

# Численное решение некоторых обратных задач переноса примеси на многопроцессорных вычислительных системах<sup>1</sup>

*Е. А. Панасенко, А. В. Старченко*

Томский государственный университет, Томск

В настоящее время проблема охраны окружающей среды и ее восстановления становится одной из важных задач науки, развитие которой стимулируется всевозрастающими темпами технического прогресса во всех странах мира [1]. Ухудшение качества атмосферного воздуха, накопление в нем газообразных компонентов вследствие выбросов в атмосферу отходов промышленных предприятий и выхлопных газов автотранспорта приводит к ухудшению здоровья населения, а в глобальном масштабе — к изменению климата на планете. Таким образом, проблема взаимодействия человека с окружающей средой в настоящее время представляет новую и активно развивающуюся область применений методов математического моделирования.

Одним из способов регулирования уровня загрязнения атмосферного воздуха является контроль интенсивности выбросов вредных веществ. Однако даже разветвленная сеть постов наземных наблюдений не всегда в полной мере способна предоставить необходимую для природоохранных служб информацию. Большую помощь здесь могут оказать применение методов математического моделирования и, особенно, технологии численного решения обратных задач по определению характеристик источников загрязнения атмосферного воздуха по данным измерений концентрации вредных веществ [1, 2, 4]. Существенное ускорение получения результатов расчетов и повышение качества численного прогноза в настоящее время обеспечивают современные высокопроизводительные многопроцессорные вычислительные системы.

Целью данной работы является построение параллельных алгоритмов решения обратных задач охраны окружающей среды методом Г. И. Марчука [1], опирающимся на использование сопряженных уравнений переноса и диффузии субстанции.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 07-05-01126.



## Математическая постановка обратной задачи с мгновенным источником

Для постановки обратной задачи используется метод Марчука, который основан на решении уравнения, сопряженного с полуэмпирическим уравнением турбулентной диффузии, и двойственным представлением функционала от концентрации примеси [1].

Для сокращения выкладок рассмотрим двумерное нестационарное уравнение «адвекции-диффузии», представляющее перенос примеси в заданном потоке:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right] + Q, \quad (1)$$

$$(0 < t < T, 0 < x < L_x, 0 < y < L_y)$$

где:  $C$  — концентрация примеси;  $U, V$  — компоненты вектора скорости потока;  $\Gamma$  — коэффициент турбулентной диффузии;  $Q = Q_0 \delta(t - t_0) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0)$  — член, моделирующий выброс из мгновенного точечного источника;  $Q_0$  — мощность источника;  $t_0, x_0, y_0$  — время и координаты выброса соответственно.

Начальные и граничные условия будут иметь вид:

$$t = 0: C(t, x, y) = 0;$$

$$x = 0: \frac{\partial C}{\partial x} = 0; \quad y = 0: \frac{\partial C}{\partial y} = 0; \quad (2)$$

$$x = L_x: \frac{\partial C}{\partial x} = 0; \quad y = L_y: \frac{\partial C}{\partial y} = 0.$$

Сопряженная к (1) и (2) задача получается следующим образом. Уравнение (1) умножается на некоторую функцию  $C^* = C^*(t, x, y)$  и интегрируется по времени и пространству:

$$\int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C^* \frac{\partial C}{\partial t} dy dx dt + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C^* U \frac{\partial C}{\partial x} dy dx dt +$$

$$+ \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C^* V \frac{\partial C}{\partial y} dy dx dt = \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C^* \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right) dy dx dt +$$

$$+ \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C^* \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right) dy dx dt + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C^* Q dy dx dt$$

Используя интегрирование по частям, начальные и граничные условия (2) приходим к выражению:

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C \left( -\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial UC^*}{\partial x} - \frac{\partial VC^*}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) \right) dy dx dt - \\ & - \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C \cdot C^* \Big|_0^T dy dx - \int_0^T \int_0^{L_y} U \cdot C^* \cdot C \Big|_0^{L_x} dy dt - \int_0^T \int_0^{L_y} V \cdot C^* \cdot C \Big|_0^{L_x} dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_y} \Gamma C^* \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_0^{L_x} dy dt - \int_0^T \int_0^{L_y} \Gamma C \frac{\partial C^*}{\partial x} \Big|_0^{L_x} dy dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \Gamma C^* \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_0^{L_x} dx dt - \int_0^T \int_0^{L_x} \Gamma C \frac{\partial C^*}{\partial y} \Big|_0^{L_x} dx dt + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C^* Q dy dx dt. \end{aligned}$$

