



НЕВЕДРОВ Алексей Сергеевич - аспирант Института информатики и математического моделирования технологических процессов Кольского научного центра РАН (ИИММ КНЦ РАН)
Адрес: 184200, Мурманская область, г. Апатиты, ул. Ферсмана, 24 а
e-mail: nevedrov@arcticsu.ru



ОЛЕЙНИК Андрей Григорьевич - доктор технических наук, заместитель директора ИИММ КНЦ РАН, заведующий кафедрой информационных систем Кольского филиала Петрозаводского государственного университета
Адрес: 184200, Мурманская область, г. Апатиты, ул. Ферсмана, 24 а
e-mail: oleynik@iimm.kolasc.net.ru

ОБ ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ СРЕДСТВАХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ РЕЖИМОВ ОБОГАЩЕНИЯ МИНЕРАЛЬНЫХ РУД

Введение

Компьютерные технологии глубоко проникли в сферу научных и инженерных расчетов. Именно потребности в высокопроизводительных вычислительных системах со стороны высокотехнологичных отраслей промышленности были одним из важнейших факторов интенсивного развития компьютерной индустрии и специализированного программного обеспечения. Важное место информационные технологии занимают и в поддержке управления горно-обогатительными предприятиями [1], которые стремятся постоянно совершенствовать технику и технологии добычи и переработки рудного сырья с получением товарной продукции требуемого качества и высокой рентабельностью.

Традиционно исследования новых методик и технологий обогащения проводились в рамках лабораторного или промышленного эксперимента. Такие исследования, как правило, требуют существенных затрат времени. Использование компьютерного моделирования процессов разделения минеральных компонент с целью определения наиболее эффективных режимов реализации этих процессов позволяет существенно сократить время исследования, а нередко - и его стоимость.

Многие процессы обогащения твердых полезных ископаемых основаны на различном воздействии в рабочем объеме разделительного аппарата сепарационных сил на частицы руды, находящиеся в жидкой среде. Подобные процессы применяются для разделения таких полезных ископаемых, как уголь, руды цветных, черных и редких металлов и др. Совокупность руды с водой в аппарате представляет собой суспензию, которая в понятиях гидродинамики называется гетерогенной средой или смесью, причем каждая компонента называется фазой [2]. Математическая модель, разрабатываемая для таких процессов обогащения, должна более или менее адекватно отражать макрокартину динамики многофазной среды.

Этапы моделирования обогатительных процессов

Решение задачи определения эффективных режимов обогащения минеральных ископаемых можно представить в виде нескольких основных этапов (рис. 1). Все или некоторая часть этих этапов может быть реализована в специализированных программных комплексах, получивших название САЕ-систем (Computer-Aided Engineering) - сред для моделирования и расчетов научных и инженерных задач, основанных на дифференциальных уравнениях в частных производных методом конечных элементов.

Расчеты, проводимые в данных системах, требуют больших вычислительных ресурсов. Для кардинального снижения времени решения задач практически все САЕ-системы имеют возможность работать в многопроцессорном режиме.

На первом этапе создается геометрическое представление (построение) расчетной области (обычно точной части сепарационного аппарата). На этом этапе, как правило, используется САД-система (Computer-Aided Design). Такая система может представлять собой отдельный программный продукт или входить в основную систему моделирования течения жидкостей и газов. В зависимости от поставленной задачи геометрия может быть как двумерной, так и трехмерной. В некоторых случаях для сокращения времени моделирования процесса обогащения задачу сначала ставят на 2D-, а затем уже на 3D-модели.

Затем создается разностная (конечно-элементная или конечно-объемная) модель. Для этого на построенную «геометрию» накладывается расчетная сетка - рабочая область модели аппарата разбивается на ячейки выбранной формы. Существуют различные виды се-

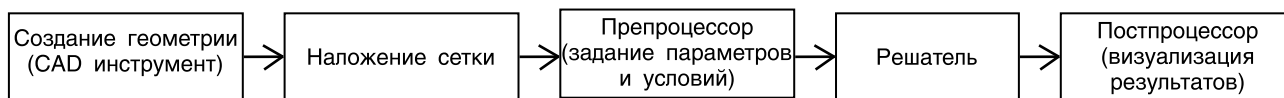


Рис. 1. Этапы решения задачи определения эффективных режимов обогащения минеральных ископаемых

ток, применяемых для разбиения [3]. В тех случаях, когда множество сеточных узлов является упорядоченным, расчетная сетка называется структурированной (регулярной). Использование структурированных сеток (по сравнению с неструктурированными) позволяет, как правило, уменьшить продолжительность расчета и необходимый объем оперативной памяти ЭВМ. В то же время, процедура построения криволинейной регулярной сетки, как правило, требует больших затрат труда и ресурсов ЭВМ по сравнению с процедурой построения нерегулярной сетки.

