

МЕТОДЫ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ЗАДАЧАХ МОНИТОРИНГА КАЧЕСТВА АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА *

Д.А. Беликов

Томский государственный университет

Мониторинг и прогноз уровня загрязнения атмосферы города являются одной из актуальных задач охраны окружающей среды, для решения которой успешно применяются методы математического моделирования. Область применения математических моделей постоянно расширяется и на данный момент включает следующие задачи: выявление характерных особенностей распространения загрязнений над выбранной территорией при различных погодных условиях, изучение вклада отдельных источников в общий баланс загрязнения атмосферы, оценку последствий возможных аварийных ситуаций на предприятиях повышенной опасности, оценку воздействия проектируемых объектов и т.п.

Чтобы достоверно прогнозировать загрязнение воздуха, необходимо учитывать химические и фотохимические реакции, происходящие в атмосфере между продуктами первичной эмиссии (выбросами промышленных предприятий) с участием компонентов воздуха и приводящие к образованию новых соединений, многие из которых весьма токсичны (озон, перацетилнитраты). С этой целью разрабатываются и внедряются в модели переноса примеси механизмы химических реакций. К наиболее известным и широко используемым кинетическим схемам химических реакций относятся:

CB4 (Carbon Bond 4) [1]. В базовом варианте включает 36 компонентов и 93 реакции (11 из них фотохимические). Доступны расширенные варианты этого механизма, учитывающие реакции с участием атмосферной влаги и реакции образования аэрозолей. Механизм CB4 компилируется с различными моделями переноса примеси (EPA's Empirical Kinetic Modeling Approach, Urban Airshed Model IV и V [1], CAMx [4]).

RADM2 (Regional Acid Deposition Mechanism version 2) [2], разработанная в 1990 г. В базовом варианте включает 57 компонентов и 158 реакций (21 из них фотохимические). Механизм RADM2 используется в моделях предсказания качества воздуха CMAQ [3].

На основе RADM2 разработан современный механизм RACM (Regional Atmospheric Chemistry Mechanism), в общих чертах схожий с

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 04-07-90219, № 05-05-98010р_обь.

RADM2 и включающий 77 компонентов и 237 уравнений. Механизм используется в модели предсказания качества воздуха EURAD [5].

В данных кинетических схемах химических реакций только некоторые соединения рассчитываются явно, остальные представляются посредством классов, отобранных в зависимости от типа связи атомов углерода в молекуле, или от молекулярного веса, или по какому-либо другому принципу. Такое неявное представление химических компонентов продиктовано необходимостью создания эффективных методов для решения системы уравнений химической кинетики.

В большинстве случаев применение кинетических схем с большим набором реакций позволяет на высоком уровне обеспечить воспроизведение процессов генерации и трансформации веществ в атмосфере. Однако кроме количества рассматриваемых химических реакций и числа реагирующих компонентов примеси, что, в первую очередь, определяет полноту представления в модели реально протекающих химических взаимодействий, существенным фактором является возможность явно рассчитывать концентрации отдельных соединений. Не последнее значение имеет и скорость вычислений. Подробные схемы при более тщательном моделировании атмосферной химии значительно уступают в быстродействии упрощенным механизмам, которые при менее детальном представлении химических процессов позволяют с приемлемой точностью явно рассчитывать концентрации соединений. Заметим, что качество расчетов по модели химических взаимодействий в значительной степени зависит от точности задания начальных и фоновых условий, а также данных о первичной эмиссии примеси, определение которых представляет собой непростую задачу.

Для оценки и прогнозирования загрязнения атмосферы тропосферным озоном и другими вторичными загрязнителями может быть использована упрощенная полуэмпирическая схема GRS (Generic Reaction Set) [6], которая содержит 11 химических компонентов (реагирующая часть смога $R_{\text{смог}}$, органические радикалы RP, перекись водорода H_2O_2 , оксид азота NO, диоксид азота NO_2 , озон O_3 , диоксид серы SO_2 , устойчивые негазообразные органические соединения углерода SNGOC, устойчивые газообразные соединения азота SGN, устойчивые негазообразные соединения азота SNGN, устойчивые негазообразные соединения серы SNGS), участвующих в 8 химических реакциях (таблица).

