Применение суперкомпьютеров для краткосрочного прогноза качества воздуха над территорией г. Томска

А.А. Барт, А.В. Старченко, А.З. Фазлиев
Томский государственный университет

Описывается информационно-вычислительная система, ядром которой является математическая модель переноса примеси. Основная задача системы – выполнение прогностических расчетов качества атмосферного воздуха над территорией г. Томска на основе метеорологического прогноза по оперативной глобальной модели Гидрометцентра РФ. Модель переноса примеси реализована на кластере ТГУ СКИФ Cyberia, что позволяет получать прогноз в короткие сроки.

Введение

Атмосфера Земли – сложная система, в которой ряд физических и химических процессов протекает одновременно. Математические модели, в свою очередь, предоставляют необходимый «каркас» для объединения представлений об отдельных атмосферных процессах и их взаимодействии между собой.

Успешное решение задач прогноза уровня загрязнения воздуха основано на использовании математических моделей, учитывающих физические особенности распространения примесей в атмосфере, связи между концентрациями примесей и метеорологическими параметрами: скоростью и направлением ветра, инверсией (повышение температуры воздуха с высотой), осадками, туманами.

Математическая модель переноса примеси

Для расчета концентрации компонентов примеси с учетом химических реакций применяется эйлерова модель турбулентной диффузии, включающая транспортные уравнения с описанием адвекции, турбулентной диффузии и химических реакций:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t}+\frac{\partial UC_i}{\partial x}+\frac{\partial VC_i}{\partial y}+\frac{\partial WC_i}{\partial z}=-\frac{\partial}{\partial x}\langle c_i u\rangle-\frac{\partial}{\partial y}\langle c_i v\rangle-\frac{\partial}{\partial z}\langle c_i w\rangle- \quad (1)$$
$$-\sigma_i C_i+S_i+R_i, i=1,..,n_s.$$

Здесь C_i, c_i – осредненная и пульсационная составляющие концентрации i-й компоненты примеси; U, V, u, v – осредненные и пульсационные составляющие вектора горизонтальной скорости ветра; W, w – осредненная и пульсационная составляющие вертикальной компоненты скорости примеси; $\langle\,\rangle$ – осреднение по Рейнольдсу; S_i – источниковый член, представляющий выбросы компонентов примеси в атмосферу; R_i описывает образование и трансформацию вещества за счет химических и фотохимических реакций с участием компонентов примеси; σ_i – скорость влажного осаждения примеси за счет осадков; n_s – количество химических компонентов примеси, концентрации которых необходимо определить; x, y – горизонтальные координаты, ось Ox направлена на восток, Oy – на север; z – вертикальная координата; t – время; $0 \le t \le T$, $-L_x/2 \le x \le L_x/2$, $-L_y/2 \le y \le L_y/2$, $0 \le z \le h$, T – время моделирования, Lx, Ly – горизонтальные размеры области, h – высота расчетной области [1].

Задание параметров атмосферного пограничного слоя

Для реализации модели переноса примеси необходимо определить для каждого момента времени профили компонент вектора скорости, температуры и турбулентных характеристик. Они получались в результате усвоения результатов 48-часового метеорологического прогноза, выполняемого с использованием глобальной модели ПЛАВ [2]. ПЛАВ – это полулагранжева модель атмосферы с высоким разрешением (горизонтальная сетка $0{,}72^{\circ}$ по широте, $0{,}9^{\circ}$ по долготе, 28 вертикальных слоев), принятая Гидрометцентром в качестве оперативной модели для среднесрочного прогноза с выдачей результатов через 6 ч.

Для усвоения данных прогноза по модели ПЛАВ в разрабатываемой системе прогноза химической погоды в городе в настоящее время используется одномерная нестационарная математическая модель атмосферного пограничного слоя (АПС), которая позволяет подробно рассчитывать вертикальную структуру нижней тропосферы и ее турбулентные характеристики [2].

Расчет химических реакций

Моделирование химических и фотохимических реакций в (1) проводилось на основе химического механизма, предложенного A. Zakey (Датский метеорологический институт) на основе скорректированного сокращенного химического механизма образования приземного озона, взятого из работ [4, 5]. В сокращенной кинетической схеме учитываются 20 химических реакций между следующими компонентами: NO_2,

NO, $O(^1D)$, $O(^3P)$, O_3, HO, H_2O_2, HO_2, CO, SO_2, HC, HCHO, RO_2 , O_2, N_2, H_2O. Значения концентраций O_2, N_2, H_2O , в силу малого влияния на них рассматриваемых химических реакций, принимаются постоянными [4, 5].