Динамически адаптивные сетки позволяют использовать малые пространственные шаги сетки там, где это необходимо. Это дает возможность соблюдения жестких требований к численным методам при сохранении умеренных требований к вычислительным ресурсам. Методы динамически адаптивных сеток являются одним из наиболее эффективных подходов для повышения точности численного решения в расчетных областях с несколькими пространственными масштабами, отражающими неоднородную структуру решения. Основная идея методов динамически адаптивных сеток состоит в уменьшении размеров ячеек в тех зонах расчетной области, в которых возникают большие ошибки решения. Так как в большинстве случаев искомое решение неизвестно и невозможно определить ошибку, представляющую собой разность точного и приближенного решения в некоторой норме, то в качестве меры ошибки решения чаще всего используют градиенты или разности параметров решения.

На следующем этапе сеточная модель передается в препроцессор CFD-программы (Computational fluid dynamics), где происходит задание теплофизических свойств и наложение граничных и начальных условий задачи. Чем больше вариантов граничных условий заложено в CAE-систему, тем шире спектр реальных ситуаций, которые возможно смоделировать.

Так, заданное распределение скорости (INLET), как правило, используется для описания входных границ, через которые жидкость втекает в расчетную область, но может также использоваться и для задания выходных границ, через которые жидкость покидает расчетную область. Граничное условие для выхода (OUTLET) применяется там, где жидкость покидает расчетную область и нормальные градиенты параметров течения на границе равны нулю.

Граничные условия на стенке (WALL) предполагают условие прилипания как на неподвижной стенке, так и на подвижной стенке (т.е. можно задать скорость движения стенки). Граничные условия, не отражающие волн давления (TRANSIENT WAVE), используются для описания выходных границ областей нестационарных сжимаемых течений, чтобы предотвратить отражение волн давления обратно в расчетную область. Граничные условия могут задаваться как постоянными по всей граничной области, так и зависящими от координат и/или времени.

После выше изложенных подготовительных действий все данные передаются в решатель - также указываются дополнительные параметры. Для решения задач, основанных на дифференциальных уравнениях в частных производных, используется метод конечных элементов (МКЭ) [4]. Данный метод базируется на идее аппроксимации непрерывной функции (в физической интерпретации - температуры, давления, перемещения и т.д.) дискретной моделью, которая строится на множестве кусочно-непрерывных функций, определенных на конечном числе подобластей, называемых конечными элементами [5].

Исследуемая геометрическая область разбивается на элементы таким образом, чтобы на каждом из них неизвестная функция аппроксимировалась пробной функцией (как правило, полиномом). Причем эти пробные функции должны удовлетворять граничным условиям непрерывности, совпадающим с граничными условиями, налагаемыми самой задачей. Выбор для каждого элемента аппроксимирующей функции будет определять соответствующий тип элемента.

Заключительный этап - анализ результатов в постпроцессоре. Результаты расчета могут быть представлены в векторном и контурном видах, а также с отображением траектории движения частиц. В некоторых CAE-системах реализован модуль создания анимации, который позволяет обрабатывать результаты нестационарных расчетов.

Существующие инструментальные средства

На сегодняшний день существует большое число CAE-систем, различающихся по функциональной сложности и стоимости. Из них выделяется несколько лидеров: ANSYS FLUENT, ANSYS CFX, STAR-CD и COMSOL Multiphysics (ранее FEMLAB) - все они коммерческие продукты. Бесплатных и с открытым кодом программных комплексов также достаточно количество, но они имеют меньшую функциональность и в меньшей степени используют параллелизацию. Все эти продукты применимы для моделирования процессов разделения в обогащении (например, моделирование гидродинамических течений в обогащательных аппаратах [6]).

Ориентированные на решение одного класса задач, существующие программные продукты обладают некоторыми индивидуальными особенностями и возможностями. На этапе построения сетки ANSYS FLUENT использует неструктурированную сеточную технологию (типы элементов - гексаэдры, тетраэдры, призмы и пирамиды) [7]. Адаптация расчетной сетки позволяет получить точное решение для областей с большими градиентами потока, например, для пограничных слоев. В STAR-CD предусмотрена возможность работы с неструктурированной сеткой с возможностью внутреннего измельчения и произвольного сопряжения, что позволяет пользователю достаточно просто и эффективно создавать сетки для областей сложной геометрии [8]. Формы ячеек - четырехгранники (тетраэдры), пирамиды, трехгранные призмы, шестигранники (гексаэдры), а также ячейки с 7 и 8 внешними гранями (так называемые усеченные ячейки).