Данная схема включена в трехмерную негидростатическую модель TAPM (The Air Pollution Model) [6], которая представляет собой программный комплекс, нацеленный на изучение мезомасштабной метеорологии, а также для исследования переноса и трансформации загрязнителей. Для верификации модели TAPM был проведен ряд сопоставлений результатов расчетов с данными измерений по метеорологии и качеству воздуха. Оценка моделирования образования вторичных загрязнителей проводилась в реальных условиях города Мельбурна и области Пилбара, что на севере

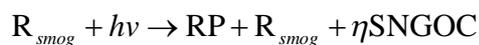
Австралии. Полученные результаты свидетельствуют о достижении высокого качественного и количественного уровня воспроизведения полей метеорологических параметров и полей концентрации озона, оксидов азота и аэрозолей [6].

Реакции и скорости реакций фотохимической схемы GRS

Реакции

Скорости реакций

Значения коэффициентов k_i



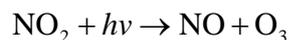
$$r_1 = k_1 C_{Rsmog}$$

$$k_1 = k_3 e^{(-4700(1/T - 1/316))}$$



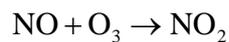
$$r_2 = k_2 C_{RP} C_{NO}$$

$$k_2 = 3580/60T$$



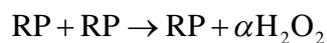
$$r_3 = k_3 C_{NO_2}$$

$$k_3 = 0.0001\delta \cdot TSR/60$$



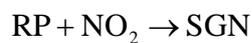
$$r_4 = k_4 C_{NO} C_{O_3}$$

$$k_4 = (924/60T) e^{-1450/T}$$



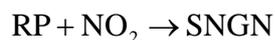
$$r_5 = k_5 C_{RP} C_{RP}$$

$$k_5 = 1000/60$$



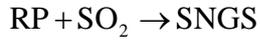
$$r_6 = k_6 C_{RP} C_{NO_2}$$

$$k_6 = 0.12/60$$



$$r_7 = k_7 C_{RP} C_{NO_2}$$

$$k_7 = k_6$$



$$r_8 = k_8 C_{\text{RP}} C_{\text{SO}_2}$$

$$k_8 = 0.1 k_6$$

Эйлера модель турбулентной диффузии, включающая транспортные уравнения с описанием адвекции, турбулентной диффузии и химических реакций схемы GRS, представима в виде [6]

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial UC_i}{\partial x} + \frac{\partial VC_i}{\partial y} + \frac{\partial W_c C_i}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial x} \langle c_i u \rangle - \frac{\partial}{\partial y} \langle c_i v \rangle - \frac{\partial}{\partial z} \langle c_i w_c \rangle + S_i + R_i; \quad (1)$$

$$i = 1, \dots, n;$$

здесь $C_i(t, x, y, z)$ – концентрация i -го компонента примеси; W_c – вертикальная составляющая скорости примеси; S_i – источниковый член, представляющий выбросы компонентов примеси в атмосферу и их осаждение на подстилающую поверхность; R_i описывает образование и трансформацию вещества за счет химических реакций с участием компонентов примеси; n – количество химических компонентов примеси, принятых к рассмотрению в схеме химических реакций.

Уравнения изменения концентрации компонентов примеси для схемы GRS имеют вид

$$\begin{aligned} R_{[\text{APM}]} &= F_{\text{CH}_2} \eta r_1 + F_{\text{HNO}_3} r_7 + F_{\text{H}_2\text{SO}_4} (r_8); & R_{[\text{SP}_x]} &= r_2 - r_6 - r_7; \\ R_{[\text{RP}]} &= r_1 - r_2 - r_5 - r_6 - r_7 - r_8; & R_{[\text{H}_2\text{O}_2]} &= \sigma r_5; \\ R_{[\text{SO}_2]} &= -r_8; & R_{[\text{NO}_x]} &= -r_6 - r_7; \\ R_{[\text{NO}_2]} &= r_2 + r_4 - r_3 - r_6 - r_7; & R_{[\text{R}_{\text{smog}}]} &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где APM – класс аэрозолей, объединяющий собой устойчивые негалообразные органические соединения углерода SNGOC, устойчивые негалообразные соединения азота SNGN и серы SNGS; $[\text{NO}_x] = [\text{NO}] + [\text{NO}_2]$ и $[\text{SP}_x] = [\text{O}_3] + [\text{NO}_2]$ – суммарные концентрации, введенные для обеспечения более высокой скорости получения решения системы уравнений химической кинетики, $F_{\text{CH}_2} = 0,57$, $F_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 4,0$, $F_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 4,0$ – приближенные коэффи-