Предположим, что функции  $C_i^*$  ( $i=1, \dots, N$ ) удовлетворяют уравнениям:

$$-\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial UC^*}{\partial x} - \frac{\partial VC^*}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} = P_i, \quad (3)$$

$$i=1, \dots, N,$$

$$T > t > 0, 0 < x < L_x, 0 < y < L_y$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$t=T: C^*(t, x, y) = 0;$$

$$x=0: UC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} = 0 \quad y=0: VC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} = 0; \quad (4)$$

$$x=L_x: UC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} = 0 \quad y=L_y: VC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} = 0.$$

где  $P_i = \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(t - t_i)$ ,  $i=1, \dots, N$ ;  $N$  – количество измерений концентрации  $C$  в точках с координатами  $(x_i, y_i)$  в моменты  $t_i$ .

С учетом уравнений вида (3) и выбранных начальных и граничных условий прямой и сопряженной задачи можно записать следующее двойственное представление функционала от концентрации [1, 3]:

$$J_i = \int_0^T dt \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} P_i C dx dy = \int_0^T dt \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C_i^* Q dx dy;$$

или с учетом вида функций  $P_i$  и  $Q$

$$J_i = C_i = Q_0 C_i^*(t_0, x_0, y_0), \quad i = 1, \dots, N, \quad (5)$$

где  $C_i^*(t, x, y)$  — решение сопряженной задачи с  $P_i$  правой частью;  $C_i = C(t_i, x_i, y_i)$  — измеренные значения концентрации.

Соотношения (5) можно рассматривать как уравнения относительно неизвестных  $Q_0, t_0, x_0, y_0$ , причем решение  $i$ -ой сопряженной задачи (3)–(4)  $C_i^*(t, x, y)$  зачастую может быть найдено только численно. Поэтому для нахождения параметров источника  $Q_0, t_0, x_0, y_0$  был построен следующий функционал

$$\begin{aligned} \phi(R, x, y, t) &= \sum_{i=1}^N (RC_i^*(t, x, y) - C_i)^2, \\ R > 0, 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < t < T, \end{aligned} \quad (6)$$

глобальный минимум которого достигается при  $R = Q_0$ ,  $x = x_0$ ,  $y = y_0$ ,  $t = t_0$ . Проверку глобального минимума  $\phi(R, x, y, t)$  необходимо проводить на каждом шаге по времени по всей расчетной области при одновременном численном решении  $N$  сопряженных задач (3), (4) с различными правыми частями  $P_i = \delta(t - t_i)\delta(x - x_i)\delta(y - y_i)$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

Для сокращения числа независимых переменных, по которым ведется поиск минимума, пользуясь необходимым условием экстремума функции нескольких переменных, из (6) можно выразить  $Q_0$ :

$$Q_0 = \frac{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t_0, x_0, y_0) \cdot C_j)}{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t_0, x_0, y_0))^2} \quad (7)$$

Тогда после подстановки (7) в (6) потребуется искать глобальный минимум следующего функционала:

$$\phi_1(x, y, t) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t, x, y) \cdot C_j)}{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t, x, y))^2} C_i^*(t, x, y) - C_i \right)^2 \quad (8)$$

Нахождение глобального в  $(0, T) \times [0, L_x] \times [0, L_y]$  минимума  $\phi_1(x, y, t)$  позволит установить координаты и момент срабаты-

вания мгновенного источника, а по формуле (7) определить его интенсивность.

### **Численное решение сопряженной задачи**

Для численного решения задачи (3)–(4) использовались метод конечного объема и явные разностные схемы. Для аппроксимации адвективных членов применялась схема MLU Ван Лира, которая незначительно уступает по точности при решении задач подобного класса схеме четвертого порядка Ботта [5, 6].