Для задания условий задачи в препроцессоре во FLUENT включены ламинарные и турбулентные модели гидродинамики, теплопередачи, фазовых переходов и радиации, а также модели для расчета кавитации, сжимаемых жидкостей, теплообмена, теплопроводности, реальных газов и модуль для расчета влажного пара. Также ANSYS FLUENT поставляется с богатой базой свойств материалов для широкого спектра жидкостей, газов и твердых тел.

Поведение идеальной и реальной жидкости моделируется с помощью качественно разработанных уравнений состояния. Система ANSYS FLUENT предоставляет пользователю специализированный язык выражений CEL для ввода в базу системы описаний нового (еще не включенного в базу) материала. CEL позволяет легко определять любое число новых материалов или зависимостей от свойств материалов по параметрам потока, таким как давление, температура, скорости деформации и многое

Таблица 1

Продукт	Задачи	Лицензия	Операционная система
ANSYS Fluent	стационарные и нестационарные течения; течения сжимаемой, слабосжимаемой и несжимаемой жидкости; ламинарные и турбулентные течения	проприетарная	Windows, Linux
STAR-CD		проприетарная	Windows, Linux, Unix
ANSYS CFX		проприетарная	Windows, Linux
COMSOL Multiphysics		проприетарная	Windows, Linux, Mac
FEATFLOW		GNU GPL	Unix, Linux
OpenFOAM		GNU GPL	Linux
FlowVision		проприетарная	Windows, Linux

другое. Используя простой синтаксис CEL, можно ввести алгебраические выражения для модели непосредственно в препроцессоре, избегая тем самым необходимости использования отдельных внешних подпрограмм.

STAR-CD, в свою очередь, позволяет решать задачи в следующих областях:

- Стационарные и нестационарные течения
- Ламинарные течения
- Сжимаемые и несжимаемые (включая около- и сверхзвуковые)
- Теплоперенос (конвективный, радиационный, теплопроводность с учетом твердых тел)
- Массоперенос
- Многокомпонентные течения
- Многофазные потоки - модель Лагранжа (газ-жидкость, жидкость-твердое тело, жидкость-жидкость)
- Многофазные потоки - модель Эйлера.

Решатель во FLUENT позволяет выполнять параллельные вычисления на Windows, Linux и Unix платформах [9]. При этом могут быть использованы многопроцессорные машины или кластеры. FLUENT обладает клиент-серверной архитектурой и характеризуется довольно хорошей масштабируемостью.

STAR-CD была первой в мире программой, включившей в себя процедуру так называемых скользящих сеток [10]. Эффективная параллелизация алгоритма решения, основанного на применении метода конечных объемов, в сочетании с уникальными методиками автоматизированного разбиения области течения позволяет моделировать задачи любой степени геометрической сложности.

Входящий в комплекс пакет STAR-HPC (High Performance Computing) предназначен для осуществления решения подготовленных в препроцессоре задач на многопроцессорных вычислительных системах. Распределение задачи по аппаратным ресурсам происходит следующим образом: расчетная геометрическая область (сетка) равномерно разбивается на количество частей, равное заказанному количеству процессоров. После этого для каждой части генерируется исполняемый код, который выполняется соответствующими процессорами и узлами. В случае, когда расчетный узел представляет собой SMP (Symmetric Multiprocessing) систему, ему приходится одновременно выполнять столько процессов, сколько на нем было заказано процессоров для решения.

Средства обработки результатов (постпроцессор) в STAR-CD позволяют отображать векторные и скалярные поля различных параметров, изолинии, траектории частиц (линии тока), а также создавать анимации и пространственные композиции [11]. В дополнение к этому имеются средства отображения результатов на произвольных секущих поверхностях и переноса результатов на другую сетку. Векторные поля могут быть отображены с расчетной сетки на равномерную декартову ортогональную «презентационную» сетку.

В таблице 1 представлены сведения о типах лицензий и операционных системах, под управлением которых могут функционировать наиболее популярные CAE-системы.