циенты, определяющие переход устойчивых негазообразных соединений в аэрозоли, $\eta = 0,1$, $\alpha = \max\left(0,03, \exp\left(-0,0261 \frac{[R_{smog}]}{[NO_x]}\right)\right)$ – численные коэффициенты [6].

Входящие в уравнения (1) осредненные компоненты скорости ветра U , V определяются на основе модели АПС [7].

Для определения неизвестных корреляций $\langle c_i u \rangle$, $\langle c_i v \rangle$, $\langle c_i w \rangle$ в уравнениях (1), представляющих турбулентную диффузию примеси, используются дополнительные выражения в виде соотношений Буссинеска [7,8] или алгебраических выражений [9,10].

Пространственные нестационарные уравнения (1) решаются численно конечно-разностным методом в области с разнообразными источниками выбросов на подстилающей поверхности и высотными точечными источниками. Аппроксимация дифференциальных операторов осуществлена со вторым порядком точности по координатам и первым – по времени с использованием явных разностных схем для всех членов уравнения за исключением вертикальной диффузии. Такой способ дискретизации дифференциальной задачи позволяет решить проблемы, возникающие из-за нелинейности уравнений, и существенно ускорить получение результата вследствие применения экономичного метода прогонки при приемлемом ограничении на величину шага по времени [11]. Адвективные члены уравнений переноса (1) аппроксимируются с использованием монотонизированной противопотоковой схемы Ван Лира. Более подробно метод решения, используемая сетка, начальные и граничные условия описаны в [12].

Учет химических взаимодействий в модели требует расчета каждого компонента примеси из соответствующих уравнений химических реакций, решение которых весьма трудоёмко и затратно. Поэтому такие модели нуждаются в привлечении ЭВМ с высокой производительностью. Эффективным способом сокращения времени расчета, активно осваиваемым в настоящее время, является применение вычислительных систем с параллельной архитектурой. Принцип работы таких ЭВМ основан на том, что некоторые части вычислительного алгоритма могут выполняться независимо друг от друга, то есть параллельно [13]. В случае, если доля независимых, т.е. подлежащих распараллеливанию частей алгоритма велика, ускорение параллельной реализации алгоритма может оказаться значительным.

В настоящее время наибольшее распространение получили вычислительные системы, построенные с использованием кластерных технологий. Системы такого типа легко масштабируются, отличаются дешевизной и простотой проектирования. В 26-й редакции списка 500 мощнейших компьютеров мира Top500 (<http://top500.org/lists/2005/11/>), опубликованной в ноябре 2005 г., 360 систем или более 72% являются кластерными.

Дешевизна и простота архитектуры подобных систем оборачиваются сложностью обеспечения взаимодействия параллельных процессов между собой, потому что для обмена данными между процессами в кластерных системах необходимо производить передачу данных между узлами кластера. Время, затрачиваемое на обеспечение одной передачи данных, значительно превосходит время одной арифметической операции с этими данными: отношение времен может достигать тысяч и даже миллионов раз. Следовательно, для получения высокоэффективной параллельной реализации необходимо произвести согласованное распределение вычислений и данных между процессорами крупными порциями, а также обеспечить каждому процессору доступ к удаленным данным – данным, с которыми оперирует другой процессор, сведя при этом количество коммуникационных обменов к минимуму.