Реакции фотохимической схемы, используемой в DMI

Реакции фотолиза	***Неорганические реакции***
$NO_2+hv \rightarrow O(^3P)+NO$	$O(^3P)+O_2 \rightarrow O_3$
$O_3+hv \rightarrow O(^1D)+O_2$	$O(^1D)+N_2 \rightarrow O(^3P)+N_2$
$HCHO+hv \rightarrow 2HO_2+CO$	$O(^1D)+O_2 \rightarrow O(^3P)+O_2$
$HCHO+hv \rightarrow H_2+CO$	$O(^1D)+H_2O \rightarrow 2HO$
Органические реакции	$HO_2+NO \rightarrow NO_2+HO$
$RO_2+NO \rightarrow NO_2+HO_2+HCHO$	$O_3+NO \rightarrow NO_2+O_2$
$HCHO+HO+O_2 \rightarrow HO_2+CO+H_2O$	$CO+HO \rightarrow HO_2+CO_2$
$RO_2+HO_2 \rightarrow ROOH+O_2$	$HC+HO \rightarrow RO_2+H_2O$
$RO_2+RO_2 \rightarrow prod$	$HO+NO_2 \rightarrow HNO_3$
	$HO_2+HO_2 \rightarrow H_2O_2+O_2$
	$2HO_2+H_2O \rightarrow H_2O_2+H_2O+O_2$
	$HO+SO_2 \rightarrow H_2SO_4+HO_2$

Численный метод и его параллельная реализация

При построении разностной схемы для уравнения (1) использовалась сетка с переменным по z шагом, сгущающаяся к поверхности Земли. При замене дифференциального уравнения (1) его разностным аналогом применялись явно-неявные разностные схемы с первым порядком аппроксимации по времени и вторым по координатам. Все члены уравнения (1) аппроксимируются на k-м слое по времени, за исключением вертикальной диффузии и членов, отвечающих за влажное осаждение примеси, поступление примеси от источников и химические реакции, которые берутся на (k+1)-м слое по времени.

Для получения конечно-разностного аналога уравнения (1) используется метод конечных объемов. Для аппроксимации диффузионных потоков используется центрально-разностный оператор. Для аппрок-

симации адвективных членов применяется направленная противопотоковая схема MLU [3].

При моделировании переноса примеси используются среднегодовые данные антропогенной эмиссии загрязнителей городского воздуха. Источники делятся на 3 категории: точечные, линейные (дороги) и площадные (крупные предприятия). Для каждой из ячеек поверхности задается расход выбросов 17 различных по составу химических веществ.

Параллельная версия алгоритма была построена с использованием двумерной декомпозиции сеточной области. Декомпозиция осуществлялась по направлениям *Ox* и *Oy*.

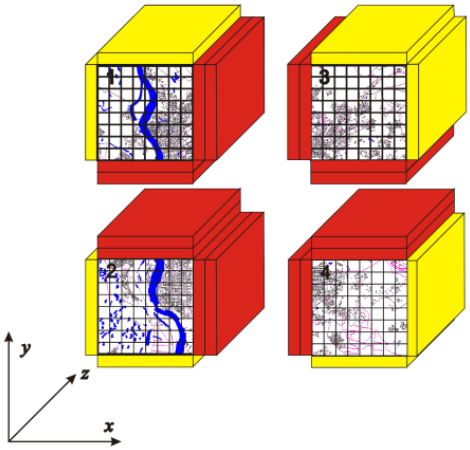

Рис. 1. Схема двумерной декомпозиции расчетной области

На рис. 1 присутствуют светлые блоки по краям расчетной области, являющиеся фиктивными границами, темные блоки, расположенные со стороны разделения области, являются блоками обмена данными между процессорами. При такой декомпозиции можно использовать большое количество процессоров суперкомпьютера, а доля временных затрат, связанных с необходимостью на каждом шаге по времени передавать данные между процессорными элементами, меньше, чем при одномерной декомпозиции.