Интеграция инструментальных средств

Существующие на сегодняшний день CAE-системы позволяют решать задачи определения наиболее эффективных режимов обогащения полезных ископаемых. При использовании коммерческого продукта задача может быть решена полностью в рамках такого продукта (от создания геометрии до изображения результатов). При использовании же свободно распространяемых программ для решения может потребоваться несколько таких программ. Причем для разного типа задач могут применяться разные программы на каждом этапе (CAD-система, решатель, постпроцессор). Такой случай порождает отдельную задачу выбора адекватных инструментальных средств на каждом этапе решения.

Проведя декомпозицию решаемых задач на классы по какому-либо критерию (предметная область, сложность, размерность), можно поставить каждому классу в соответствие определенные инструменты из имеющегося у исследователя в наличии набора, или потенциально ему доступных. В итоге, инструментальное средство, необходимое для решения некоторой составной (сложной) задачи, может быть сформировано как комплекс доступных для использования средств, обеспечивающих согласованное решение отдельных подзадач целевой задачи. Используя формальные обозначения, указанный подход к формированию исполнительных среды моделирования обогащения процессов можно описать следующим образом.

Каждая задача $P(In_p, Out_p, Met_p)$ характеризуется исходными данными In_p , результирующими данными Out_p и методом, который используется для решения - Met_p . В свою очередь, каждый инструмент $R(In_r, Out_r, Met_r)$ имеет входные данные In_r , выходные данные Out_r и реализуемый им метод Met_r (или некоторое множество методов $\{Met_r\}$). Если учесть то, что задача P является декомпозируемой на более частные подзадачи P_i (рис. 2), то схему решения можно представить в следующем виде:

$$P_1 \rightarrow P_2 \rightarrow P_3 \rightarrow P_4 \rightarrow P_5,$$

где результат решения подзадачи P_i используется в качестве исходных данных для подзадачи P_{i+1} .

Такой декомпозиции задачи P соответствует цепочка применяемых инструментов в виде:

$$R_1 \rightarrow R_2 \rightarrow R_3 \rightarrow R_4 \rightarrow R_5.$$

Так как используемые инструменты в цепочке могут быть предоставлены разными разработчиками, то появляется необходимость внедрения конвертеров данных $C_{i,i+1}$ - дополнительных инструментов, преобразующих выходные данные R_i в данные, пригодные для передачи на вход инструменту R_{i+1} . В итоге более полная цепочка принимает вид:

$$R_1 \rightarrow C_{1,2} \rightarrow R_2 \rightarrow C_{2,3} \rightarrow R_3 \rightarrow C_{3,4} \rightarrow R_4 \rightarrow C_{4,5} \rightarrow R_5.$$

В зависимости от структуры задачи при декомпозиции могут возникнуть и параллельные участки, что не вносит принципиальных изменений в технологию формирования требуемого набора исполнителей и дополнительных инструментов. Для синхронизации работы параллельных участков, как правило, бывает достаточно простого анализа потока данных.

Укрупненная структурная схема динамического формирования инструментальной среды решения задачи определения наиболее эффективных режимов обогащения полезных ископаемых представлена на рис. 2.

Практическая реализация динамического формирования исполнительной среды моделирования требует формирования формальных спецификаций решаемых задач $P(In_p, Out_p, Met_p)$ и доступных исполнительных ресурсов $R(In_r, Out_r, Met_r)$.

На этапе анализа спецификации задачи (исходные данные, класс задачи) осуществляется декомпозиция на подзадачи, определяются необходимые методы для решения и формируется итоговая цепочка из подзадач. Затем происходит формирование исполнительной среды - используя базу спецификаций инструментальных средств, для каждой подзадачи определяется конкретный инструмент для ее решения.

Как видно на представленной схеме, рассматриваемый подход предполагает использование не только локально расположенных инструментов (библиотека методов), но и удаленных средств, доступ к которым осуществляется посредством коммуникационной среды.

Значительные результаты в разработке и практической реализации подхода к построению распределенной среды для решения декомпозируемых задач получены авторами [12]. Вариант построения формальных спецификаций решаемых задач и используемых для их решения инструментальных средств представлен в работе [13].

