ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ОХРАНЫ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ[1]

А.В. Старченко

Томский государственный университет

В настоящее время у нас в стране и за рубежом наряду с приборным контролем качества воздуха широко используются методы математического моделирования при анализе характера распространения газодисперсных загрязнителей атмосферы, поступающих вместе с выбросами промышленных предприятий и автотранспорта. Методы математического моделирования позволяют быстро и с малыми затратами выполнять прогноз детальной картины распределения примесей в приземном слое атмосферы. Наряду с решением задач контроля и краткосрочного прогноза математическое моделирование может также использоваться для проведения сценарного анализа по выявлению наиболее неблагоприятных метеорологических условий, а также по установлению факторов (и объектов) повышенной экологической опасности в конкретном районе.

При численном моделировании рассеяния и переноса примеси используются в основном два подхода: эйлерова модель атмосферной диффузии и лагранжева дисперсионная стохастическая модель. В рамках первого подхода на эйлеровой конечно-разностной сетке для концентрации примеси решается трехмерное нестационарное уравнение «адвекции-диффузии» с источниковыми членами, моделирующими поступление, осаждение и химические превращения компонентов. Этот подход требует высокого сеточного разрешения в областях высоких градиентов концентраций, что в случае учета химических реакций между несколькими компонентами делает задачу чрезвычайно трудоемкой в вычислительном плане.

Второй подход представляет пространственный перенос примеси в атмосфере по траекториям движения одиночных частиц-трассеров, поступающих из источников загрязнения в воздушный бассейн, где под действием ветра и турбулентности происходит их рассеяние. Значения концентраций веществ оцениваются на эйлеровой разностной сетке по времени прохода частицей каждой отдельной ячейки. Поскольку в основе этого подхода лежит стохастическая модель, качественные результаты возможны только при запуске большого числа (нескольких тысяч) частиц из каждого источника, что требует привлечения суперкомпьютерной техники.

[1] Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 04-07-90219.

При использовании эйлерова подхода решается система прогностических уравнений «адвекции-диффузии» [1]:

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} + \frac{\partial Uc_j}{\partial x} + \frac{\partial Vc_j}{\partial y} + \frac{\partial W_j c_j}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_Z^h \frac{\partial c_j}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_Z^h \frac{\partial c_j}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_Z^h \frac{\partial c_j}{\partial z} \right) + Q_j, \; j = 1,...,s. \tag{1}$$

Здесь c_j – концентрация j-й компоненты примеси; Q_j – источниковый член, моделирующий поступление примеси от источников выбросов, изменение концентрации вследствие химических реакций и осаждение составляющей примеси; U,V – горизонтальные компоненты скорости ветра; W_j – скорость вертикального движения j-й компоненты примеси, складывающаяся из вертикальной скорости ветра и скорости подъема или осаждения примеси; s – количество компонент примеси; $K_Z^h = F_h\sqrt{El}$ – коэффициент турбулентной диффузии; E,l – энергия и масштаб турбулентных пульсаций; F_h – функция локальных значений турбулентных корреляций [1]. В качестве граничных условий для уравнения (1) используются простые градиентные соотношения на боковых, верхней и нижней границах области исследования.

Пространственные нестационарные уравнения (1), моделирующие перенос компонентов примеси внутри параллелепипеда с многочисленными линейными, точечными и площадными источниками на подстилающей поверхности и высотными точечными источниками, решались численно. Для этой области исследования строилась конечно-разностная сетка с постоянными размерами ячеек по горизонтальным направлениям и переменными вертикальными, уменьшающимися при приближении к поверхности. Аппроксимация дифференциальных операторов в (1) осуществлена со вторым порядком точности по координатам и первым – по времени с исполь-

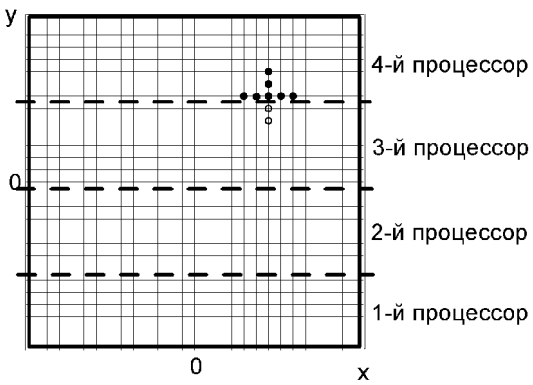


Рис.1. Расчетная сетка в xy-плоскости с указанием распределения подобластей по четырем процессорам. На приграничной сеточной линии приведен разностный шаблон. Открытые кружки указывают на сеточные значения, которые необходимо получить с соседнего процессора

зованием явных разностных схем для всех членов уравнения, за исключением вертикальной диффузии. Такой способ дискретизации дифференциальной задачи позволяет решить проблемы, возникающие из-за нелинейности уравнения (1) и существенно ускорить получение результата вследствие применения экономичного метода прогонки при приемлемом ограничении на величину шага по времени. Адвективные члены прогностических уравнений (1) аппроксимируются с использованием монотонизированной противопотоковой схемы Ван Лира, не допускающей появления «нефизичных» значений концентраций.

