

УДК 57+51-7

## ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ КАК СЦЕНАРИИ В СЕТЕВОЙ БИБЛИОТЕКЕ ВЫЧИСЛИМЫХ МОДЕЛЕЙ. ПРИМЕР ПУБЛИКАЦИИ И РАСЧЕТОВ ДВУХФАЗНОЙ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА ПОЧВЕННОЙ ВЛАГИ

© 2009 А.В. Воротынцев

Вычислительный центр им А.А.Дородницына Российской академии наук, Москва;  
e-mail: avv\_alexv@mail.ru

Описываются элементы архитектуры сетевой библиотеки вычислимых моделей, порядок работы пользователя на примере сценария расчета модели течения почвенной влаги.

Ключевые слова: *сетевая библиотека; перенос почвенной влаги.*

Насущна проблема создания в сети Интернет сетевых библиотек численных методов и прикладных вычислимых моделей, предназначенных для хранения множества численных методов и моделей, их расчета и использования прикладными специалистами и другими пользователями. Как и обычные библиотеки, такие библиотеки будут создаваться для хранения и получения проверенных знаний. Хотя таким библиотекам предстоит еще неизбежное становление и развитие, уже сейчас можно реализовать библиотеку с удобным легким доступом, представляющую в сети широкий спектр численных методов и полезных вычислимых моделей, решаемых итерациями.

В качестве сетевой библиотеки рассмотрим 1-ю версию системы Нива на рис. 1 и поясним ее архитектуру на примере расчета модели течения почвенной влаги (1).

Чтобы обеспечивать работу с библиотекой Нива практически любому пользователю, минимально достаточный интерфейс и набор операций были выбраны предельно простыми и надежными. Возможности пользователя представлены сценариями – графами работ ГиперМодели (ГМ). Скрывая детали, система показывает пользователю лишь то, чем он сможет управлять при расчетах: структурой графа ГМ и данными его узлов – МодОбъектов (МО), рис. 2. В этой версии Нивы изменять функциональность сценария мож-

