Параллельные алгоритмы для численного решения обратных задач переноса примеси с использованием данных мобильных измерений

Е.А. Панасенко, А.В. Старченко
Томский государственный университет

Рассматривается параллельная реализация численного решения обратных задач переноса примеси с использованием мобильных измерений. При построении параллельных алгоритмов решения обратной задачи использовались функциональная, геометрическая декомпозиции и их комбинации, которые отличаются простотой реализации и высокой эффективностью, что продемонстрировали тестовые расчеты, проведенные на кластере ТГУ СКИФ Cyberia.

Введение

В современном мире наряду с приборным контролем качества воздуха широко используются методы математического моделирования при анализе распространения примесей. Методы математического моделирования позволяют быстро и с малыми затратами выполнять прогноз распределения загрязнителей в атмосфере. Но сложность процессов распространения примеси делают модели оценки качества воздуха громоздкими и требовательными к вычислительным ресурсам. Перспективным способом решения этих проблем является использование суперкомпьютерной техники, которая обеспечивает существенное ускорение получения результатов расчетов.

Физическая постановка прямой задачи

Распространение примеси в приземном слое атмосферы над промышленным центром и его окрестностями исследуется при следующих условиях. Рассматривается ограниченный в прямоугольнике участок территории, на котором в течение времени исследования происходит выброс от различных источников. Мощность источников зависит от времени. Распределение по области исследования поступающей примеси определяется метеорологическими условиями. Кроме того, сделано предположение, что примесь не вступает в химические реакции с другими веществами и скорость ее переноса совпадает со скоростью движения окружающего воздуха.

Математическая постановка прямой задачи переноса примеси

С учетом принятой физической постановки задачи адвективно-диффузионное уравнение, моделирующее перенос газообразной примеси в заданном потоке, представляется в следующем виде [1]:

$$\frac{\partial C}{\partial t}+U\frac{\partial C}{\partial x}+V\frac{\partial C}{\partial y}+W\frac{\partial C}{\partial z}+\sigma C= \\ =\frac{\partial}{\partial x}\left[\Gamma\frac{\partial C}{\partial x}\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\Gamma\frac{\partial C}{\partial y}\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[K_z\frac{\partial C}{\partial z}\right]+Q, \tag{1}$$

где C – концентрация примеси; U,V,W – компоненты соленоидального вектора скорости атмосферного воздуха; Γ,K_z – коэффициенты турбулентной диффузии; Q – интенсивность поступления примеси от источников; σ – интенсивность влажного осаждения примеси.

Необходимые для моделирования переноса и рассеяния газообразного выброса параметры (U,V,W,Γ,K_z,σ) берутся из анализа данных метеорологических наблюдений или результатов численного моделирования с использованием мезомасштабных теорий различного уровня замыкания [2].

Начальные и граничные условия для уравнения (1) представляются в виде

$$t=0:\ C(0,x,y,z)=C_0(x,y,z); \\ x=0:\frac{\partial C}{\partial x}=0;\ x=L_x:\frac{\partial C}{\partial x}=0; \\ y=0:\frac{\partial C}{\partial y}=0;\ y=L_y:\frac{\partial C}{\partial y}=0; \\ z=0:K_z\frac{\partial C}{\partial z}=\alpha C;\ z=L_z:\frac{\partial C}{\partial z}=0, \tag{2}$$

где α – скорость сухого осаждения примеси.

Физическая постановка обратной задачи переноса примеси

Требуется по известным метеорологическим параметрам атмосферы и результатам измерений концентрации газообразной примеси в N точках, проводимых в течение некоторого периода времени T, определить параметры (мощность, координаты и время срабатывания) источников примеси.

Математическая постановка сопряженной задачи переноса примеси

Получим математическую постановку обратной задачи. Для этого будем использовать метод, который основан на решении уравнения, сопряженного с полуэмпирическим уравнением турбулентной диффузии и двойственным представлением функционала от концентрации примеси [1]. Сопряженная постановка задачи получается с использованием задачи (1) – (2). Для этого уравнение (1) умножается на функции $C_k^* = C_k^*(t,x,y,z)$ и интегрируется по времени и пространству. Тогда используя интегрирование по частям, приходим к сопряженным постановкам:

$$-\frac{\partial C_k^*}{\partial t}-\frac{\partial UC_k^*}{\partial x}-\frac{\partial VC_k^*}{\partial y}-\frac{\partial WC_k^*}{\partial z}+\sigma C_k^*-\frac{\partial}{\partial x}\Gamma\frac{\partial C_k^*}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial y}\Gamma\frac{\partial C_k^*}{\partial y}-$$
$$-\frac{\partial}{\partial z}K_z\frac{\partial C_k^*}{\partial z}=P_k \qquad (3)$$

