]$ – матрица демпфирования элемента; $\frac{\partial \{\Phi\}}{\partial t}$ – функция узловых значений температуры (давления жидкости); $[k^{(e)}]$ – матрица теплопроводности элемента; $\{\Phi\}$ – значение температуры (давления жидкости) по каждому узлу; $\{f^{(e)}\}$ – вектор нагрузки элемента;

Путем аналитических вычислений, основанных на расчетах функций формы для тетраэдрального элемента с четырьмя узлами через выражение полиномиальных функций, были получены следующие матрицы:

$$[c^{(e)}] = \frac{\lambda V}{20} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где V – объем тетраэдра; λ – коэффициент теплопроводности.

$$[k^{(e)}] = \frac{\lambda}{36V} \left(\begin{bmatrix} b_i b_i & b_i b_j & b_i b_k & b_i b_l \\ b_j b_j & b_j b_j & b_j b_k & b_j b_l \\ b_k b_k & b_k b_k & b_k b_k & b_k b_l \\ b_l b_l & b_l b_l & b_l b_l & b_l b_l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_i c_i & c_i c_j & c_i c_k & c_i c_l \\ c_j c_j & c_j c_j & c_j c_k & c_j c_l \\ c_k c_k & c_k c_k & c_k c_k & c_k c_l \\ c_l c_l & c_l c_l & c_l c_l & c_l c_l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_i d_i & d_i d_j & d_i d_k & d_i d_l \\ d_j d_j & d_j d_j & d_j d_k & d_j d_l \\ d_k d_k & d_k d_k & d_k d_k & d_k d_l \\ d_l d_l & d_l d_l & d_l d_l & d_l d_l \end{bmatrix} \right), \quad (3)$$

$$\{f^{(e)}\} = -\frac{hS_{jkl}}{12} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} - \frac{hT_{\infty}S_{jkl}}{3} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где h – коэффициент теплообмена; S_{jkl} – площадь поверхности, содержащая узлы j, k, l ; T_{∞} – температура окружающей среды.

Подстановкой (2) – (4) в (1), были получены уравнения теплопроводности и влагопереноса в матричном виде.

Описанная адаптация системы уравнений тепловлагопереноса позволяет избегать численного интегрирования и дополнительного цикла *for* при численном решении рассматриваемой математической модели, а также преобразовать ее к следующему виду (5) [10]:

$$\begin{cases} C_v \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla(\lambda \nabla T) = 0 \\ C_{hv} \frac{\partial T}{\partial t} + C_{wp} \frac{\partial P_{liq}}{\partial t} - \nabla(K_{hv} \nabla T) - \nabla(K_{wv} \nabla P_{liq} - K_w \rho_{liq} g \nabla z) = 0, \end{cases} \quad (5)$$

где C_v – объемная теплоемкость, Дж/(м³·К); T – температура, К; λ – теплопроводность, Вт/(м·К); C_{hv} , C_{wp} , K_{hv} – нелинейные коэффициенты, являющиеся функциями температуры и давления жидкости; K_{wv} , K_w – коэффициенты, зависящие от проницаемости и динамической вязкости жидкости и водяного пара; P_{liq} – давление жидкости, Па; ρ_{liq} – плотность жидкости, кг/м³; g – ускорение свободного падения, м/с².

Таким образом, решение системы (5) сводится к численному вычислению коэффициентов теплопроводности (давления жидкости) $b_i, b_j, b_k, b_l, c_i, c_j, c_k, c_l, d_i, d_j, d_k, d_l$ из формулы (3) через функции формы. Учитывая, что эти коэффициенты соответствуют узлам заданной в условиях моделирования геометрии, выполнить их расчет с помощью параллельного алгоритма не составит труда и позволит значительно сократить время численной реализации рассматриваемой математической модели [3].

На основе описанных методов расчета математической модели (5) были разработаны вычислительные алгоритмы смешанного типа для решения трехмерной задачи взаимосвязанного тепловлагопереноса в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений. Разработанные вычислительные алгоритмы показывают, что решение поставленной задачи может быть выполнено на компьютерных архитектурах с различным числом ядер, что полностью соответствует современным требованиям к вычислительным алгоритмам [1, 3, 15], а также позволяет расширить границы производительности при решении поставленных задач [13, 14, 15].

Была рассчитана эффективность разработанных вычислительных алгоритмов для прогнозирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах в

рамках ПК MATLAB. За счет применения технологий параллельных вычислений было получено ускорение расчетов, близкое к максимальному возможному (1,39 из 1,42) уже при разбивке расчетной области на ≈ 10000 конечных элементов [1]. Однако, в ПК MATLAB был выявлен ряд особенностей, проявляемых при выполнении численных расчетов предложенной математической модели, не позволяющих увеличить процент операций, которые могут быть выполнены параллельно, что делает дальнейшее применение этого программного комплекса для решения поставленных задач нерациональным.