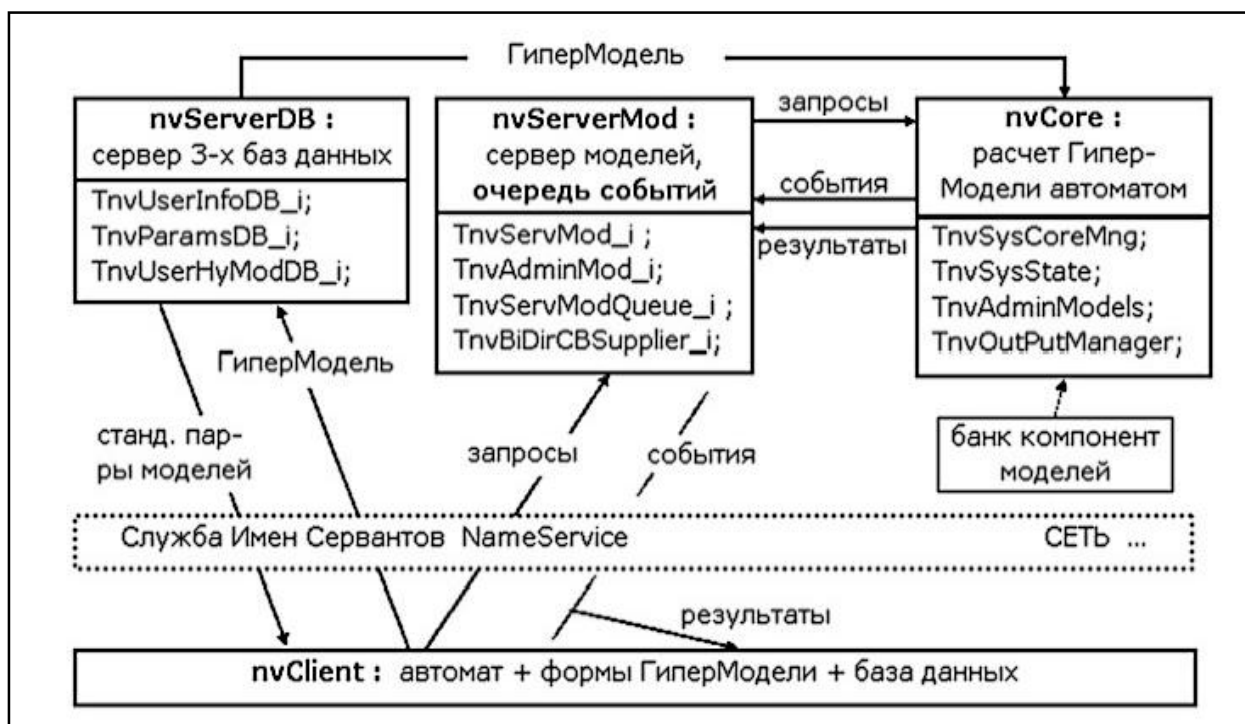


Рис. 1. Обобщенная структура системы Нива

но, только конструируя иной граф. Иными словами, удаленный пользователь может: а) конструировать сценарий расчета из заданного набора работ с этими МО; б) циклами итераций выполнять расчеты сценария на сервере, используя свои или стандартные данные МО; в) получать результаты.

Нива состоит из 3-х больших программ: а) сервера моделей *nvServerMod*, на котором хранится банк моделей в исполняемом коде; б) сервера *nvServerDB* трех баз данных, на котором хранится база данных *nvParamsDB* стандартных параметров МО моделей, база данных *nvUserHyModelsDB* параметров МО моделей, отредактированных пользователем, и база данных *nvUserInfoDB* информации о пользователях Нивы, а также с) из программы *nvClient*, размещенной на компьютере удаленного пользователя.

Программа пользователя *nvClient* и программа каждого сервера, размещенные на различных удаленных друг от друга компьютерах, связаны взаимным обменом данными по сетевым коммуникациям Интернет. На рис. 1 коммуникации изображены прямоугольником с названием `СЕТЬ...`.

Сетевой обмен данными осуществляется специальными сетевыми функциями, реализованными в сервантах, - на рис. 1 их имена заканчиваются `\_i`. Особенность сетевой функции в том, что она реализована и исполняется сервантом на одной стороне, а вызывается в программе на другой стороне сетевой коммуникации. Вызывающая сторона задает параметры функции и получает результат ее исполнения. На рис. 1 стрелка «запрос» указывает на сторону, где исполняется функция. Пример «запроса» - запуск пользователем цикла итераций ГМ на сервере.

Серванты создаются при запуске серверов *nvServerMod*, *nvServerDB*. Чтобы серванты оказались доступными программе *nvClient*, ссылки на них регистрируются в службе *NameService*, IP-адрес которой известен *nvClient*. Получив ссылку на сервант, *nvClient* может исполнять его сетевые функции. Служба *NameService* дает возможность расширять Ниву на несколько серверов, а также в перспективе работать несколькими пользователями.

Ключевыми для концепции Нивы являются понятие МодОбъекта и понятие ГиперМодели. ГиперМодель представляется композицией именованных МодОбъектов *[modName][objName]*, где *[modName]* – имя модели, функциональность которой обозначим через  $F_i$ , *[objName]* – имя набора данных  $D_i$ , достаточных для расчета мо-

дели  $F_i$ .

Таким образом, содержательно  $i$ -й МодОбъект – это пара  $M_i = \{D_i, F_i\}$ .

ГиперМодель графически представляется графом работ с ее МодОбъектами. Граф ГиперМодель конструируется удаленным пользователем из МодОбъектов, заранее откомпилированных и хранимых в базе *nvParamsDB* сервера. МодОбъект может иметь программный код неограниченной сложности и быть не только моделью, но и, например, численным методом, интерпретатором, графом и т.д.

Так, например, систему дифференциальных уравнений можно представить композицией МО, реализующих части этой системы. Это позволяет пользователю создавать функционально различные конфигурации ГиперМодели. Понятие МО позволяет естественно объединять в ГМ модель и численный метод ее расчета. На рис. 2 для примера в ГиперМодель включен подграф из 2-х МО разной функциональности – численного метода Рунге-Кутты-Мерсона *[RKM][standard]* и модели *[TrophicChain3][standard]* трофической цепи 3-х популяций.

На рис. 2 показан другой пример МО, которые имеют одинаковую функциональность – модель движения почвенной влаги *Water\_Air\_01*, но отличаются набором данных для подслоев почвы *Loamy sand*, *Loam*, *Silt loam* различного механического состава. Это позволяет легко конструировать расчет влагопереноса в нужном почвенном профиле.

