Институт информационных и вычислительных технологий МОН РК

Казахский Национальный Университет имени аль-Фараби

Университет Туран

Люблинский технический университет, Польша

«Ғылым ордасы»

МАТЕРИАЛЫ

IV международной научно-практической конференции "Информатика и прикладная математика", посвященной 70-летнему юбилею профессоров Биярова Т.Н., Вальдемара Вуйцика и 60-летию профессора Амиргалиева Е.Н.

25-29 сентябрь 2019, Алматы, Казахстан

Часть 1

Алматы 2019

УДК 378 (063)
ББК 74.58
И74

Главный редактор:
Калимолдаев М.Н. - генеральный директор ИИВТ, академик НАН РК, доктор физико-математических наук, профессор

Ответственные редакторы:
Мамырбаев О.Ж. - заместитель генерального директора ИИВТ, доктор PhD
Калижанова А.У. - заместитель генерального директора ИИВТ, кандидат физико-математических наук
Юничева Н.Р. - ученый секретарь ИИВТ МОН РК, кандидат технических наук, доцент

И 74 **Информатика и прикладная математика:** Мат. IV Межд. науч. конф. (25-29 сентября 2018 г.). Часть 1. – Алматы, 2019. – с. 617

ISBN 978-601-332-384-8

В сборнике опубликованы доклады, представленные по 4 секциям от Республики Казахстан, Российской Федерации, США, Латвии, Польши, Республики Беларусь, Украины, Азербайджана, Узбекистана, Японии, Кореи, Ирана, Португалии, Испании, Великобритании, Греции, Кыргызской Республики и других.

Рассмотрены актуальные вопросы в области математики, информатики и управления: математического моделирования сложных систем и бизнес-процессов, исследования и разработки защищенных и интеллектуальных информационных и телекоммуникационных технологий, математической теории управления, технологий искусственного интеллекта.

Материалы сборника предназначены для научных работников, докторантов и магистрантов, а также студентов старших курсов.

УДК 378 (063)
ББК 74.58

ISBN 978-601-332-384-8

6 Казиев Г.З., Набиева Г.С., Молдакалыкова А.Ж. Қолданбалы бағдарламалық қамтамасыз ету мен деректер қорының массивтерін үлестірудегі дискреттті бағдарламалаудың блокты-симметриялы есебі. // Международный научный журнал-приложение РК "Поиск". - №1(1). – Алматы. 2013. - С. 136-140.

7 Kaziyev G.Z., Nabiyeva G.S., Kalizhanova A.U. etc. Methods of automated systems decomposition at the stage of technical designing. // 2nd World Conference on Educational Technology Researches – WCETR2013 in Lefkosa (Nicosia) in North Cyprus, Procedia - Social and Behavioral Sciences. Volume 83. 4 July 2013. – P. 1039-1042.

8 Nabiyeva G., Kaziyev G., Kalizhanova A.U. etc. Development of models and methods for optimal allocation of information resources in computer systems. Proceedings of 6th World Conference on Educational Sciences, 2014. - P. 283-290. Valletta, Malta.

9 Nabiyeva G., Kaziyev G., Kalizhanova A., Kalenova B., Kartbayev T., Kozbakova A., Mukazhanov N. Multicriteria Problems of Information System Designing // Global Journal on Technology. -2013. - №3. - p.310-315.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО МНОГОФАЗНОГО ТЕЧЕНИЯ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ НА ОСНОВЕ МЕТОДА GMRES

[1]Касымбек Н.М., [2]Маткерим Б., [3]Лебедев Д.В., [4]Иманкулов Т.С., [5]Ахмед-Заки Д.Ж.

e-mail: nuryslam.qassymbek@gmail.com

[1,2,4]*Казахский Национальный Университет им. Аль-Фараби, Казахстан,*
[3,5]*Университет Международного Бизнеса, Казахстан*