Тестирование правильности решения обратной задачи (определения координат, времени срабатывания и интенсивности источника) проводилось с использованием результатов численного решения прямой задачи для получения необходимых входных данных по концентрации примеси.

### **Параллельная реализация численного решения обратной задачи**

Следует обратить внимание на то, что при решении обратной задачи на каждом шаге по времени решается не одна, а  $N$  независимых сопряженных задач переноса типа (3)–(4), следовательно, они могут решаться параллельно.

Такие условия проведения численного моделирования заставляют привлекать высокопроизводительную вычислительную технику, в частности, вычислительный кластер ТГУ СКИФ Cyberia, на котором установлена библиотека передачи сообщений MPI (Message Passing Interface). Эта библиотека функций обеспечивает возможность обмена информацией между процессами параллельной программы, запущенными на многопроцессорной вычислительной системе.

Распараллеливание метода численного решения обратной задачи производилось с использованием принципа «master-slave» (рис. 2). При такой реализации управляющий процесс (master) передает каждому slave-процессу значения  $(U, V, \Gamma, x_p, y_p, t_p)$ , необходимые для расчетов, а подчиненные процессы (slave), получив исходные данные, в свою очередь, ведут расчеты независимо друг от друга, а полученные решения своей сопряженной задачи возвращают управляющему процессу, который про-

дит вычисления  $\phi_1(x, y, t)$  и ищет глобальный минимум этого функционала в  $(0, T) \times [0, L_x] \times [0, L_y]$ .

Заметим, что при таком способе организации параллельных вычислений при запуске параллельной программы на  $N+1$  вычислительных узлах большую долю вычислительной работы обычно выполняют  $N$  подчиненных slave-узлов. Один управляющий master-узел координирует работу остальных (подготавливает и рассылает slave-узлам данные для расчета, собирает данные и осуществляет их дополнительную обработку). На каждом узле в данный момент исполняется единственная задача (процесс), в случае недоступности требуемого количества узлов задание ставится в очередь до момента освобождения нужного количества узлов.

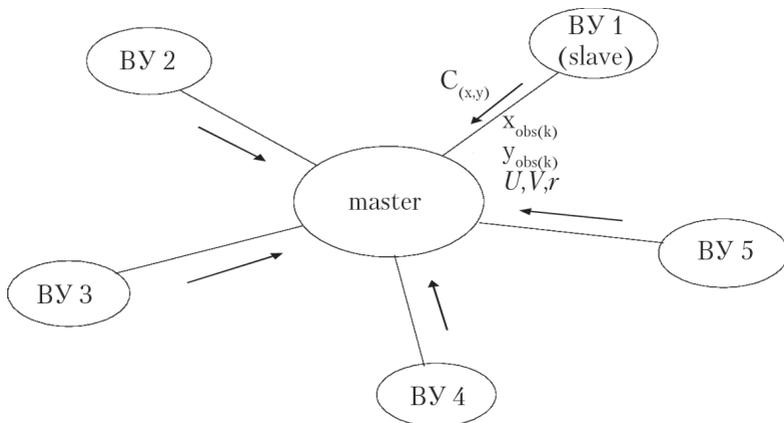


Рис. 2. Схема параллельной реализации

В нашем случае управляющий процесс передает каждому процессу значения параметров постов наблюдения, скорость, размеры области, коэффициент диффузии. Каждый из процессов рассчитывает решение сопряженной задачи и передает его мастеру, который, в свою очередь, обрабатывает полученные значения, вычисляет функционал и в точке его минимума с начала решения сопряженных задач получает параметры источника. Затем время уменьшается на величину шага, и мастер передает процессам новые значения метеорологических параметров, и т. д. расчет повторяется до окончания счета.

Также в данной работе был рассмотрен способ организации параллельных вычислений, при котором управляющий процесс дополнительно численно интегрировал одну сопряженную задачу (3)–(4).