Направленный граф ГМ показывает последовательность выполнения работ над ее МО. Работа заключается в исполнении реализованной в МО заданной функции. Отметим, что работа может не иметь интерпретации, физически содержательной с точки зрения модели.

Как выполняются работы в водной ГМ? Получив фокус управления программой, МодОбъект - численный метод *meth\_BDF\_for\_Water\_Air* - исполняет работы над подчиненными ему МодОбъектами *[Loamy sand]*, *[Loam]*, *[Silt loam]*, вызывая в них заданную функцию в последовательности, указанной стрелками. Функция рассчитывает правую часть, а также матрицу  $A_{SPi}$  для всех точек  $i$  той части почвенного профиля, которая представлена данным МодОбъектом. Если результат расчета не удовлетворяет заданному критерию точности, численный метод в цикле будет повторять ту же последовательность работ, но для другого теста численной схемы. Когда результат окажется удовлетворительным, фокус управления выйдет из цикла и будет передан в *[RKM][standard]*.

Заметим, что ошибочно полагать, будто сначала полностью рассчитывается МО *[Loamy*

sand], затем [Loam] и т.д. Использованная здесь численная схема совпадает с обычной схемой расчета этой задачи без участия графа.

МО обычно имеет именованные интерфейсные параметры, доступные другим МО по имени. Интерфейсные параметры позволяют без перекомпиляции связывать различные МО в ГиперМодель, например, старые численные методы и добавленные в систему МО новые модели. Интерфейсные параметры также обеспечивают МО быстрый обмен данными, что позволяет рассчитывать модели в частных производных за время сопоставимое с расчетом обычными программами.

Нива хранит на сервере не просто модель, а множество именованных откомпилированных ее МодОбъектов с разными значениями набора данных и возможно вариациями функциональности, для которых проверено функционирование модели. Это сравнимо с хранением обычной фун-

кции в табличной форме.

МодОбъекты иначе называются здесь ситуациями. Нива может хранить миллионы ситуаций. И хотя такой «табличный» способ представления моделей на первый взгляд кажется слишком ограничивающим, он дает сетевой библиотеке необходимое качество – надежность использования моделей.

Поясним структуру Нивы на рис. 1, описывая работу пользователя. Она включает 7 основных стадий: а) регистрация или проверка регистрации пользователя; б) получение списка ГМ пользователя; в) получение нужной ГМ или создание новой ГМ, если ее нет в списке; г) проверка ГМ на сервере nvServerMod, сохранение ГМ на сервере nvServerDB; д) инициализация ГМ в памяти nvServerMod; е) расчет ГМ циклами итераций, получение результатов; ж) закрытие сеанса и программы nvClient.

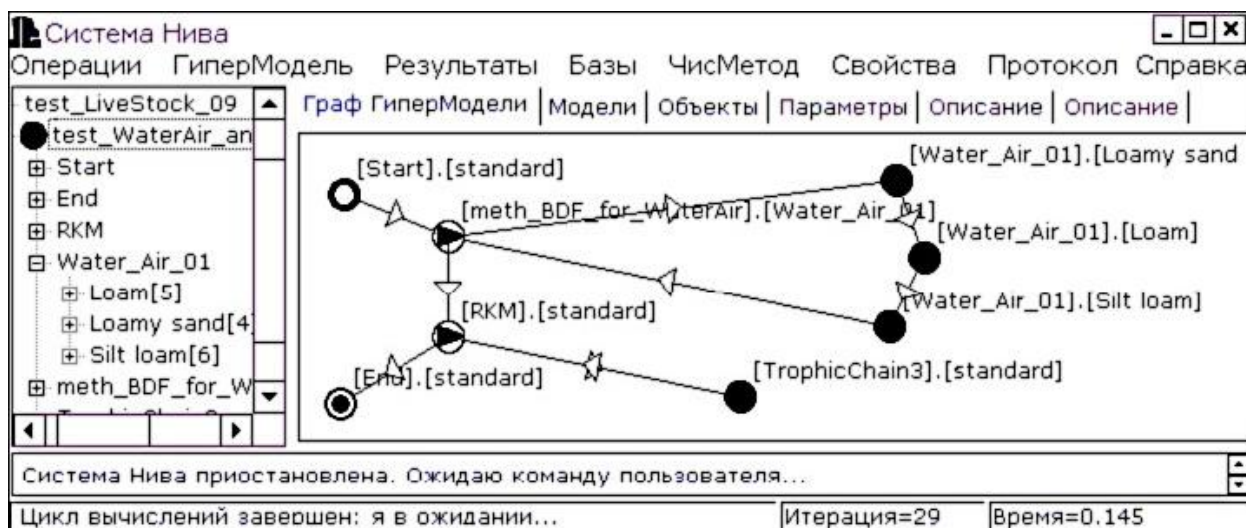


Рис. 2. Граф сценария (ГиперМодели) расчета водной модели (1).