Декомпозиция расчетной области при моделировании пространственных процессов в атмосфере может быть проведена тремя способами: декомпозиция по трем направлениям (вертикальному и двум горизонтальным), двумерная декомпозиция (по двум направлениям) и одномерная. Для выбранного численного метода декомпозиция данных по вертикальной координате представляется нежелательной из-за применения прогонки в вертикальных столбцах сетки. Этот метод плохо распараллеливается для систем с распределенной памятью вследствие больших затрат на межпроцессорные обмены, которые свойственны моделям атмосферного пограничного слоя и моделям переноса примеси.

При небольшом числе используемых процессоров эффективность параллельных программ, построенных с применением различных способов декомпозиции области исследования, примерно одинакова, поэтому выбрана более простая одномерная декомпозиция по горизонтальной координате X . Схема декомпозиции представлена на рис. 1.

Отметим, что декомпозиция вдоль обеих горизонтальных координат предпочтительнее при наличии вычислительных систем с большим числом процессоров.

Проведём теоретическую оценку ускорения параллельной версии программы, выполняющейся на p узлах по отношению к однопроцессорной реализации. Примем за t_a время одной арифметической операции, а t_o – время для передачи одного числа между процессами. Пусть расчетная сетка $M \times M \times N$ узлов. Тогда время, затраченное на нахождение решения дискретного аналога одного уравнения переноса (1) на одном шаге по времени для последовательного варианта программы, можно оценить как $T_1 = m \cdot N \cdot M \cdot M \cdot t_a$; m – число арифметических операций метода при вычислении одного значения сеточной функции.

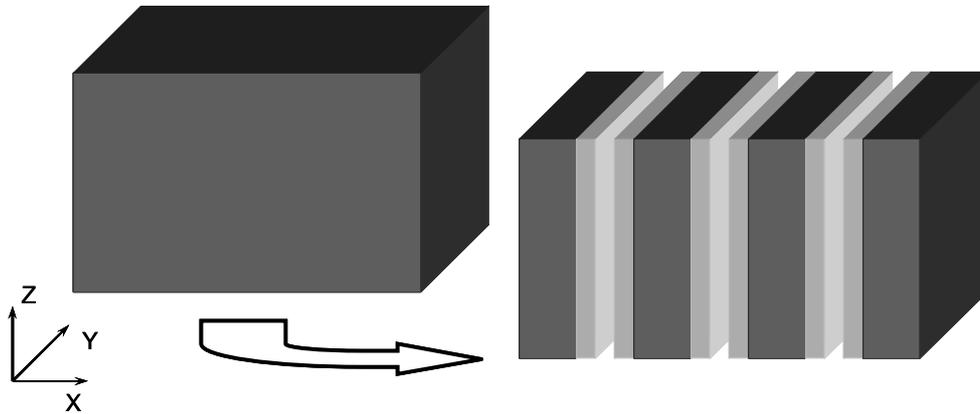


Рис. 1. Схема декомпозиции расчетной области. Светло-серым цветом обозначены области, данные из которых участвуют в обменных операциях