Аннотация. *В данной статье рассматривалось численное моделирование многокомпонентного многофазного течения в пористых средах. Записав закон сохранения массы для каждого компонента, получена система нелинейных уравнений, которая была линеаризована методом Ньютона-Рафсона и решался итерационным методом GMRES. Для достижения лучшей сходимости был использован предобуславливатель ILU(0). В результате, для численного решения данной задачи использовался полностью неявная схема, называемая алгоритмом Ньютона-ILU0-GMRES. Был разработан параллельный алгоритм с использованием технологии MPI. К тому же, были произведены сравнения времени выполнения программы собственной реализации и программы с использованием готовой библиотеки PETSc.*

Ключевые слова: *многокомпонентное многофазное течение, Метод Ньютон-Рафсона, метод GMRES, параллельное программирование, технология MPI.*

1 Введение

Развитие высокопроизводительных вычислений позволяет человечеству решать основные научные и прикладные проблемы в различных областях. Расчет таких задач на сетках с большим количеством ячеек требует больших ресурсов. Суперкомпьютеры могут, например, быть загружены задачами моделирования погоды и прогноза климата, экономическими процессами, акустическими задачами, гидродинамикой, производством медицинских препаратов, биологическими исследованиями. Технологические достижения в этих областях связаны с тем, насколько правильно и успешно используются компьютерные вычисления.

Использование суперкомпьютеров позволяет значительно ускорить решение задач при использовании численных методов. Одной из таких задач является прогноз добычи нефти и газа на конкретных месторождениях нефти и газа. Моделирование многокомпонентного многофазного течения жидкости (нефти и газа) в пористой среде (в нефтяных пластах) является актуальной и в то же время сложной задачей гидродинамического моделирования. Для решения таких задач используются различные методы и схемы [1-4], некоторые из которых являются итерационными методами для решения линейных систем [5-8].

Для ускорения научных расчетов используются различные технологии, такие как OpenMP [9,10], MPI [11,12], OpenCL [13], CUDA [14,15] и фрагментированное программирование [12,16].

В этой статье мы решаем систему уравнений с помощью метода Ньютона-Рафсона, на каждой итерации которой система алгебраических уравнений решается с помощью обобщенного метода минимальных невязок (GMRES) с предобуславливанием ILU(0). Параллельное приложение для решения этой задачи с помощью метода Newton-ILU(0)-GMRES реализовано с использованием технологии MPI, которая является основным инструментом при разработке параллельных программ для суперкомпьютеров.

2 Математическая модель и численный метод

Рассматриваемая модель многофазного многокомпонентного течения в пористых средах позволяет моделировать такие современные методы добычи углеводородов, как закачка теплоносителя в нефтяной пласт, сжигание, закачка химических реагентов (полимер, поверхностно-активное вещество) и другие.

Рассмотрим математическую модель многокомпонентного течения трехфазной жидкости в пористой среде. Запишем закон сохранения массы для каждого компонента [2,3]:

$$\frac{\partial(\phi\, \xi_\omega S_\omega)}{\partial t} + \nabla\cdot(\xi_\omega u_\omega) = q_\omega,$$

$$\frac{\partial(\phi[x_{mo}\xi_o S_o + x_{mg}\xi_g S_g])}{\partial t} + \nabla\cdot\left(x_{mo}\xi_o u_o + x_{mg}\xi_g u_g\right) = q_m \qquad (1)$$

$$u_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} k(\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \wp \nabla z), \alpha = \omega, o, g. \qquad (2)$$

$$\sum_{m=1}^{N_c} x_{mo} = 1, \qquad \sum_{m=1}^{N_c} x_{mg} = 1. \qquad (3)$$

$$S_\omega + S_o + S_g = 1. \qquad (4)$$

$$p_{co\omega} = p_o - p_\omega \, , p_{cgo} = p_g - p_o. \tag{5}$$

$$f_{mo}\left(p_o, x_{1o}, x_{2o,} \dots, x_{N_co}\right) = f_{mg}\left(p_g, x_{1g}, x_{2g}, \dots, x_{N_cg}\right), \tag{6}$$

$$f_{m\alpha} = p_\alpha x_{m\alpha} \varphi_{m\alpha}, m = 1,2, \dots, N_c, \alpha = o, g.$$

m=1.2,...,N_c, где $\xi_w -$молярная плотность водной фазы, S_w, $S_o, S_g -$ насыщенность водной, нефтяной и газовой фаз, $q_w, q_m -$ молярные скорости потока воды и m-й компонент соответственно, f_{mo} и f_{mg} функции летучести.