В рассматриваемой эйлеровой модели турбулентной диффузии основная вычислительная нагрузка связана с решением 3D прогностических уравнений (1). Требования контроля качества воздуха указывают на необходимость получения детальной картины распределения загрязнений в приземном слое воздуха, поэтому расчетная сетка должна иметь высокую плотность узлов в области исследования. Кроме того, для учета протекания химических реакций, приводящих к появлению вторичных загрязнителей воздушного бассейна (озон), необходимо рассмотрение переноса и рассеяния большого количества компонентов примеси. Такие условия проведения численного анализа заставляют привлекать высокопроизводительную вычислительную технику, в частности имеющиеся в распоряжении многопроцессорные кластерные системы Томского государственного университета (http://cluster.tsu.ru) и Института оптики атмосферы СО РАН (http://cluster.iao.ru), на которых установлен интерфейс передачи сообщений MPI (Message Passing Interface). MPI включает библиотеку функций для программирования обмена информации между процессами параллельной программы и загрузчик соответствующих исполняемых файлов на многопроцессорной вычислительной системе.

Распараллеливание численного метода решения уравнений (1) производилось с использованием геометрического принципа – декомпозиции по данным. Вся область исследования разделялась на одинаковые подобласти. В данной работе параллелепипед области исследования

$$-L_x/2 \le x \le L_x/2;$$
$$-L_y/2 \le y \le L_y/2;$$
$$\delta(x,y) \le z \le L_z$$

($\delta(x,y)$ - функция, описывающая рельеф подстилающей поверхности) разрезался сечениями $y =$ const с распределением данных каждой подобласти соответствующему процессорному элементу. Все сеточные значения концентрации $(c_j)^{n+1}_{k,l,m}$ равномерно распределялись по вычислительным узлам многопроцессорной системы с распределенной памятью. Внутри каждой подобласти сеточные уравнения, полученные в результате принятого подхода дискретизации уравнений (1), решались одновременно методом прогонки. Однако из-за выбранного разностного шаблона при расчете значе-

ний концентраций вдоль двух приграничных сеточных линий (вблизи верхней или нижней границы подобласти; рис.1) необходимы сеточные значения концентрации из соседней подобласти. Поэтому для корректной работы параллельной программы следует организовать межпроцессорные обмены приграничных сеточных значений. Это было выполнено с использованием функций библиотеки передачи сообщений MPI_SendRecV. Кроме того, при подготовке проведения параллельных расчетов применялись следующие функции библиотеки Message Passing Interface: MPI_Bcast, MPI_Scatter (для рассылки исходных данных и информации об источниках выбросов по другим процессорам), MPI_Gather (для «сборки» массивов всех значений концентрации на одном процессоре).

Предложенный метод решения задачи о распределении концентраций основных загрязнителей над городом с использованием высокопроизводительной вычислительной системы был применен для условий г. Томска. Учитывалось 119 линейных, 12 площадных и 338 точечных источников выбросов. Расчеты выполнялись на сетке 100x100x50 с шагом по времени 15 секунд для вычисления распределений концентраций основных загрязнителей городского воздуха.

На рис. 2 и 3 представлены характеристики эффективности и ускорения рассмотренного выше параллельного алгоритма решения задачи переноса примеси, полученные при ее запуске на кластерной установке