Заключение

Применение CAE-систем позволяет сократить сроки и снизить затраты на поиск наиболее эффективных режимов обогащения полезных ископаемых. Однако высокая стоимость и, хоть и широкая, но ограниченная функциональность коммерческих систем ставят под вопрос целесообразность их приобретения и использования производственными предприятиями. Более экономичным и гибким может оказаться альтернативное решение, основанное на интеграции свободно распространяемого программного обеспечения. Такой подход позволит создать адаптивный проблемно-ориентированный вычислительный сервис, обеспечивающий моделирование процессов обогащения. О перспективности этого пути свидетельствуют

Литература:

1. Олейник А. Информационно-аналитическое обеспечение комплексного управления горнопромышленными предприятиями / А. Олейник, А. Рыженко, Т. Фильчакова и др. // Информационные ресурсы России. - 2005. - № 4. - С. 19-22.
2. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред: в 2 ч. / Р.И. Нигматулин. - М.: Наука, 1987. - 1 ч. - 464 с.
3. Андерсон Д. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: в 2 т. / Д. Андерсон, Дж. Таннехил, Р. Плетчер. - М.: Мир, 1990. - 1 т. - 384 с.
4. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов / Л. Сегерлинд. - М.: Мир, 1979. - 392 с.
5. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей: в 2 т. / К. Флетчер. - М.: Мир, 1991. - 1 т. - 504 с.
6. Бирюков В.В. Применение системы Femlab для моделирования гидродинамики течений в обогатительных аппаратах / В.В. Бирюков, А.Г. Олейник // Информационные ресурсы России. - 2007. - № 3. - С. 30-32.
7. FLUENT [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.ansys.msk.ru/?id=127>.

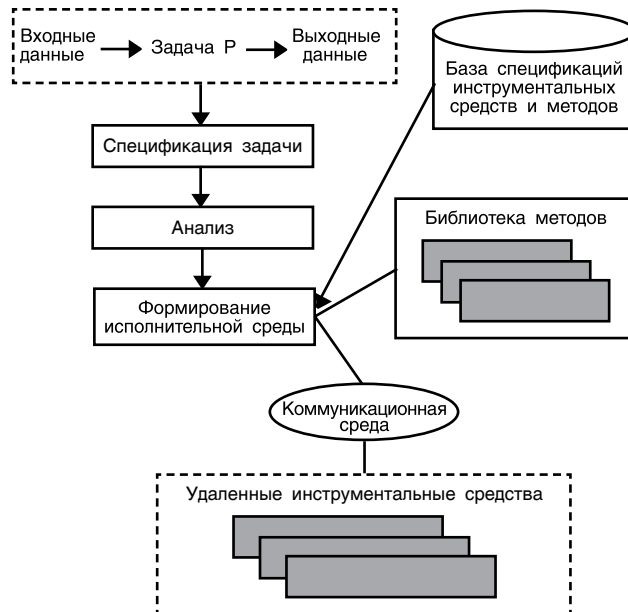


Рис. 2. Структурная схема решения задачи P

и укрепляющиеся тенденции к использованию «универсальных» форматов обмена информацией, развитие Grid-технологий и идей облачных вычислений.

Важным условием успешной реализации указанного подхода является «добрая воля» разработчиков и владельцев информационных ресурсов и вычислительных мощностей, а также координация их деятельности при формировании и развитии распределенных проблемно-ориентированных систем. Авторы полагают, что наряду с виртуальной средой и печатные издания, пропагандирующие отечественные достижения в области разработки и использования информационных ресурсов и технологий в различных областях деятельности, могут способствовать решению этой задачи.

Наглядным примером такого издания является журнал «Информационные ресурсы России», на протяжении 20-ти лет представляющий идеи, разработки и опыт широкого спектра разработчиков и пользователей информационных ресурсов.

8. CFD and CAE Software and Support [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.cd-adapco.com>.

9. Задачи аэро- и гидродинамики, механики жидкостей и газов, горения и детонации [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.parallel.ru/tech/engineering/pacet2.html>.

10. СИНЦ - Саровский Инженерный Центр: CFD/CAE/CAD/FEA технологии [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.saec.ru/starcd/>.

11. Что такое Star-CD? Обзор программы [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://www.procae.ru/articles/star-cd/76-about-star-cd.html>

12. Афанасьев А.П. Проблемы построения распределенной среды для решения декомпозируемых вычислительных задач / А.П. Афанасьев, В.В. Волошинов, О.В. Сухорослов // Прикладные проблемы управления макросистемами. Труды ИСА РАН, Т. 28. - М.: КомКнига, 2006. - С. 158-188.

13. Олейник А.Г. Синтез спецификаций исполнительной среды вычислительного эксперимента на основе концептуальной модели предметной области / А.Г. Олейник // Информационные технологии в региональном развитии. - Апатиты, 2004. - Вып. IV. - С.12-16.