Распределение химических компонентов в углеводородной фазе описывается методом K-значения [17]. Термодинамическое поведение жидкостей в пластовых условиях описывается уравнениями состояния Пенга-Робинсона [18].

Система нелинейных уравнений (1) - (6) была линеаризована методом Ньютона-Рафсона.

В (l+1)-м слое итерационного процесса Ньютона значение неизвестных обновляется по следующему закону [3]:

$$x_{mo}^{n+1,l+1} = x_{mo}^{n+1,l} + \triangle\, x_{mo}^{n+1,l+1}, \qquad m = 1,2, \dots, N_c - 1,$$
$$\zeta_{mo}^{n+1,l+1} = \zeta_{mo}^{n+1,l} + \triangle\, \zeta_{mo}^{n+1,l+1}, \qquad m = 1,2, \dots, N_c - 1,$$
$$L^{n+1,l+1} = L^{n+1,l} + \triangle\, L^{n+1,l+1},$$
$$F^{n+1,l+1} = F^{n+1,l} + \triangle\, F^{n+1,l+1},$$
$$S^{n+1,l+1} = S^{n+1,l} + \triangle\, S^{n+1,l+1},$$
$$p^{n+1,l+1} = p^{n+1,l} + \triangle\, p^{n+1,l+1}.$$

Полученная система линейных уравнений (7) приводится к виду

$$Ax = b, \tag{8}$$

и решается итерационным методом GMRES [19], который является одним из популярных методов подпространств Крылова [20].

Чтобы уменьшить количество итераций метода, была использована предобуславливание - явная или неявная модификация системы линейных уравнений, позволяющая упростить ее решение. Одним из широко используемых методов поиска предобусловливателя является неполное LU-разложение (ILU) исходной матрицы A [21]. В результате для численного решения данной задачи для решения системы линейных уравнений (8) используется полностью неявная схема, называемая алгоритмом Ньютона-ILU0-GMRES, что означает сочетание метода Ньютона-Рафсона и алгоритма GMRES с предобуславливанием ILU0 для разработки надежных и эффективных алгоритмов.

3 Параллельный алгоритм

Для реализации параллельного алгоритма метода GMRES, нужно выяснить части вычислений, которые могут быть основой параллелизации.

Например, алгоритм GMRES состоит из следующих шагов:

a) Инициализация. Выбор x_0, вычисление $r = b - Ax_0$, решение $Pw = r$ и расчет $v_1 = \frac{w}{\|w\|_2}$

b) Итерации Арнольди. m шагов итераций, j=1,2,…,m. Конкретный алгоритм Арнольди выглядит следующим образом:

for i=1, …,m
$Pw = Ax_i$
for k=1, …,i
$h_{k,i} = (w, v_k)$
$w = w - h_{k,i}v_k$
$end\ k$
$h_{i+1,i} = \|w\|_2$
$v_{j+1} = \dfrac{W}{h_{i+1,i}}$
end i

c) Расчет приближенного решения $x^m = x^0 + Q_{n,m}y_m$. Здесь: y_m минимизация $\|\beta\xi - H_{m,m}y\|_2$; $Q_{n,k}$ матрица размера $n \times k$, вектор-столбец матрицы состоит из ортогональных векторов $v_{1,}v_2, \dots, v_k$, H_{mm} – Хессенбергова матрица.

d) Определение. Вычислить $r^m = b - x^m$, Остановить если условие сходимости выполнено, в противном случае выбрать $x^0 = x^m$ и вернуться к шагу а) для пересчета.