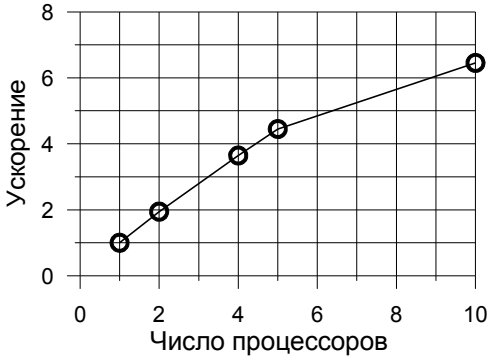


Рис. 2. Ускорение параллельных вычислений

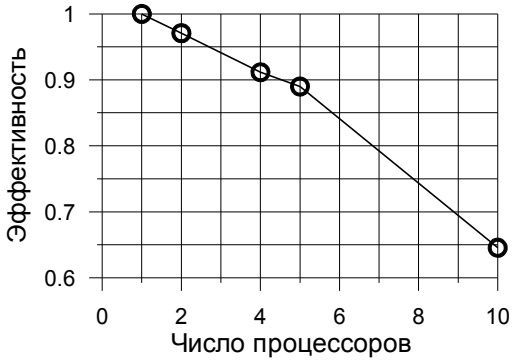


Рис. 3. Эффективность параллельной программы

Томского государственного университета (9 двухпроцессорных вычислительных узлов с процессорами Pentium III 650MHz, RAM 256Mb соединены сетью Fast Ethernet 100Mbit). Ускорение рассчитывается как отношение времени выполнения задачи на одном процессоре к времени решения задачи на p процессорах при неизменных других параметрах. Из рис. 2 видно, что при выполнении параллельной программы на 10 процессорах кластера ТГУ при указанных выше условиях удается получить ускорение вычислений более чем в 6 раз. В то же время величина эффективности параллельной программы (отношение ускорения к числу использованных в расчетах процессоров) с ростом p уменьшается. Это объясняется тем, что при фик-

сированном количестве узлов конечно-разностной сетки отношение объема вычислительной работы к числу совершаемых обменов между процессорами снижается. Тем не менее на 10 процессорах эффективность параллельного алгоритма остается достаточно высокой и для выбранных размеров сетки достигает 65%.

Сравнительные расчеты, выполненные на многопроцессорной вычислительной системе Института оптики атмосферы СО РАН (10 двухпроцессорных элементов Pentium III 1GHz, RAM 1Gb, сеть Gigabit Ethernet 1Gbit), показали, что временные затраты с использованием десяти двухпроцессорных элементов при получении прогноза на двое суток по распределению четырех основных загрязнителей городского воздуха занимают чуть более 3 часов реального времени.

Лагранжева дисперсионная стохастическая модель позволяет аккуратно рассчитывать начальный этап подъема нагретой примеси, осаждение и перенос промышленных выбросов, содержащих взвешенные полидисперсные частицы. В рамках этого подхода распространение загрязнителей оценивается по траекториям большого числа одиночных частиц-трассеров, поступающих из источников в воздушный бассейн, где под влиянием ветра и турбулентных флуктуаций происходит их рассеяние. Траектории представительных частиц рассчитываются из следующих уравнений:

$$\vec{r}_m(t+\Delta t) = \vec{r}_m(t) + \left[\vec{W}_m(\vec{r}_m,t) + \vec{w}(\vec{r}_m,t)\right]\Delta t\,, \qquad (2)$$

где $\vec{r}_m$ – радиус-вектор положения m-й частицы; $\vec{W}_m$ – осредненная скорость примеси, рассчитываемая на основе значений скорости ветра и скорости подъема (осаждения) примеси; $\vec{w}$ – турбулентные пульсации скорости ветра; Δt – шаг интегрирования по времени. Значения компонент пульсационной скорости ветра определялись из конечно-разностного аналога уравнения Ланжевена [2]:

$$\vec{w}(\vec{r}_m(t+\Delta t), t+\Delta t) = \vec{w}(\vec{r}(t),t) + \vec{a}\Delta t + (C_0\varepsilon)^{0,5}\vec{R}\Delta t\,. \qquad (3)$$

Ускорение $\vec{a}$ зависит от стратификации атмосферы, величины скорости диссипации энергии турбулентности ε, нормальных напряжений Рейнольдса $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ и определяется выражениями, предложенными в [2]. Последнее слагаемое в (3) представляет турбулентную диффузию, $\vec{R}$ – вектор, компоненты которого суть случайные числа, описываемые нормальным гауссовым распределением с нулевым средним. В случае, когда частица достигнет верхней или нижней границы расчетной области, используются условия идеального отражения. Если частица-трассер пересекает боковую границу, то расчет ее движения прекращается.

Концентрация примеси рассчитывается по траекториям частиц на эйлеровой сетке из следующего соотношения:

$$c_{i,j,k} = \frac{Q}{N * Vol_{i,j,k}} \sum_{m=1}^{N_{i,j,k}} \Delta t_m\,, \qquad (4)$$

где (i, j, k) – номер ячейки сетки; $Vol_{i,j,k}$ – объем ячейки; Q – интенсивность источника (кг/с); N – число частиц, запущенных из источника; $N_{i,j,k}$ – число частиц, прошедших через ячейку; Δt_m – время прохода частицы через ячейку. Поскольку траектории движения каждой отдельной частицы рассчитываются независимо, этот подход идеально распараллеливается. Все частицы-трассеры, поступающие из одного источника, распределялись по процессорам, и расчет их перемещения велся параллельно. После окончания расчетов данные со всех вычислительных узлов собирались на узле-сервере с использованием функции библиотеки Message Passing Interface MPI_Reduce.

Литература

1. Старченко А.В. Моделирование переноса примеси в однородном атмосферном пограничном слое // Материалы Международной конференции ENVIROMIS2000. – Томск, 2000. – С. 77–84.
2. Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей /Под ред. Ф.Т.М.Ньистадта и Х.Ван Допа. – Л.: Гидрометеоиздат, 1985. – 351 с.