со следующими начальными и граничными условиями:

$$C_k^*(T,x,y,z)=0;$$
$$x=0: UC_k^*+\Gamma\frac{\partial C_k^*}{\partial x}=0;\ \ x=L_x: UC_k^*+\Gamma\frac{\partial C_k^*}{\partial x}=0;$$
$$y=0: VC_k^*+\Gamma\frac{\partial C_k^*}{\partial y}=0;\ \ y=L_y: VC_k^*+\Gamma\frac{\partial C_k^*}{\partial y}=0; \qquad (4)$$
$$z=0: K_z\frac{\partial C_k^*}{\partial z}=\alpha C_k^*;\qquad z=L_z:\frac{\partial C_k^*}{\partial z}=0,$$

где $P_k=\delta(x-x_k)\delta(y-y_k)\delta(z-z_k)\delta(t-t_k)$, $k=1,...,N$; N – количество измерений концентрации $C(t,x,y,z)$ в точках с координатами (x_k,y_k,z_k) в момент времени t_k.

Двойственное представление функционала можно записать в виде

$$J(C)=\int_0^T\int_0^{L_x}\int_0^{L_y}\int_0^{L_z}CP_k\,dzdydxdt=C_k=\int_0^T\int_0^{L_x}\int_0^{L_y}\int_0^{L_z}C_k^*Q\,dzdydxdt,\ k=1,...,N. \qquad (5)$$

При этом нахождение решения систем уравнений (3) – (4) и (5) позволит установить параметры источников загрязнения атмосферного воздуха.

Численное решение дифференциальных уравнений

Для численной реализации задачи (3) – (4) использовались метод конечного объёма и явные разностные схемы: противопотоковая схема, схема MLU Ван Лира или схема Ботта аппроксимации адвективных членов. Диффузионные слагаемые в уравнениях аппроксимируются со вторым порядком точности.

Параллельная реализация сопряженной задачи

При решении обратной задачи определения характеристик источников на каждом шаге по времени решается не одна, а N независимых сопряженных задач, следовательно, они могут решаться параллельно.

При использовании *функциональной декомпозиции* [3] распараллеливание метода численного решения обратной задачи переноса примеси производится с использованием принципа «master-slave». В этом случае управляющий master-процесс передает каждому slave-процессу значения метеорологических параметров, необходимые для решения сопряженных задач. Подчиненные slave-процессы, получив данные, в свою очередь, ведут расчеты независимо друг от друга, и найденные на каждом шаге по времени приближенные решения своей сопряженной задачи возвращают управляющему процессу, который ищет глобальный минимум функционала, позволяющий определить параметры источников загрязнения.

Также при решении сопряженных задач (3) – (4) использовалась одномерная (вдоль оси OY) *геометрическая декомпозиция* [3] сеточной области. При таком способе декомпозиции каждому процессору выделяется часть области исследования и столб атмосферы над ней. Перед началом вычислений каждый процессор получает информацию о физических параметрах своей подобласти и подготавливается к вычислениям. При этом во время вычислений каждый процессор обменивается с соседними процессорами данными, которые были получены при его выполнении. Обмен происходит вдоль вертикальных границ подобластей (Рис. 1) [4].

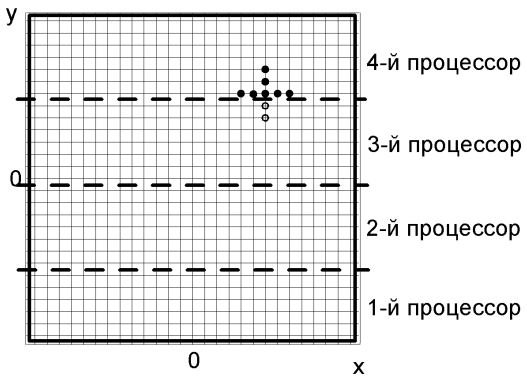

Рис. 1. Одномерная декомпозиция
(четырехпроцессорное вычислительное устройство)

В табл. 1 представлены значения времени выполнения параллельной программы, реализующей функциональную и геометрическую декомпозиции при решении обратной задачи переноса примеси при различном количестве измерений концентрации выброса.