В третьей главе предлагается структура программного модуля, реализующего алгоритмы решения задачи прогнозирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах, основанная на ниже представленной иерархии классов (рисунок 1):

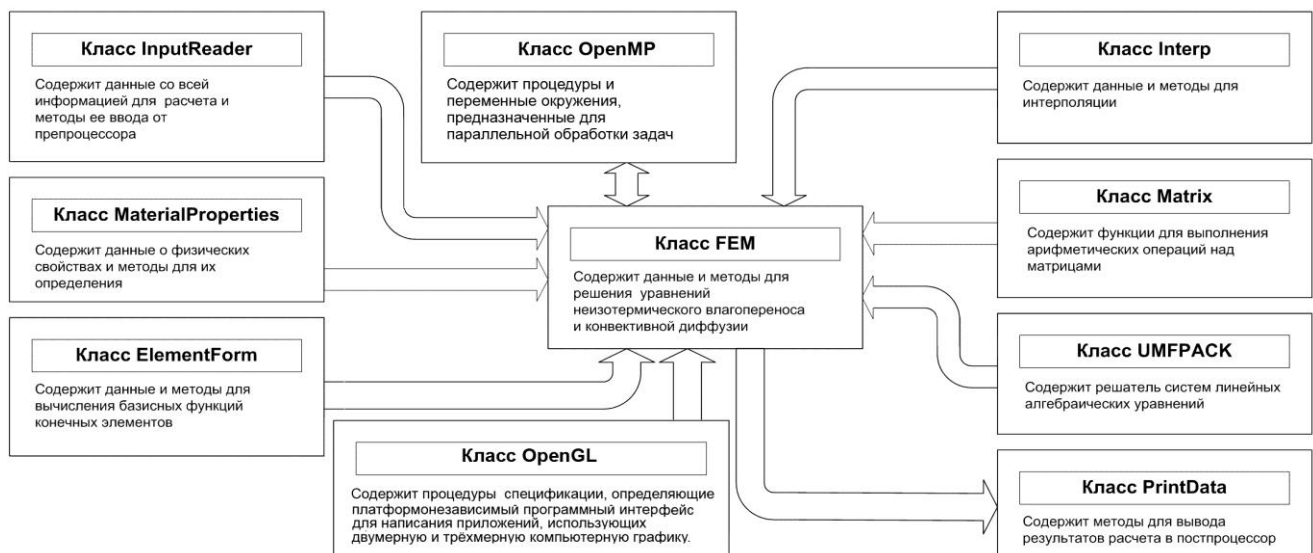


Рисунок 1. – Структура разработанного в составе ПК SPS программного модуля

Применение представленной структуры (рисунок 1) обеспечивает выполнение следующих задач:

- рассчитывать коэффициенты формы в узлах конечноэлементной сетки, определяющей геометрию расчетной области моделирования;
- вычислять значения физических свойств в конечных элементах;
- создавать распределенные массивы для параллельных вычислений локальных матриц конечных элементов;
- масштабировать и распределять части массива по всем используемым процессорам;
- реализовывать сборку глобальных матриц;

- создавать распределенные массивы для параллельных вычислений граничных условий.
- реализовывать учет граничных условий.

На основании предложенной иерархии классов, оригинальных алгоритмов и программных средств, разработанных автором в составе ПК SPS v.2.0, создан программный модуль, который позволяет прогнозировать пространственную миграцию радионуклидов в природных дисперсных средах с использованием технологий параллельных вычислений [6, 7, 16, 18, 22].

Разработан графический пользовательский интерфейс (ГПИ) программного модуля моделирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах (рисунок 2).