Ускорение и эффективность

Для исследования ускорения и эффективности модели были проведены расчеты на новом (1 узел – 2 шестиядерных процессора Intel Xeon 5670 2,93 ГГц с 8 Gb RAM) и старом (1 узел – 2 двуядерных процессора Intel Xeon 5150 2,66 ГГц с 8 Gb RAM) сегменте кластера ТГУ СКИФ Cyberia [7]. Расчеты выполнялись на 4, 16, 25 и 100 ядрах. На рис. 2 представлены графики зависимости ускорения и времени, требуемого на расчет, от количества используемых ядер.

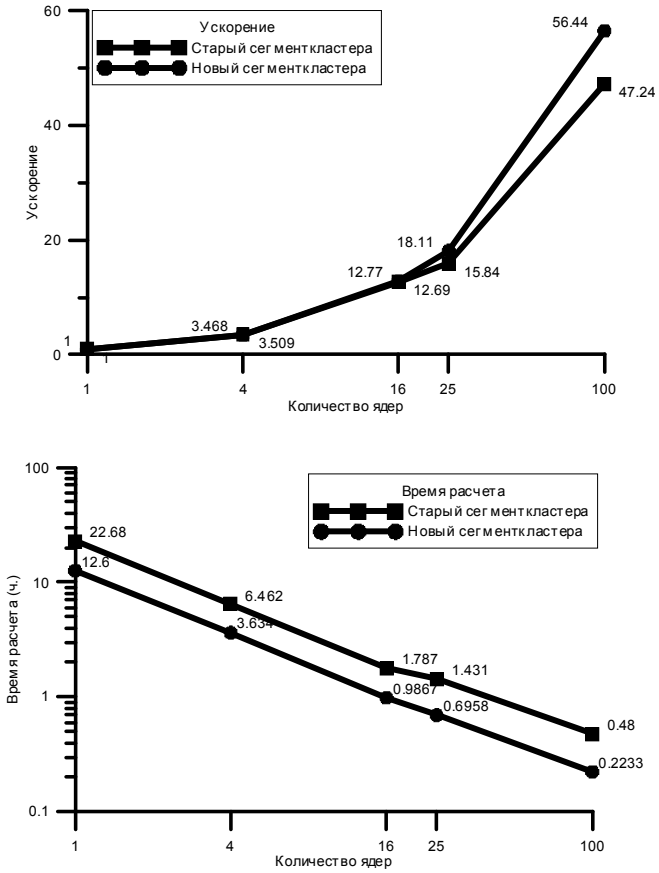

Рис. 2. Графики ускорения и времени, затрачиваемого на прогноз модели переноса примеси

Для ежедневного расчета используется 16 ядер кластера. Количество ядер, как видно из графика ускорения (см. рис. 2), выбрано оптимально для выполнения расчетов. При использовании 16 ядер время выполнения одного расчета составляет 1 ч. В случае оперативного расчета присутствует возможность запуска на большем количестве ядер: при запуске моделирования на 100 ядрах расчет выполнится за 15 мин. Но при увеличении количества ядер с 16 до 100 (в 6,25 раза) время, затрачиваемое на прогноз, уменьшается всего в 4 раза. Кроме того, не всегда имеется возможность получить 100 ядер для расчета.

Сравнение результатов моделирования с данными измерений

Проверка полученных результатов моделирования осуществлялась путем сравнения расчетов с данными измерений, проведенными на ТОР-станции Института оптики атмосферы СО РАН в Томске [7].

Расчетная область представляет собой часть атмосферы размером 50x50x2 км, выбранная таким образом, что ее квадратное основание содержит участок подстилающей поверхности с г. Томском в центре. В расчете учитывается эмиссия примеси от линейных, площадных и точечных источников, находящихся на поверхности или приподнятых над землей. Область покрывается вычислительной сеткой с размерами 100x100x28 узлов. Период прогностического моделирования обычно составляет 24 ч.

На рис. 3 сплошной линией представлены результаты численного моделирования, символами отмечены результаты измерений, проводимых на ТОР-станции ИОА, для каждого измерения вдоль оси значений приведена погрешность. На графиках дается сравнение измерений и расчетов силы и направления ветра, а также концентрации таких загрязнителей, как монооксид углерода (CO), диоксид азота (NO_2) и озон (O_3). Из графиков сравнения видно, что математическая модель хорошо предсказывает изменение ветра и значений рассматриваемых концентраций в течение суток.