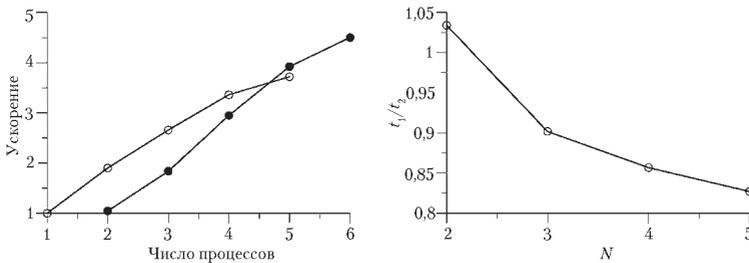


Рис. 3. Ускорение для двух способов параллельной реализации и отношение времен работы параллельных программ

На рис. 3 представлены характеристики ускорения рассмотренных выше параллельных алгоритмов численного решения обратной задачи, полученного при запуске параллельных программ на вычислительном кластере ТГУ СКИФ Cyberia.

Ускорение рассчитывается как отношение времени выполнения программы, решающей обратную задачу на одном процессоре, к времени численного решения обратной задачи на  $p$  процессорах. Из рис. 3 видно, что при выполнении параллельной программы на 5 процессорах вычислительного кластера СКИФ Cyberia при указанных выше параметрах и при условии, что master-узел только подсчитывает суммы для  $\phi_1(x, y, t)$  и ищет его минимум, удается получить ускорение вычислений почти в 4 раза (на рис. 3 — это кривая с закрытыми значками). В случае же, когда работают все процессы (и master и slave), но master-процесс, рассчитывая значения функционала  $\phi_1(x, y, t)$  и осуществляя поиск его минимума, еще решает одну сопряженную задачу, как и подчиненные процессы, получено ускорение в 3,5 раза (кривая с открытыми значками). Разница в ускорении связана с тем, что в последнем случае неравномерность загрузки процессоров более значительна, поскольку при увеличении числа используемых процессоров возрастает количество простаивающих slave-процессоров.

На рис. 3 также представлено изменение отношения времен работы параллельных программ в зависимости от количества со-

пряженных задач. Из рисунка также следует, что первый способ организации параллельных вычислений имеет решительное преимущество.

### Заключение

В представленной работе сформулирована постановка обратной задачи через аппарат сопряженных функций. Разработаны методы численного решения обратных задач, в которых по известным значениям измеренной концентрации примеси определяется месторасположение, время и мощность мгновенного выброса примеси. Описанные в работе подходы можно применять и для реальных обратных задач, например для определения расположения и интенсивности источников загрязнения атмосферного воздуха в г. Томске.

При параллельной реализации обратной задачи переноса примеси применена функциональная декомпозиция, в соответствии с которой решаемые сопряженные задачи распределяются по имеющимся вычислительным узлам, а управляющий узел осуществляет расчет значений функционала, нахождение минимума которого дает решение обратной задачи. На основе проведенных вычислительных экспериментов установлено, что параллельная реализация алгоритма ускоряет процесс вычислений почти в 5 раз на 6 процессорах. Кроме того, было показано, что нецелесообразно нагружать управляющий узел решением сопряженной задачи, поскольку в этом случае простаивают подчиненные вычислительные узлы.

### Литература

1. **Марчук Г. И.** Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М. : Наука, 1982. — 315 с.
2. **Агошков В. И.** Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. — М. : ИВМ РАН, 2003. — 256 с.
3. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://gis.green.tsu.ru/Website/askro/viewer.htm>, свободный.
4. **Алоян А. Е., Пененко В. В., Козодеров В. В.** Математическое моделирование в проблеме окружающей среды // Современные проблемы вычислительной математики и математичес-

кого моделирования. — М.: Наука, 2005. — Т. 2 Математическое моделирование. — С. 277–349.

5. **Панасенко Е. А.** Численное исследование переноса примеси в атмосфере // Третья всероссийская конференция молодых ученых. Фундаментальные проблемы новых технологий в 3-м тысячелетии. — 2006. — С. 582–586.

6. **Панасенко Е. А., Старченко А. В.** Численное решение некоторых обратных задач переноса примеси в атмосфере // Материалы XV Международ. конф. по механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС 2007). — М.: Вузовская книга, 2007. — С. 404–405.