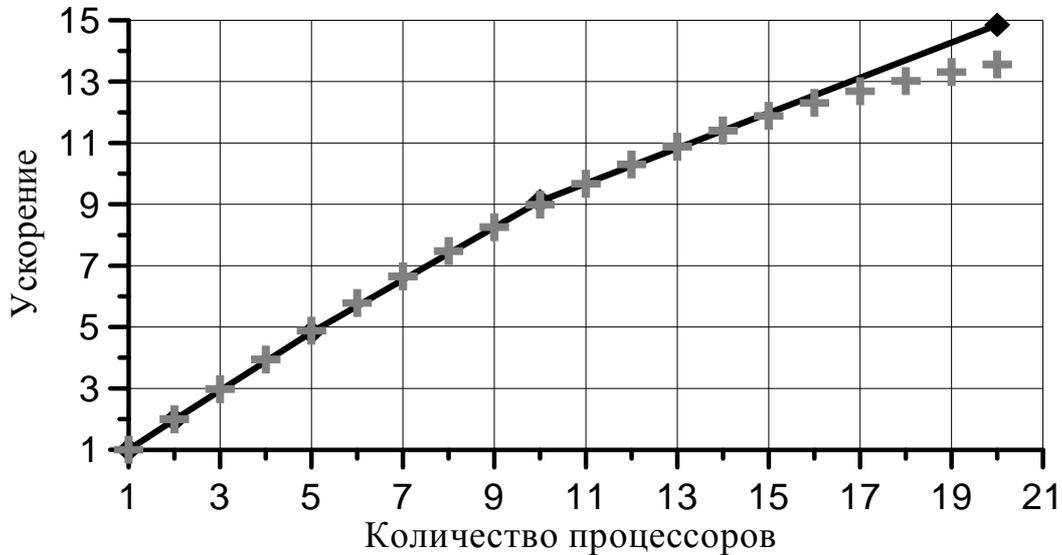


Рис. 2. Оценка ускорения параллельной реализации программы. Символы представляют результаты теоретической оценки, черная линия – расчеты на кластере ИОА СО РАН

На p процессорах время счета складывается из времени выполнения арифметических операций T_p^a и времени передачи данных между процессорами T_p^o :

$$T_p = T_p^a + T_p^o = m \cdot N \cdot M \cdot M \cdot \frac{t_a}{p} + 4N \cdot M \cdot t_o (p-1).$$

Тогда ускорение S_p будет

$$S_p = \frac{T_1}{T_p} = p / \left(1 + \frac{4\kappa(p-1)p}{mM} \right), \text{ где } \kappa = \frac{t_o}{t_a}.$$

Результаты сравнения теоретической оценки ускорения и практических расчетов на кластере ИОА СО РАН представлены на рис. 2. Как видно, кривая и символы почти сливаются, следовательно, практическая реализация параллельной версии расчетного алгоритма выполнена правильно.

Полученное пятнадцатикратное ускорение на 20 процессорах говорит о хорошей степени параллелизма алгоритма и удачном планировании обменов между процессами. Заметим, что достаточно высокое ускорение обусловлено значительными размерами расчетных подобластей и трудоемкостью вычислений в каждой из них. Поэтому доля обменов между процессами составляет незначительную часть от общего времени выполнения программы.