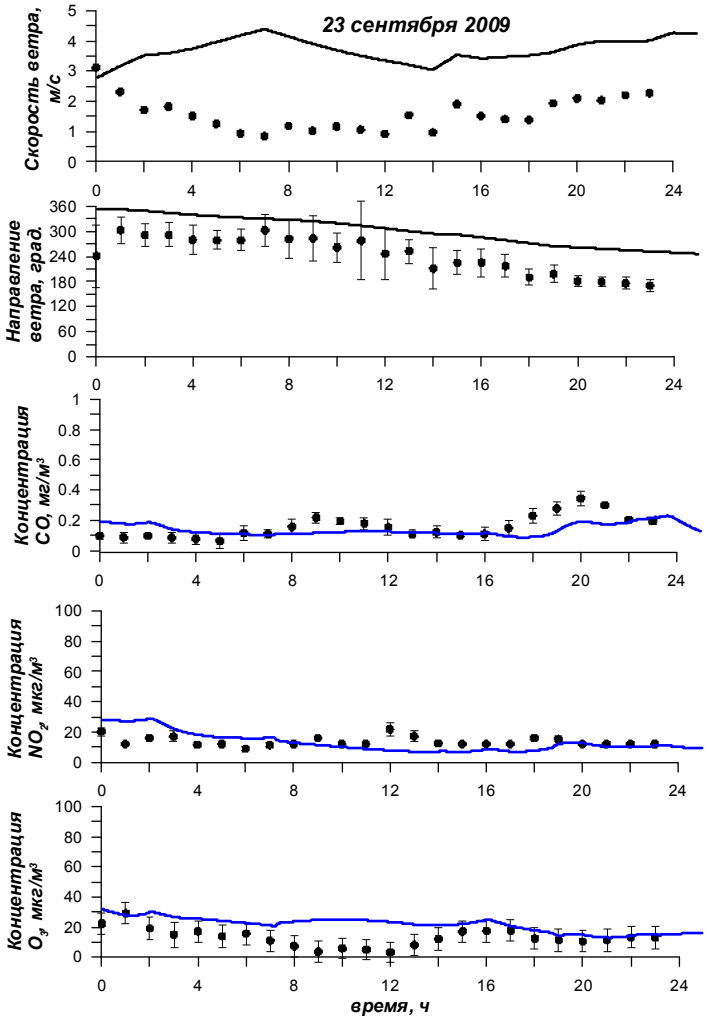

Рис. 3. Сравнение результатов моделирования с данными ТОР-станции 23 сентября 2009 г.

Заключение

Представленная в работе информационно-вычислительная система имеет ряд преимуществ, позволяющих использовать ее в реальных условиях в оперативном режиме. Такая возможность появилась благо-

даря усвоению данных глобального прогноза метеорологических характеристик, а также за счёт параллельной реализации модели переноса примеси при помощи двумерной декомпозиции расчетной области. Ежесуточно информационно-вычислительная система в автоматическом режиме производит получение начальных данных и запуск процесса моделирования на кластере ТГУ СКИФ Cyberia. Полученные результаты представляются в сети Internet в виде полей прогноза распространения в течение суток примеси, наложенных на карту местности.

Литература

1. **Беликов Д.А., Старченко А.В.** Исследование образования вторичных загрязнителей (озона) в атмосфере г. Томска // Оптика атмосферы и океана. – 2005. – Т. 18, №05-06. – С. 435–443.
2. **Толстых М.А., Богословский Н.Н., Шляева А.В., Юрова А.Ю.** Полулагранжева модель атмосферы ПЛАВ // Гидрометцентру России 80 лет. – М.: Триада, 2010. – С. 193–216.
3. **Барт А.А., Беликов Д.А., Старченко А.В.** Математическая модель для прогноза качества воздуха в городе с использованием суперкомпьютеров // Вестник Томского государственного университета. – 2011. – № 3. – С. 15–24.
4. **Noll B.** Evaluation of a bounded high-resolution scheme for combustor flow computations // AIAA Journal. – 1992. – Vol. 30, № 1. – P. 62–68.
5. **Srivastava R.K., McRae D.S., and Odman M.T.** Simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm // J. Geophys. Res. – 2001. – Vol. 106. – P. 24245–24257.
6. **Stockwell W.R., Gotliff W.S.** Comment on «Simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm» by R.K. Srivastava et al. // J. Geophys. Res. – 2002. – Vol. 107. – P. 4643–4650.
7. Межрегиональный супервычислительный центр ТГУ http://skif.tsu.ru
8. Сайт лаборатории климатологии атмосферного состава Института оптики атмосферы СО РАН. – Режим доступа: http://lop.iao.ru/