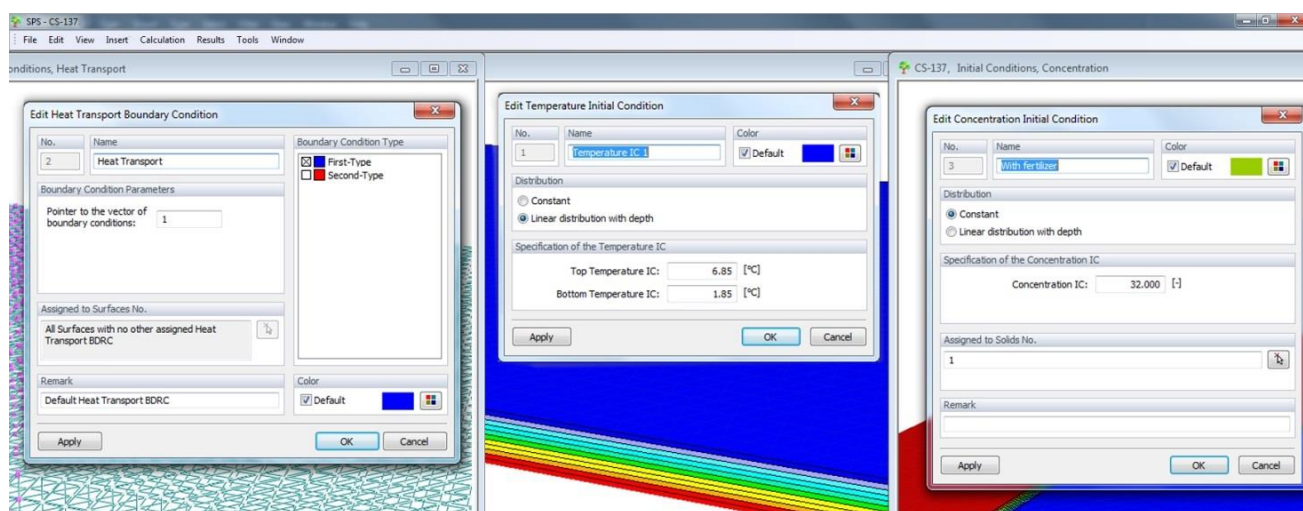


Рисунок 2. – Элементы ГПИ разработанного в составе ПК SPS программного модуля

Разработанный ГПИ позволяет: выполнять графическое построение геометрии расчетной области и создавать конечноэлементную сетку в ней; вводить исходные данные для моделирования, задавать параметры разных сред, находящихся в расчетной области и соответствующие этим средам граничные условия; отображать результаты моделирования, полученные с помощью численного решения предложенных моделей по разработанным алгоритмам в указанной расчетной области [6, 18].

ГПИ разработанного программного модуля может быть масштабирован для различных программных платформ семейства «Windows» и «Unix» [22], следовательно, может применяться, как на кластерах программы СКИФ [13], так и на серверах, поддерживающих технологии «облачных» вычислений [21]. Разработанные программные средства и ГПИ полностью соответствуют функциональным требованиям международного стандарта разработки программного обеспечения [6].

В четвертой главе представлена верификация предложенных численных методов решения уравнений неізотермического влагопереноса, конвективной диффузии и кинетики сорбции, которая показала, что их точность соответствует лучшим зарубежным разработкам в этой области, реализованным в математическом пакете COMSOL Multiphysics. Экспериментальная верификация разработанной модели неізотермического переноса влаги и растворимых в ней веществ в природных дисперсных средах свидетельствует о ее адекватности реальному процессу (погрешность рассчитанных значений температуры и влагосодержания не превышает 5 %).

Проведен расчет эффективности и ускорения вычислительных алгоритмов путем моделирования миграции Sr-90 в дерново-подзолистой заболоченной почве со следующими физическими свойствами: pH = 4,8, содержание гумуса – 4,06%, содержание P₂O — 169 мг/кг, K₂O — 503 мг/кг, CaO — 503 мг/кг, MgO — 128 мг/кг. Начальная концентрация Sr-90 C₀. Расчет проводился для времени прогнозирования 365 суток для расчетной области размером 1000×1000×5 м с задействованием разного количества ядер ЦПУ шести-ядерного процессора AMD FX 6300. На основании полученных результатов, сделан вывод, что доля последовательных вычислительных операций при прогнозировании миграции загрязняющих веществ с помощью разработанных программных средств составляет 50 %. Соответственно, доля параллельно выполняемых операций также равняется 50 %. Следовательно, максимальное ускорение вычислений задачи – ускорение в два раза.

Проведен анализ масштабируемости разработанного программного модуля. Для оценки масштабируемости на MPP-архитектурах, работающих под управлением операционных систем семейства «Unix» в качестве аппаратных средств использовались суперкомпьютеры «СКИФ-ГЕО-ОФИС» и «СКИФ-ГЕО-ЦОД». Результаты показали, что разработанный программный модуль хорошо масштабируется, как на SMP, так и на MPP-архитектурах.

Проведено исследование зависимости ускорения расчетов от количества ядер ЦПУ, задействованных при решении задачи. Полученные результаты свидетельствуют о том, что разработанный алгоритм прогнозирования миграции радионуклидов с учетом тепло- и влагопереноса достигает максимально возможного ускорения при увеличении числа задействованных при расчете ядер ЦПУ ЭВМ [19]. Ограничений на количество используемых для расчетов ядер нет – их увеличение после достижения максимального ускорения расчетов сохраняет это ускорение на том же уровне. Аппаратная часть, реализующая параллельные вычисления, используется эффективно, что имеет особое значение при учете возможностей и перспектив применения разработанных вычислительных

алгоритмов и программных средств не только на персональных ЭВМ, но и на кластерах и «облачных» серверах [21]. Применение последних при прогнозировании миграции радионуклидов в природных дисперсных средах на годовой период (365 дней), позволит сократить материальные затраты на вычислительные мощности до 50 % за счет соответствующей экономии машинного времени.