В данном алгоритме есть общие операции, такие как умножение матрицы на матрицу, умножение матрицы на вектор, умножение вектора на вектор и вычисление векторной нормы на этапах а), b) и c), эти операции могут быть реализованы параллельно с разделением данных.

На этапах а) и b) алгоритма GMRES в качестве предобусловливателя ILU0 использовался P, который был найден при разложении матрицы A с помощью алгоритма мелкозернистой факторизации ILU.

4 Существующие библиотеки

Выбранны нами метод GMRES реализован на некоторых библиотеках, таких как Intel MKL, MATLAB, PETSc. В данной работе рассматривался библиотека PETSc, так как в данном инструменте реализованы параллельные версии разных методов решения линейных и нелинейных уравнений.

PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) - переместимый, расширимый инструментарий для научных вычислений. В PETSc реализован метод GMRES, который был выбран в качестве решателя СЛАУ на каждой итераций Ньютон-Рафсона.

В ходе ознакомления было выявлено, что на PETSc нет возможности использовать предобуславливатель ILU в параллельной программе, вместо этого по умолчанию используется блочный предобуславливатель Якоби.

5 Результаты тестирования

5.1 Сравнение с библиотекой PETSc

Тесты и сравнение результатов работы собственной программы и программы с использованием библиотеки были проведены на локальном компьютере и показаны в нижеследующей таблице:

Таблица 1. Сравнение времени выполнения программ

Количество процессов	Собственная реализация, с	PETSc, с
np=1	6,11	3,21
np=2	35,64	52,45
np=4	23,24	128,13
np=8	36,18	277,25

Тесты проводились на матрице размерности 3000x3000, которая соответсвует случаю, когда количество узлов разностной схемы равнялось 500. Как видно из таблицы, при параллельных расчетах собственная реализация метода считает быстрее, чем программа с использованием PETSc.

5.2 Результаты тестирования параллельного алгоритма

Для оценки эффективности параллельной версии метода GMRES была реализована параллельная программа с использованием стандарта MPI. Испытания проводились на суперкомпьютере MVS-10P Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, который включает в себя узлы с двумя процессорами Xeon X5450 и 8 ГБ оперативной памяти для каждого узла. Тестирование параллельной программы проводилось на матрицах, соответствующих случаям, когда количество узлов разностной схемы варьировалось в диапазоне от 500 до 8000. Параметры матрицы приведены в таблице 2.

Таблица 2. Описание матриц

Матрицы	#1	#2	#3	#4	#5
Количество узлов	500	1000	2000	4000	8000
Размер матрицы A	3000x3000	6000x6000	12000x12000	24000x24000	48000x48000

Результаты теста показаны в таблице 3.

Таблица 3. Время выполнения параллельной программы

Матрица		#1	#2	#3	#4	#5
Последовательная программа	**np=1**	3,74	48,38	334,24	1 688,74	20 219,34
MPI	**np=8**	1,19	7,57	53,82	394,74	2 942,02
	np=64	2,59	12,03	64,16	389,68	2 565,59
	np=128	2,95	12,66	65,25	395,58	2 569,01
	np=256	4,39	17,29	82,75	450,28	2 798,32
	np=512	11,53	42,56	202,01	866,98	4 185,07

Как видно из результатов теста, на маленьких размерах параллельная программа получила самое короткое время выполнения на 8 процессах. По мере увеличения размера задачи параллельное приложение, работающее на 64 процессах, имеет самое короткое время вычислений, но оно не сильно отличается от времени выполнения параллельной программы, работающей на 8, 128 и 256 процессах. Это связано с тем, что с увеличением числа процессов время подсчета на каждом процессоре уменьшается, а время, затрачиваемое на коммуникации, увеличивается.

Можно увидеть, что время выполнения на 64 и 128 процессах примерно одинаковые. Это объяснятся тем, что на 64 процессах время коммуникаций меньше чем время вычислений, а в 128 процессах наоборот, но в сумме получаемые результаты сопостовимы.