После запуска пользователем программы nvClient на своем удаленном компьютере, перед ним появляется главная форма с набором вкладок, рис. 2. Форма показывает последнюю ГМ, с которой работал пользователь в предыдущем сеансе. Одной из команд главного меню “Операции” пользователь проверяет свою регистрацию на nvServerDB. Если проверка прошла успешно, для данного пользователя автоматически создаются на nvServerMod индивидуальные серванты, перечисленные на рис. 1 в прямоугольнике nvServerMod, а также инициализируется ядро nvCore, которое будет выполнять вычислительные и другие полезные работы с ГМ. Отметим, что ядро nvCore обособлено от собственно сервера nvServerMod, выполняющего лишь доставку запросов к nvCore и передачу удаленному пользователю событий, в том числе результатов

расчета, возникающих в nvCore. На рис. 1 это указано соответствующими стрелками.

Далее пользователь получает нужную ГМ либо создавая ее, либо запрашивая с сервера nvServerDB. Чтобы запросить ГМ, он получает список всех ранее созданных им ГМ (см. на рис. 2 слева), в списке выделяет нужную ГМ, затем щелчком требует переслать себе ее граф с nvServerDB. В итоге в правой части формы на вкладке `Граф ГиперМодели` рис. 2 появится граф ГМ. Вместе с графом будут получены значения входных параметров и начальные значения переменных для компонент ГМ, а также их разнообразные описания. Это показано на рис. 3.

Если нужной ГМ нет, пользователь создает ее. Он запрашивает каталог всех МО в базе сервера и просто перетаскивает мышкой нужные МО на вкладку `Граф ГиперМодели`, соединяя затем

их стрелками.

Командой меню, вызванного правым щелчком по полю вкладки `Граф ГиперМодели` полученный граф надлежит проверить с помощью анализатора сервера nvServerMod и специальных

грамматик [3]. Если проверка не оказалась успешной, граф ГМ придется реконструировать. Если проверка успешна, можно задавать входные данные и приступать к расчету ГМ.



Рис. 3. Изменения значений параметров МодОбъекта ГиперМодели

Пользователь может рассчитать ГМ на своих данных, изменив стандартные значения параметров и переменных МодОбъектов на вкладках `Модели`, `Объекты`, `Параметры` рис. 2 и 3, если изменение было разрешено автором. Пользователь также может выбрать переменные для вывода на графики/ряды/слайды (см. слева на рис. 2 узлы, окрашенные желтым).

Теперь командой `Создать` из меню, вызванного правым щелчком по полю вкладки, правильный граф ГМ отсылается на сервер nvServerMod в ядро nvCore, которое загружает в свою память исполняемый код компонент ГМ из банка компонент (см. на рис. 1 справа), инициализирует ком-

поненты ГМ заданными значениями параметров, дополнительно проверяет правильность этих значений, затем, следуя графу, выполняет сборку ГМ из МодОбъектов и исполняет заданный начальный цикл расчета ГМ. Если все успешно, пользователь увидит графики. Например, весьма скоро увидит профиль матричного (капиллярного) потенциала IPsiC (это переменная  $\psi_c$  в (1.11)) влаги в почве для ГМ на рис. 4. Слева на рис. 4 видно раскрытое поддерево описаний выводимых переменных для слоя суглинка [Loam]. Отметим, что была рассчитана весьма сложная нелинейная модель в частных производных для 3-х слой-



Рис. 4. Результаты расчета модели влагопереноса в частных производных

ной пористой почвы на сетке в 150 узлов, сведенная к системе 300 обыкновенных дифференциальных уравнений.

Той же командой можно продолжать циклы итераций столько, сколько нужно. Число итераций в цикле и шаг расчета и вывода результатов пользователь может изменять.

После расчета ГМ, командой `Операции/Выход` пользователь разрушает ГМ в памяти nvServerMod и прекращает работу своей программы nvClient. При этом автоматически перезагружаются серверы, участвовавшие в сеансе.