Выполнено прогнозирование миграции Cs-137 на участке почвы с посевом травосмеси лядвенец + овсяница + кострец + тимофеевка, показанном на рисунке 3.



Рисунок 3. – Схема участка почвы с посевом травосмеси

Расчет проводился для времени прогнозирования 365 суток для расчетной области размером 20,75×4,25×1 м. Расчетное распределение концентрации Cs-137 через 365 дней показано на рисунке 4.

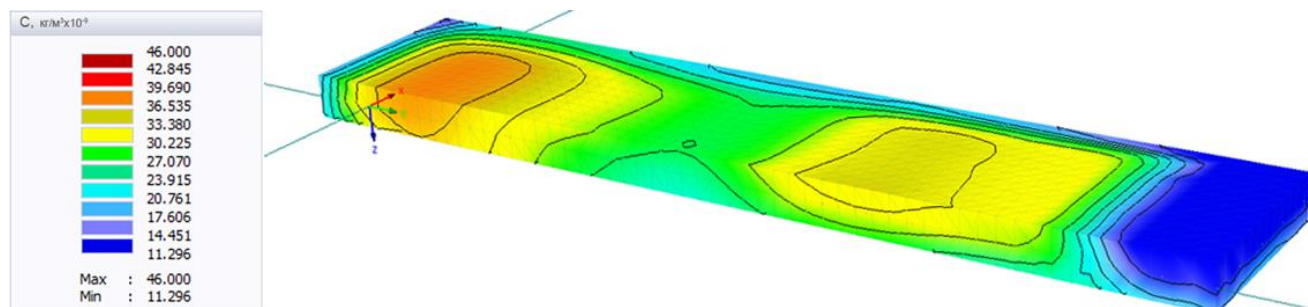


Рисунок 4. – Распределение концентрации Cs-137 на участке почвы через 365 дней

Полученные результаты свидетельствуют о том, что удобрение N60P60K180+Cu100+Mo50+B50, вносимое в почву, имеет малое влияние на радиоактивность последней на начальных стадиях, однако, спустя год, в условиях эксперимента, способствует значительному снижению радиоактивности почвы (на 40%). При этом, удобрение P60K180+Cu100+Mo50+B50, вносимое в почву, приводит к более скорому эффекту снижения ее радиоактивности, но через год активность почвы с этим удобрением принимает примерно те же значения, что и после внесения N60P60K180+Cu100+Mo50+B50. Следует также отметить, что внесение в почву удобрения P60K180 позволяет снизить ее активность, однако

миграционные способности Cs-137 в зоне внесения этого удобрения ухудшаются по сравнению с удобренной зоной, и через год средняя радиоактивность почв в таких зонах становится одинаковой.

Погрешность расчетов моделируемых параметров не превышает 20 %. Однако, средние значения этих параметров в каждой из зон находятся в пределах доверительных интервалов измеряемых величин: неопределенность измерений для активностей Cs-137 составляет 30 %, что обусловлено экспериментальной, методической и операторной погрешностями съема данных. Таким образом, результаты 3D-моделирования миграции радионуклидов в почве, полученные с использованием разработанных программных средств, свидетельствуют о возможности эффективного их применения для решения задач прогнозирования миграции загрязняющих веществ с получением максимально информативной картины их распространения по всему объему области моделирования, что позволяет дать более достоверную комплексную оценку их влияния на окружающую среду в заданном регионе в сравнении с одномерными решениями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. Разработана численная математическая модель неизотермического переноса влаги и растворимых в ней радиоактивных веществ в природных дисперсных средах, адаптированная для расчета МКЭ в трехмерной постановке на основе предварительной аналитической аппроксимации коэффициентов теплопроводности и давления жидкости, что позволило избежать численного интегрирования при ее компьютерной реализации. При этом, расчет коэффициентов формы в узлах конечноэлементной сетки, определяющей геометрию заданной области моделирования, может быть выполнен параллельно на всех ядрах задействованного ЦПУ, что позволяет применить технологии параллельных вычислений к решению рассматриваемой математической модели [3, 4, 15].