Таблица 1. Время счета, с, для функциональной и геометрической декомпозиции

Количество измерений, *N*	Число процессоров	Время счета (функциональная декомпозиция), с	Время счета (геометрическая декомпозиция), с
5	5	323	627
10	10	337	643
20	20	354	743

Рассмотренные выше подходы создания параллельных версий алгоритмов решения обратной задачи переноса примеси показали неплохие результаты по времени проводимых расчетов, однако количество используемых активных процессоров в них ограничено: в случае функциональной декомпозиции – числом проведенных измерений, а при одномерной геометрической декомпозиции – размером вычислительной сетки и выбранным сеточным шаблоном. Поэтому был предложен *комбинированный метод* распараллеливания [3], в котором предлагается для увеличения в расчетах количества используемых активных процессоров совместить применение функциональной и геометрической декомпозиции. Его применение показало хорошую масштабируемость параллельной программы до 400 процессоров, т.е. обеспечение эффективности не ниже 50% при увеличении числа используемых

процессоров при неизменных остальных параметрах решаемой задачи, что наглядно видно из табл. 2.

Таблица 2. Время счета для комбинированного метода

Количество измерений, N	Время счета (последовательная программа), с	Число процессоров	Время счета (комбинированный метод), с
5	1626	100	33
10	3922	200	42
20	7799	400	59

Определение городских районов – загрязнителей атмосферного воздуха с использованием мобильных измерений

При решении рассматриваемой задачи оценки характера распределения и интенсивности источников загрязнения атмосферного воздуха в качестве входных параметров использовались результаты мобильных измерений монооксида углерода, которые были сделаны сотрудниками Института оптики атмосферы СО РАН при помощи мобильной станции АКВ-2 в г. Томске (Рис. 2). Область исследования имеет площадь размером 50х50 км, в ее центральной части находится городская территория. Верхняя граница расчетной области располагается на высоте 2000 м (Рис. 3).



Рис. 2. Станция АКВ-2

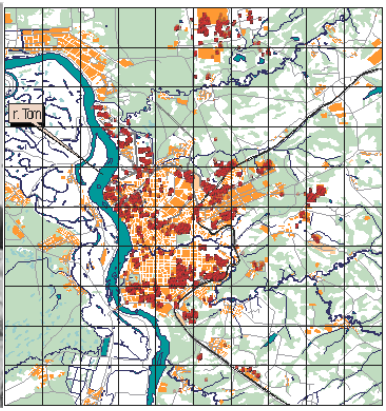

Рис. 3. Область исследования с нанесенной горизонтальной сеткой

Тестирование правильности решения обратной задачи проводилось с использованием результатов численного решения прямой задачи в качестве необходимых входных данных. На рис. 4 представлены изолинии интенсивности выброса примеси $\bar{Q}(x, y)$, полученные при решении обратных задач.

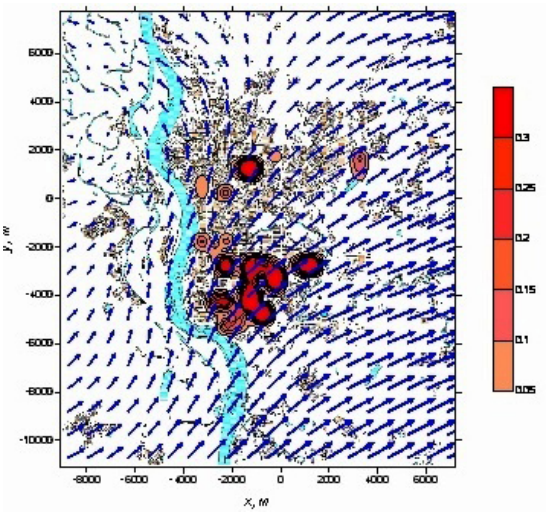

Рис. 4. Результаты решения обратной задачи переноса примеси для определения городских районов-загрязнителей (→ – векторное поле скорости)

В целом предсказанная численно картина соответствует расположению основных городских районов, ответственных за выброс в атмосферу CO. Кроме того, предложенная в работе методика позволяет также достаточно надежно оценить за короткий период времени и интенсивность таких выбросов.

Литература

1. **Марчук Г.И.** Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. – 315 с.
2. **Старченко А.В., Беликов Д.А.** Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха // Оптика атмосферы и океана. – 2003. – №7. – С. 657–665.
3. **Panasenko E.A., Starchenko A.V.** Parallel Algorithms for Solution of Air Pollution Inverse Problems // Second Russia – Taiwan Symposium, MTPP 2010: Revised Selected Papers / C.H. Hsu and V. Malyshkin (Eds.). –Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. – P. 251–259.
4. **Старченко А.В.** Моделирование переноса примеси в однородном пограничном слое // Труды Международной конференции ENVIROMIS2000. – Томск: ЦНТИ, 2001. – С. 77–84.