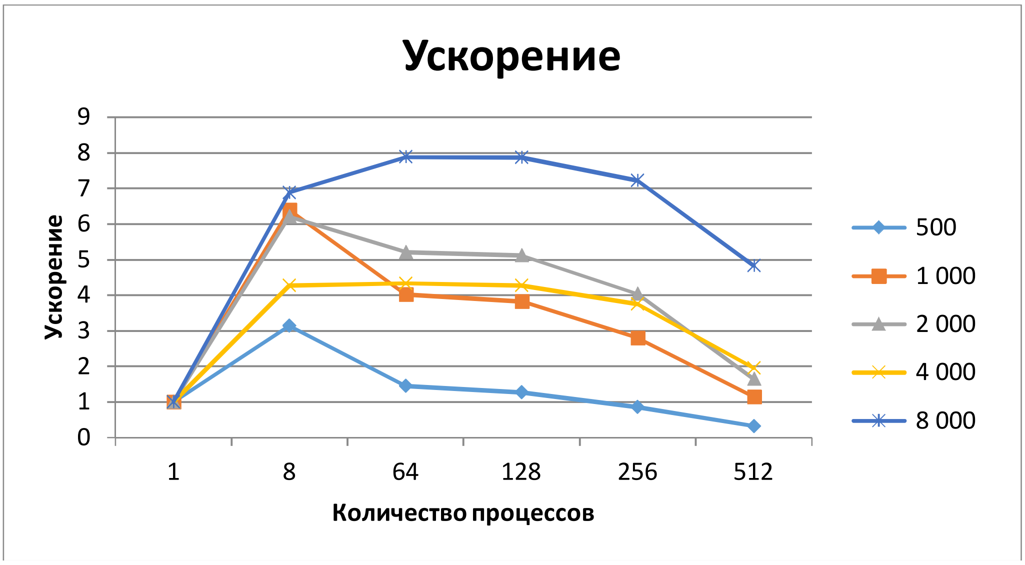

Рисунок 1. Ускорение параллельного алгоритма

На матрице #1 при 256 и 512 процессах параллельная программа считает медленне, чем последовательная. Но при увеличении размера задачи время выполнения параллельной программы уменьшается в соотношении с последовательной. Данная закономерность дает возможность прогнозировать что с увеличением размера матрицы, на больших количествах процессов ускорение тоже увеличивается. На рисунке 1 показано ускорение параллельной программы. Можно сделать вывод, что параллельный алгоритм метода имеет смысл запускать на большом количестве процессоров, только на больших размерах, которые не могут поместиться в память одного узла.

6 Заключение

Мы рассмотрели параллельную реализацию алгоритма Newton-ILU0-GMRES для многофазной многокомпонентной задачи фильтрации масла. Испытания проводились для разных размеров узла и количества процессов. Исследование показало, что на большом количестве процессов программу MPI лучше всего запускать на задаче большой размерности. В дальнейшем планируется рассмотреть другие варианты метода для улучшения эффективности параллельного алгоритма. В частности, планируется вместо итерации Арнольди рассмотреть другие варианты. Также планируется разработать фрагментированный алгоритм, что позволит не затрачивать время на реализацию коммуникаций.

Работа выполнена при поддержке комитета по финансированию науки Министерства образования и науки Казахстана, гранты №. AP05134651 и BR05236340

Литература

[1] Borisov V. E., Kritskiy B. V., Marchenko N. A., Mitrushkin D. A., Savenkov E. B. Non-isothermal compositional flow model with chemical reactions and active solid phase for reservoir simulation. KIAM Preprint № 91, Moscow, 2013.

[2] Chen, Z. Reservoir Simulation. Mathematical Techniques in Oil Recovery // Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007. — XXVIII, 219 p

[3] Chen Z., Huan G., Ma Y. Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media // Siam, Southern Methodist University, Dallas, Texas 2006. 569 pp.

[4] Ahmed T. Reservoir Engineering Handbook. Gulf Professional Publishing, 3rd edition 2006. 1376 pages.