2. Разработаны параллельные вычислительные алгоритмы моделирования процессов миграции радионуклидов в природных дисперсных средах, обеспечивающие равномерную нагрузку используемой для расчетов многопроцессорной системы. Показано, что решение поставленной задачи может быть выполнено на мультипроцессорных архитектурах с различным числом ядер, что полностью соответствует современным требованиям к вычислительным алгоритмам, а также позволяет значительно расширить границы

производительности при прогнозировании миграции радионуклидов в природных дисперсных средах. Результаты оценки разработанных параллельных вычислительных алгоритмов в составе смешанного вычислительного алгоритма, используемого для моделирования, показали, что он достигает максимального ускорения в два раза при увеличении числа задействованных при расчете ядер ЦПУ применяемой мультипроцессорной ЭВМ. Ограничений на количество используемых для расчетов ядер нет – при достижении максимального ускорения, последующее увеличение ядер приведет к сохранению ускорения расчетов на максимальном уровне [1, 9, 11, 13–15, 19, 20].

3. Разработан программный модуль в составе ПК SPS v.2.0 на основе предложенных параллельных вычислительных алгоритмов, который, в отличие от известных разработок, позволяет прогнозировать процесс миграции радионуклидов в трехмерной постановке и с эффективным применением современных ЭВМ различного пользовательского уровня. Получаемые результаты 3D - моделирования миграции радионуклидов в почве свидетельствуют о возможности эффективного применения программного комплекса для решения задач прогнозирования миграции загрязняющих веществ с получением максимально информативной картины их распространения по всему объему области моделирования, что позволяет давать достоверную комплексную оценку их влияния на окружающую среду в заданном регионе. Разработанные программные средства и их ГПИ могут быть масштабированы для различных программных платформ семейства «Windows» и «Unix» и соответствуют функциональным требованиям международного стандарта разработки программного обеспечения [3, 5–8, 10–12, 16–18, 20–22].

4. Верификация и практическое применение разработанных в диссертации математических моделей, вычислительных алгоритмов и программных средств [1–4, 6, 13, 15, 16, 21] для прогнозирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах показали, что отклонение значений получаемых результатов не превышает 5 % по отношению к результатам, получаемым при помощи лучших зарубежных разработок в этой области, реализованных в ПК COMSOL Multiphysics, а также находятся в пределах неопределенности экспериментальных измерений, обусловленной экспериментальной, методической и операторной погрешностями съема данных. Это свидетельствует о возможности их эффективного практического использования для решения указанных задач [7, 21].

Рекомендации по практическому использованию результатов

Разработанная математическая модель, вычислительные алгоритмы и программные средства могут найти применение при решении ряда прикладных задач: для принятия решений по организации мониторинга на водосборах территорий, предназначенных для строительства и эксплуатации ядерных и радиационных объектов; для прогноза состояния окружающей среды после масштабных выбросов радионуклидов и фоновых оценок их активностей в отдаленные периоды после аварий; для разработки мероприятий по снижению поступления радионуклидов в растениеводческую продукцию, в том числе за счет создания геохимических барьеров на пути их распространения, и предотвращению их накопления в организмах людей; для формирования комплексной оценки состояния биосферы в виде элемента системного кода программно-вычислительных комплексов по оценке радиационной безопасности. Кроме того, результаты диссертационной работы могут быть применены для распараллеливания других конечноэлементных моделей в сфере компьютерного моделирования.

Применение модернизированного программного комплекса SPS v2.0 и разработанного программного модуля позволит сократить затраты времени и материальных средств на прогнозирование процессов миграции радионуклидов и осуществлять моделирование миграции других загрязняющих веществ в природных дисперсных средах в трехмерной постановке как на стандартных, так и инновационных высокотехнологичных ЭВМ.

В настоящее время созданные вычислительные алгоритмы и программные средства внедрены в учебный процесс УО «МГЭУ им. А.Д. Сахарова», производственный процесс ПЧУП «Сигнум», НПООО «Лакшми» и ООО «Сенсотроника» и могут быть использованы в Брестском филиале РНИУП «Институт радиологии» для обработки климатических данных и анализа корневого поступления Cs-137 в растениеводческую продукцию, в ПГРЭЗ, департаменте по ликвидации последствий на ЧАЭС МЧС РБ, Белорусской АЭС, в учебном процессе БГУ, БГУИР, БНТУ.

СПИСОК СОБСТВЕННЫХ ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых научных журналах

1. Шалькевич, П. К. Алгоритм параллельных вычислений задачи неизотермического влагопереноса в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас, И. А. Гишкелюк // Доклады БГУИР. – 2014. – № 5 (83). – С. 90-94.
2. Шалькевич, П. К. Реализация алгоритма параллельных вычислений задачи неизотермического влагопереноса в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас, И. А. Гишкелюк // Информатика. – 2014. – № 44. – С. 44-51.
3. Шалькевич, П. К. Технология параллельных вычислений задачи тепловлагопереноса в программном комплексе SPS / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас, И. А. Гишкелюк // Информатика. – 2015. – № 45. – С. 73-79.
4. Шалькевич, П. К. Математическое моделирование распространения загрязняющих веществ от экологически опасных объектов с учетом поверхностного стока и инфильтрации / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас, И. А. Гишкелюк // Доклады БГУИР. – 2017. – № 7 (109). – С. 45-52.