### ДВУХФАЗНАЯ МОДЕЛЬ ТЕЧЕНИЯ ПОЧВЕННОЙ ВЛАГИ

Двухфазная модель совместного капиллярно-го и гравитационного переноса фаз плотности  $\rho_\alpha$  и концентрации  $\theta_\alpha$  воды ( $\alpha = w$ ) и воздуха ( $\alpha = a$ ) в слое почвы представлена системой уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_w \theta_w) = -\text{div} \mathbf{j}_w - \tilde{e};$$

$$\mathbf{j}_w = -K_w \nabla(\psi_{G,w} - \rho_w \mathbf{g}); \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_a \theta_a) = -\text{div} \mathbf{j}_a;$$

$$\mathbf{j}_a = -K_a \nabla(\psi_{G,a} - \rho_a \mathbf{g}); \quad (1.2)$$

$$\psi_{G,w} = \psi_{G,a} + \psi_{G,ms}(\theta_w); \quad \theta_w + \theta_a = \theta_p; \quad (1.3)$$

$$S_e^{1/m} = \frac{1}{1+(\tilde{\alpha}\psi_{G,ms})^n}; \quad S_e \equiv \frac{\theta_w - \theta_{wr}}{\theta_{ws} - \theta_{wr}}; \quad (1.4)$$

$$K_\alpha = K_s \frac{\rho_\alpha}{\rho_{w0}} \frac{\mu_w}{\mu_a} g^{-1} k_{r\alpha}(S_e); \quad \alpha \in \{w, a\}; \quad (1.5)$$

$$k_{rw} = \sqrt{S_e} \left[ 1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2;$$

$$k_{ra} = \sqrt{1 - S_e} \left( 1 - S_e^{1/m} \right)^{2m}; \quad (1.9)$$

$$\rho_w = \rho_{w0} e^{\beta(\psi_{G,w} - \psi_{G,w0})}; \quad \rho_a = \psi_{G,a} W / (RT); \quad (1.10)$$

Система (1) решается для слоя почвы  $0 \leq z \leq H_s$  толщины  $H_s$  заполненного несколькими подслоями различного механического состава, например, песком, суглинком и песком. Особенность модели заключается в образовании подслоя, насыщенного водой.

В системе уравнений (1) искомыми являются функции – термодинамические потенциалы воды  $\psi_{G,w} \equiv \psi_{G,w}(t, z)$  и воздуха (пневматический потенциал)  $\psi_{G,a} \equiv \psi_{G,a}(t, z)$  дж/м<sup>3</sup>-Н<sub>2</sub>О. Матричный потенциал  $\psi_{G,ms}(\theta_w)$  является заданной функцией ОГХ Ван Генухтена от объемной влажности почвы  $\theta_w$  м<sup>3</sup>-Н<sub>2</sub>О/м<sup>3</sup>-почвы, определяемой выражениями (1.4).

Здесь:  $\theta_{wr}$  - остаточная (гигроскопическая) влажность,  $\theta_{ws}$  - влажность насыщения почвы;  $\theta_p$ , м<sup>3</sup>-Н<sub>2</sub>О/м<sup>3</sup>-почвы, - пористость почвы, т.е. доля объема, не занятая почвенным скелетом;  $K_\alpha$ , сут, - коэффициент проводимости фазы  $\alpha$ ,  $K_s$ , м/сут, - коэффициент фильтрации,  $\mu_\alpha$ , м<sup>2</sup>/сек - кинематическая вязкость воды и воздуха;  $\tilde{e}$ , - сток в корневую систему растений.  $g, n, m, \mu_\alpha, \rho_{w0}, \beta, W, RT$  - константы.

Разделив (1.3) на  $g\rho_{w0}$ , получим соотношение для напоров  $\psi_w = \psi_a - \psi_c$ ,

$$\text{где } \psi_{G,ms} = -\psi_c g \rho_{w0}, \text{ м-Н}_2\text{О} \quad (1.11)$$

На границе слоев потенциалы  $\psi_{G,w}$  и  $\psi_{G,a}$ , потоки  $j_w$  и  $j_a$  должны быть непрерывными, а влажности  $\theta_w$  и  $\theta_a$  могут быть разрывными.