[5] RC Mittal, A Al-Kurdi, LU-decomposition and numerical structure for solving large sparse nonsymmetric linear systems, Computers & Mathematics with Applications, 2002 - Elsevier

[6] S. Lacroix YU. Vassilevski J. Wheeler M. Wheeler, Iterative Solution Methods for Modeling Multiphase Flow in Porous Media Fully Implicitly, SIAM J. SCI.COMPUT Vol. 25, No. 3, pp. 905–926,2003

[7] Wang Baohua, Wu Shuhong, Li Qiaoyun etc. Applications of BILU0-GMRES in reservoir numerical simulation, Acta Petrolei Sinica, Vol.34, No.5, 2013.

[8] Petr Vabishchevich, Maria Vasilyeva Iterative methods for solving the pressure problem at multiphase filtration Mathematics – Numerical Analysis, 2011

[9] Iryanto & Gunawan, P. H. (2017, May). An OpenMP parallel godunov scheme for 1D two phase oil displacement problem. In Information and Communication Technology (ICoICT), 2017 5th International Conference on (pp. 1-5). IEEE.

[10] L.F. Werneck, M. Medeiros de Freitas, H.Guaraldi da Silva Jr, Grazione de Souza, H.P. Amaral Souto. An OpenMP Parallel Implementation for Numerical Simulation of Gas Reservoirs Using Intel Xeon Phi Coprocessor An OpenMP Parallel Implementation for Numerical Simulation of Gas Reservoirs. Proceedings of the XXXVII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering Suzana Moreira Avila (Editor), ABMEC, Brasılia, DF, Brazil, November 6-9, 2016.

[11] Sreekanth Pannala, Ed F. D'Azevedo, Madhava Syamlal, Thomas O'Brien. Hybrid (OpenMP and MPI) Parallelization of MFIX: A Multiphase CFD Code for Modeling Fluidized Beds.Conference. // Proceedings of the 2003 ACM Symposium on Applied Computing (SAC), March 9-12, 2003, Melbourne, FL, USA.

[12] Akhmed-Zaki, Lebedev, Perepelkin. Implementation of a three dimensional three-phase fluid flow ("oil–water–gas") numerical model in LuNA fragmented programming system. The Journal of Supercomputing. 2016

[13] Khramchenkov, E., & Khramchenkov, M. (2018). Numerical Model of Two-Phase Flow in Dissolvable Porous Media and Simulation of Reservoir Acidizing. Natural Resources Research, 27(4), 531–537.

[14] Zaza, A., Awotunde, A. A., Fairag, F. A., & Al-Mouhamed, M. A. (2016). A CUDA based parallel multi-phase oil reservoir simulator. Computer Physics Communications, 206, 2–16.

[15] McClure, J. E., Prins, J. F., & Miller, C. T. (2014). A novel heterogeneous algorithm to simulate multiphase flow in porous media on multicore CPU–GPU systems. Computer Physics Communications, 185(7), 1865–1874.

[16] Malyshkin, V.E., Perepelkin, V.A. LuNA Fragmented Programming System, Main Functions and Peculiarities of Run-Time Subsystem. Proceedings of the 11th International Conference on Parallel Computing Technologies, LNCS 6873. – pp. 53-61, Springer (2011)

[17] Pederson K.S., Christensen P.L. Phase Behavior of Petroleum Reservoir Fluids. – CRC Press, 2008. – 422 p.

[18] Peng D.-Y., Robinson D.B. A new two-constant equation of state // Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals. – 1976, – № 15. – P. 59–64.

[19] Saad Y, Schults M H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems [J]. SIAM J Sci Statist Comput, 1986, 7: 856-869.

[20] Y. Saad, Iterative methods for sparse linear systems. (2nd edn), SIAM, 2003

[21] R.C Mittal, A.H Al-Kurdi An efficient method for constructing an ILU preconditioner for solving large sparse nonsymmetric linear systems by the GMRES method, Computers & Mathematics with Applications, 2003