Статьи в других научных журналах и сборниках научных статей

5. Шалькевич, П. К. Анализ эффективности использования программных пакетов RVM и MPI для параллелизации вычислений при моделировании неизотермического влагопереноса в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас // Математическое и компьютерное моделирование систем и процессов : сб. ст. / ГрГУ им. Я. Купалы. – Гродно, 2013. – № 3. – С. 46-50.
6. Шалькевич, П. К. Графическое отображение результатов 3D моделирования миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас, И. А. Гишкелюк // Экологический вестник. – 2016. – № 37. – С. 35-39.

Тезисы в сборниках материалов научных конференций

7. Кундас, С. П. Методы долгосрочного прогнозирования взаимосвязанного тепловлагопереноса и миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных

средах с применением технологии параллельных вычислений / С. П. Кундас, П. К. Шалькевич, И. А. Гишкелюк // Материалы республиканской науч.-практ. конф. «Радиация, экология и техносфера = Radiation, environment and man-risk factor». Гомель, 3-4 дек. 2015 г. // редкол.: И. А. Чешик (гл. ред.) [и др.]. – Минск : Ин-т. Радиологии. – С. 153-157.

Тезисы докладов на научных конференциях

8. Шалькевич, П. К. Значение экологических проблем в информационном обществе / П. К. Шалькевич, А. С. Баранов // Сахаровские чтения 2012 года : экологические проблемы XXI века : материалы 12-й Международной научной конференции, Минск, 17–18 мая 2012 г. / МГЭУ ; редкол.: С. П. Кундас [и др.]. – Минск, 2012. – С. 37–38.

9. Шалькевич, П. К. Методы и алгоритмы параллельных вычислений / П. К. Шалькевич // Сахаровские чтения 2012 года : экологические проблемы XXI века : материалы 12-й Международной научной конференции, Минск, 17–18 мая 2012 г. / МГЭУ ; редкол.: С. П. Кундас [и др.]. – Минск, 2012. – С. 296–297.

10. Shalkevich, P. K. Parallel computing architecture for modeling of contaminant migration in soil / P. K. Shalkevich // Actual Environmental Problems: материалы Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов, магистрантов, студентов, Минск, 22–23 ноября 2012 г. / МГЭУ им. А. Д. Сахарова ; под общ. ред. С. С. Позняка. – Минск, 2012. – С. 95.

11. Шалькевич, П. К. Архитектура параллельных вычислений для физического моделирования в информационных системах / П. К. Шалькевич // Управление информационными ресурсами 2012 : материалы IX Международной научно-практической конференции, Минск, 21 ноября 2012 г. / Акад. упр. при Президенте Респ. Беларусь ; редкол.: А. В. Ивановский, В. В. Лабоцкий (отв. ред.) [и др.] – Минск: Акад. упр. при Президенте Респ. Беларусь, 2012 – С. 217.

12. Шалькевич, П. К. Использование программных пакетов PVM и MPI для параллелизации вычислений при моделировании неизотермического влагопереноса в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас // Сахаровские чтения 2013 года : экологические проблемы XXI века : материалы 13-й Международной научной конференции, Минск, 16–17 мая 2013 г. / МГЭУ ; редкол.: С. П. Кундас [и др.]. – Минск, 2013. – С. 257.

13. Shalkevich, P. K. The possibility of SKIF clusters using for solving modeling tasks of contaminant migration in soil / P. K. Shalkevich // Actual Environmental Problems : материалы Международной научной конференции молодых ученых,

аспирантов, магистрантов, студентов, Минск, 21–22 ноября 2013 г. / МГЭУ им. А. Д. Сахарова ; под общ. ред. С. С. Позняка. – Минск, 2012. – С. 106-107.

14. Шалькевич, П. К. Параллельное вычисление задачи взаимосвязанного теплооблагоденоса на суперкомпьютерах с различным числом ядер / П.К. Шалькевич, С.П. Кундас // Сахаровские чтения 2014 года : экологические проблемы XXI века : материалы 14-й Международной научной конференции, Минск, 29–30 мая 2014 г. / МГЭУ ; редкол.: В. И. Дунай [и др.]. – Минск, 2014. – С. 221–222.