Слой  $[0, H_s]$  разбивается на контрольные объемы  $V_i$  толщины  $h_i, i = 0, 1, \dots, N-1, N, V_0 = V_N = 0$ .

В центры  $V_i$  поместим узлы  $z_i$  сетки. Интегрируя (1) по каждому  $V_i$ , получим относительно  $\theta_w, \psi_w = \psi_{G,w} / (g\rho_{w0})$  систему ОДУ для каждого узла  $z_i$ :

$$A_{SP,i} \begin{Bmatrix} \dot{\psi}_{w,i} \\ \dot{\theta}_{w,i} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} O_{dw,i} \\ O_{da,i} \end{Bmatrix} = 0,$$

$$\text{где } A_{SP,i} = \begin{bmatrix} \hat{\rho}_w & \theta_w \frac{\partial \hat{\rho}_w}{\partial \psi_w} \\ \theta_a \frac{\partial \hat{\rho}_a}{\partial \psi_a} \frac{\partial \psi_c}{\partial \theta_w} - \hat{\rho}_a & \theta_a \frac{\partial \hat{\rho}_a}{\partial \psi_a} \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$O_{da,i} \equiv -\tilde{h}_i^{-1} (\tilde{J}_{\alpha,i+1/2} - \tilde{J}_{\alpha,i-1/2}), \quad \hat{\rho}_\alpha = \rho_\alpha / \rho_{w0},$$

$$\alpha = \{w, a\}, i=1, 2, \dots, N-1.$$

Система (4.2.3) имеет малые коэффициенты перед производными  $\dot{\psi}_w$ , т.е. относится к числу сингулярно-возмущенных систем. Ее детерминант в  $i$ -ой точке равен

$$\det A_{sp} = \hat{\rho}_a \theta_w \frac{\partial \hat{\rho}_w}{\partial \psi_w} + \hat{\rho}_w \theta_a \frac{\partial \hat{\rho}_a}{\partial \psi_a} - \theta_a \theta_w \frac{\partial \hat{\rho}_w}{\partial \psi_w} \frac{\partial \hat{\rho}_a}{\partial \psi_a} \frac{\partial \psi_c}{\partial \theta_w} \quad (3)$$

Для насыщенной водой точки  $\theta_a = 0, \theta_w = \theta_{ws}$  и  $\det A_{sp} = -\hat{\rho}_a \theta_w \partial \hat{\rho}_w / \partial \psi_w$ , а для сухой точки  $\theta_w = 0, \theta_a = \theta_p$  и  $\det A_{sp} = -\hat{\rho}_w \theta_a \partial \hat{\rho}_a / \partial \psi_a$ .

Поэтому отличная от 0 сжимаемость  $\partial \hat{\rho}_\alpha / \partial \psi_\alpha$  воды и воздуха обеспечивает невырожденность системы (2).

Жесткая система (2) решается численным методом «формулы обратного дифференцирования» [4].

В заключение автор благодарит всех обсуждавших концепцию сетевой библиотеки и, предполагая иных также заинтересованными, приглашает высказать по avv\_alexv@mail.ru замечания и участвовать в наполнении библиотеки своими моделями.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Буч Г. Объектно-ориентированное проектирование с примерами применения. Пер. с англ. М.: Конкорд, 1992. 539 с.
2. Воротынцева А.В. К концепции сетевых информационно-вычислительных библиотек // Моделирование и обработка информации. Сборник научных трудов МФТИ. М.: 2008.
3. Воротынцева А.В. О графическом интерфейсе сетевых информационно-вычислительных библиотек // Моделирование и обработка информации. Сборник научных трудов МФТИ. М.: 2008.
4. Jones J.E., Woodward C.S.. Newton-Krylov-multigrid solvers for large-scale, highly heterogeneous, variably saturated flow problems // Adv. Wat. Resour. 2001. № 24. p.p.763-774.

## ECOLOGICAL MODELS AS SCENARIOS IN THE NETWORK LIBRARY OF COMPUTABLE MODELS. THE EXAMPLE OF PUBLICATION AND CALCULATIONS OF TWO PHASE SOIL MOISTURE FLOW MODEL

© 2009 A.V. Vorotintsev

Dorodnitsyn Computing Center, Russian Ac.Sc., Moscow;  
e-mail: avv\_alexv@mail.ru

The elements of architecture of network library of computable models, the order of user work are described by the example of computing scenario of the model of the soil water flow.

Key words: *network library; soil water flow.*