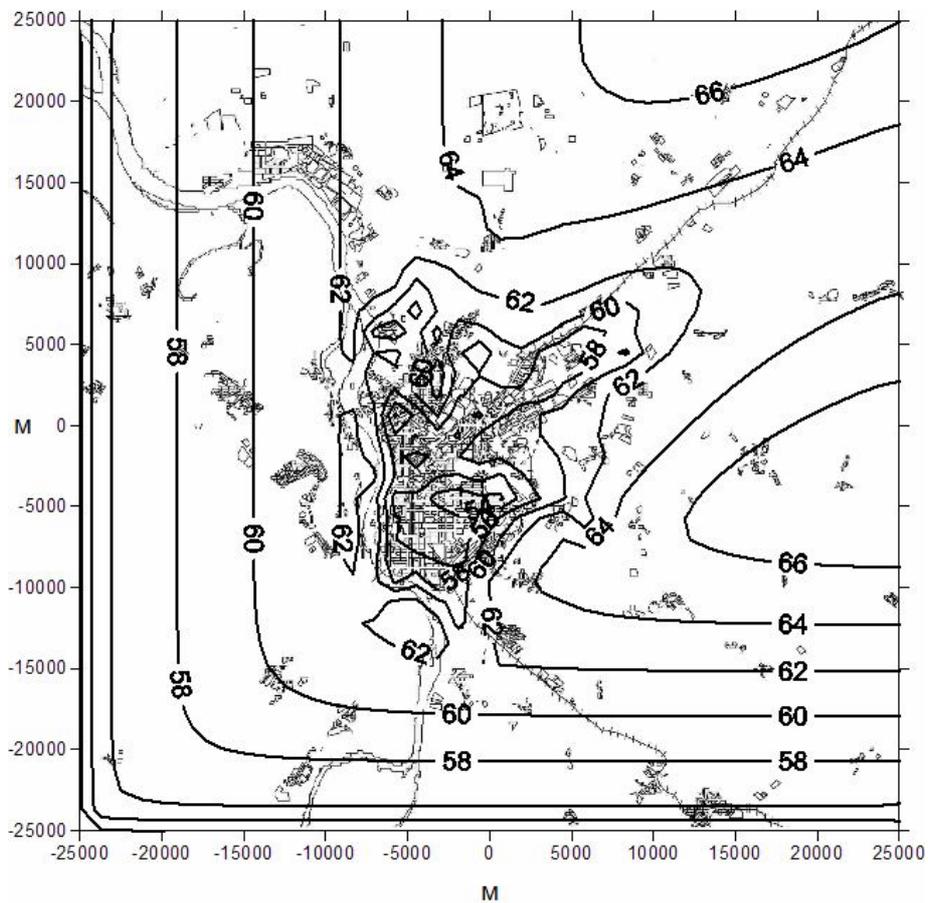


Рис. 3. Распределение концентрации озона ($\mu\text{кг}/\text{м}^3$) над городом Томском и пригородами на высоте 10 м. Расчет соответствует 14:00 часам 16 октября 2003 г.

Предложенная модель переноса примеси с учетом химических реакций позволяет исследовать динамику распределения приземных концентраций примесей первичной и вторичной эмиссий [112]. На рис. 3 представлено полученное расчетным путем распределение концентрации загрязнителя – тропосферного озона над городом Томском и пригородами на 14:00 16 октября 2003 г.

В работе проведен обзор механизмов химической кинетики, используемых для исследования химических реакций в атмосфере, и методов декомпозиции расчетной области при применении вычислительных систем с параллельной архитектурой. Представлена модель прогноза качества воздуха с учетом протекающих в атмосфере химических взаимодействий, для которой получена теоретическая и расчетная оценки ускорения параллельной версии программы. Выявлено, что весьма эффективно использование вычислительных систем с параллельной архитектурой для исследования уровня загрязнения атмосферы с учетом химических трансформаций загрязнителей. Представлены результаты исследования загрязнения воздуха в Томске.

Литература

1. Gery M. W., Whitten G.Z., Killus J.P., Dodge M. C. A Photochemical Mechanism for Urban and Regional Scale Computer Modeling // Journal of the Geophysics Research. – 1989. – Vol. 94. – P. 12925–12956.
2. Stockwell W.R., Kirchner F., Kuhn M. and Seefeld S. A New Mechanism for Atmospheric Chemistry Modeling // Journal of Geophysical Research. – 1997. – Vol. 102, № 22. – P. 25847–25879.
3. Byun D.W., Ching J.K.S. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System // EPA Report N. EPA-600/R-99/030, Office of Research and Development. U.S. Environmental Protection Agency, Washington, Dc., 1999. – 11 p.
4. www.camx.com/files/CAMxUsersGuide_v4_20.pdf
5. Elbern H., Schmidt H. Ozone episode analysis by four-dimensional variation chemistry data assimilation // Journal of the Geophysics Research. – 2001. – Vol. 106. – P. 3569–3590.
6. Hurley P. J. The Air Pollution Model (TAPM) Version 2 // CSIRO Atmospheric Research Technical Paper. – 2002. – №55. – 39 p.
7. Старченко А.В., Беликов Д.А. Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха // Оптика атмосферы и океана. – 2003. – Т.16, №7. – С. 657–665.
8. Берлянд М.Е. Прогноз и регулирование загрязнений атмосферы. – Л.: Гидрометеиздат, 1985. – 271 с.
9. Беликов Д.А., Старченко А.В. Моделирование турбулентного переноса примеси в пограничном слое атмосферы // Исследования по баллистике и смежным вопросам механики. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. – Вып.5. – С. 67–68.
10. Старченко А.В. Моделирование переноса примеси в однородном атмосферном пограничном слое // Труды Международной конференции ENVIROMIS-2000. – Томск: ЦНТИ, 2000. – С. 77–82.
11. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978. – 591 с.

12. Беликов Д.А., Старченко А.В. Исследование образования вторичных загрязнителей (озона) в атмосфере г. Томска // Оптика атмосферы и океана. – 2005. – Т. 18, № 5-6. – С. 435–443.
13. Старченко А.В., Есаулов А.О. Параллельные вычисления на много-процессорных вычислительных системах. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. – 56 с.