15. Shalkevich, P.K. Numerical calculations of three-dimensional heat and moisture migration in soil using parallel computation technology / P. K. Shalkevich, S. P. Kundas // Actual environmental problems : материалы Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов, магистрантов, студентов, Минск, 20 ноября 2014 г. / МГЭУ им. А. Д. Сахарова ; под общ. ред. С. С. Позняка. – Минск, 2014. – С. 26-27.

16. Шалькевич, П. К. Программный модуль для 3D анализа миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас, А. Г. Яскевич // Сахаровские чтения 2015 года : экологические проблемы XXI века : материалы 15-й Международной научной конференции, Минск, 21–22 мая 2015 г. / МГЭУ ; редкол.: С. С. Позняк [и др.]. – Минск, 2015. – С. 316–317.

17. Shalkevich, P. K. Methods of long-term forecasting of the nonisothermal heat and moisture and pollutants migration in natural disperse environment using parallel computing technologies / P. K. Shalkevich, S. P. Kundas // Actual environmental problems: материалы Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов, магистрантов, студентов, Минск, 26-27 ноября 2015 г. / МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ ; под общ. ред. С. С. Позняка. – Минск: Институт радиобиологии, 2015. – С. 87-88.

18. Шалькевич, П. К. Применение технологий компьютерной графики для отображения результатов 3-D моделирования миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас // Сахаровские чтения 2016 года: экологические проблемы XXI века : материалы 16-й Международной научной конференции, Минск, 19–20 мая 2016 г. / МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ ; под ред. С. А. Маскевича [и др.]. – Минск, 2016. – с. 293.

19. Shalkevich, P. Comparison of multi-threading simulation methods of non-isothermal heat and moisture transfer / P. Shalkevich, S. Kundas, A. Moroz // Actual environmental problems : материалы Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов, магистрантов, студентов, Минск, 24-25 ноября

2016 г. / МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ; под общ. ред. С. А. Маскевича, С. С. Позняка. – Минск : Колорград, 2016. – С. 172-173.

20. Шалькевич, П. К. Долгосрочное прогнозирование миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений / П. К. Шалькевич, И. А. Гишкелюк, С. П. Кундас // Новые горизонты 2016 : сборник материалов III Белорусско-Китайского молодежного инновационного форума 29-30 ноября 2016 г. / Минск : БНТУ, 2016. – С. 90-91.

21. Шалькевич, П. К. Применение облачных технологий для моделирования миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас, А. Е. Мороз // Сахаровские чтения 2017 года : экологические проблемы XXI века = Sakharov readings 2017 : environmental problems of the XXI century : материалы 17-й Международной научной конференции, 18–19 мая 2017 г., г. Минск, Республика Беларусь : в 2 ч. / Междунар. гос. экол. ин-т им. А. Д. Сахарова Бел. гос. ун-та ; редкол.: С. Е. Головатый [и др.] ; под С. А. Маскевича, С. С. Позняка. – Минск : ИВЦ Минфина, 2017. – Ч. 2. – С. 252.

22. Shalkevich P. The application of a new software for 3D modeling of the nonisothermal heat and moisture transfer in natural disperse environment / P. Shalkevich, S. Kundas, A. Moroz, O. Hilko // Actual environmental problems : материалы Международной научной конференции молодых ученых, аспирантов, магистрантов, студентов, Минск, 23-24 ноября 2017 г. / МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ ; под общ. ред. С. А. Маскевича, С. С. Позняка. – Минск : Колорград, 2017. – С. 187-188.

РЕЗЮМЭ

Шалькевіч Павел Канстанцінавіч

Мадэль і алгарытмы для прагназавання міграцыі радыенуклідаў у прыродных дысперсных асяроддзях з ужываннем тэхналогій паралельных вылічэнняў

Ключавыя словы: міграцыя радыенуклідаў, паралельныя вылічэнні, цяпловільгацьперанос, метады канчатковых элементаў, трохмернае мадэляванне.

Мэта працы: распрацоўка лікавай мадэлі, алгарытмаў і праграмных сродкаў для доўгатэрміновага прагназавання ўзаемазлучанага цепловлагопереносу і міграцыі радыенуклідаў у прыродных дысперсных асяроддзях з ужываннем тэхналогій паралельных вылічэнняў.

Метады даследавання і выкарыстаная апаратура: метады матэматычнага мадэлявання на аснове феноменалагічнага падыходу; метады канчатковых элементаў для колькаснага рашэння матэматычнай мадэлі; праграмаванне ў асяроддзі Microsoft Visual Studio 2012 г. на мове C++.

Атрыманыя вынікі і іх навізна. Упершыню распрацаваны: лікавая матэматычная мадэль, якая апісвае працэс распаўсюджвання цяпла, вільгаці і растваральных ў ёй забруджвальных рэчываў, у прыродных дысперсных асяроддзях для разліку МКЭ ў трохмернай пастаноўцы на аснове аналітычнай апраксімацыі каэфіцыентаў цеплаправоднасці і ціску вадкасці; паралельныя вылічальныя алгарытмы для кампутарнай рэалізацыі прапанаванай лікавай мадэлі, якія забяспечваюць раўнамерную нагрузку выкарыстоўванай для разлікаў шматпрацэсарнай сістэмы з захаваннем маштабаванасці як на SMP, так і на MPP-архітэктрах; праграмны модуль, які дазваляе прагназаваць параметры міграцыі радыёнуклідаў у трохмернай галіне мадэлявання на сучасных ЭВМ з дастатковай для практычнага прымянення дакладнасцю.

Рэкамендацыі па выкарыстанні. Створаныя вылічальныя алгарытмы і праграмныя сродкі ўкаранёны ў навучальны працэс УА «МДЭУ імя А. Д. Сахарава», вытворчы працэс ВПУП «Сігнум», НПООО «Лакшмі» і ТАА «Сэнсатроніка». Вынікі работы маюць быць выкарыстаны для прагнозу стану навакольнага асяроддзя ў выніку пераносу радыенуклідаў у глебе.

Вобласць ужывання: радыеэкалогія, аграэкалогія.

РЕЗЮМЕ

Шалькевич Павел Константинович

Модель и алгоритмы для прогнозирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений

Ключевые слова: миграция радионуклидов, параллельные вычисления, тепловлагоперенос, метод конечных элементов, трехмерное моделирование.

Цель работы: разработка численной модели, алгоритмов и программных средств для долгосрочного прогнозирования взаимосвязанного тепловлагопереноса и миграции радионуклидов в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений.

Методы исследования и использованная аппаратура: метод математического моделирования на основе феноменологического подхода; метод конечных элементов для численного решения математической модели; программирование в среде Microsoft Visual Studio 2012 на языке C++.

Полученные результаты и их новизна. Впервые разработаны: численная математическая модель, описывающая процесс распространения тепла, влаги и растворимых в ней загрязняющих веществ, в природных дисперсных средах для расчета МКЭ в трехмерной постановке на основе аналитической аппроксимации коэффициентов теплопроводности и давления жидкости; параллельные вычислительные алгоритмы для компьютерной реализации предложенной численной модели, обеспечивающие равномерную нагрузку используемой для расчетов многопроцессорной системы с сохранением масштабируемости как на SMP, так и на MPP-архитектурах; программный модуль, позволяющий прогнозировать параметры миграции радионуклидов в трехмерной области моделирования на современных ЭВМ с достаточной для практического применения точностью.

Рекомендации по использованию. Созданные вычислительные алгоритмы и программные средства внедрены в учебный процесс УО «МГЭУ им. А. Д. Сахарова», производственный процесс ПЧУП «Сигнум», НПО «Лакшми» и ООО «Сенсотроника». Результаты работы могут быть использованы для прогнозирования состояния окружающей среды в результате переноса радионуклидов в почве.

Область применения: радиоэкология, агроэкология.

SUMMARY

Shalkevich Pavel Konstantsinovich

**Model and algorithms for predicting the migration of radionuclides
in natural disperse media with the use of parallel computing technologies**

Keywords: migration of radionuclides, parallel computing, heat and moisture transfer, finite element method, three-dimensional modeling.

Research objective: development of a numerical model, algorithms and software for long-term forecasting of heat and moisture transfer and migration of radionuclides in natural disperse media with the use of parallel computing technologies.

Research methods and used equipment: method of mathematical modeling based on the phenomenological approach; finite element method for the numerical solution of a mathematical model; programming in Microsoft Visual Studio 2012 using C ++.

The obtained results and their novelty. For the first time has been developed: a numerical mathematical model that describes the process of spreading heat, moisture and soluble pollutants in natural disperse media for calculating using FEM in a three-dimensional formulation based on an analytical approximation of coefficients of thermal conductivity and fluid pressure; parallel computational algorithms for computer implementation of the proposed numerical model, ensuring a uniform load of the multiprocessor system used for calculations with preservation of scalability on both SMP and MPP architectures; software module that allows to predict the parameters of the migration of radionuclides in the three-dimensional modeling area on modern computers with sufficient accuracy for practical application.

Recommendations for the use of the results. The created computing algorithms and software are introduced into the educational process of the International Sakharov Environmental University, the production process of the Signum LLC, Scientific and Production Ltd. Co LAKSHMI and Sensotronica LLC. The results of the work can be used to predict the state of the environment as a result of the transfer of radionuclides in the soil.

Application area: radioecology, agroecology.