Параллельная реализация численного метода решения обратных задач переноса примеси

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

Рассматриваются прямые и обратные задачи переноса примеси. При решении обратной задачи на каждом шаге по времени интегрируется N независимых сопряженных уравнений. Такие условия проведения численного исследования позволяют привлекать высокопроизводительную вычислительную технику. При этом используются следующие способы параллельной реализации: геометрическая декомпозиция, функциональная декомпозиция, комбинация функциональной и геометрической декомпозиций.

В настоящее время наряду с приборным контролем качества воздуха широко используются методы математического моделирования при анализе характера распространения газодисперсных загрязнителей атмосферы. Методы математического моделирования позволяют быстро и с малыми затратами выполнять прогноз детальной картины распределения примесей в приземном слое атмосферы. Но сложность и взаимосвязанность процессов распространения и переноса загрязняющих субстанций делают модели оценки и прогнозирования качества воздуха громоздкими в математической записи и весьма требовательными к вычислительным ресурсам. Перспективным способом решения этих проблем является использование суперкомпьютерной техники, которая обеспечивает существенное ускорение получения результатов расчетов.

Физическая постановка прямой задачи переноса примеси

При известном местоположении источника атмосферных загрязнений, расположенного на высоте h, мощностью $Q(t, x, y, z)$ определить значения концентрации примеси в N точках.

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:

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

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

Начальные и граничные условия имеют следующий вид:

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

Физическая постановка обратной задачи переноса примеси

Требуется по известным метеорологическим параметрам атмосферы и результатам измерения концентрации примеси в N точках наблюдения, проводимых в течение некоторого периода времени T, определить координаты и время срабатывания мгновенного точечного источника примеси.

Математическая постановка обратной задачи

В данной работе для решения обратных задач привлекается подход Г.И. Марчука [1]. Математическая постановка обратной задачи переноса примеси включает несколько однотипных сопряженных уравнений и поиск минимума некоторого функционала в процессе решения сопряженных уравнений.

Сопряженная к (1) и (2) задача получается следующим образом: уравнение (1) умножается на некоторые сопряженные функции $C_k^*=C_k^*(t,x,y,z)$ и интегрируется по времени и пространству. Тогда, используя интегрирование по частям, приходим к выражению

$$-\frac{\partial C_k^*}{\partial t}-\frac{\partial UC_k^*}{\partial x}-\frac{\partial VC_k^*}{\partial y}-\frac{\partial WC_k^*}{\partial z}-$$
$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C_k^*}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C_k^*}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial C_k^*}{\partial z}\right)=P_k;k=1,...,N \quad (3)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями

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

где $P_k=\delta(x-x_k)\delta(y-y_k)\delta(z-z_k)\delta(t-t_k)$; N – количество точек наблюдения с координатами (x_k,y_k,z_k); t_k – момент времени измерения концентрации.

В качестве двойственного представления функционала рассматривается следующее выражение [2]:

$$Q_0C_k^*(t_{00},x_{00},y_{00},z_{00})=C_k;\ C_k=C(t_k,x_k,y_k,z_k);\ k=1,...,N. \quad (5)$$

При этом нахождение решения системы уравнений (5) позволяет установить параметры источника загрязнения (координаты (x_{00},y_{00},z_{00}), момент срабатывания источника t_k и интенсивность Q_0).

Численное решение сопряженной задачи

Для численной реализации задачи (3) – (4) использовались метод конечного объёма и явные разностные схемы; для аппроксимации адвективных членов применялась схема MLU Ван Лира [3].

Параллельная реализация сопряженной задачи

При численном решении задач переноса примеси выделяют два основных способа параллельной реализации: распараллеливание по физическим процессам (функциональная декомпозиция) и геометрическая декомпозиция расчетной области [4].

Функциональная декомпозиция

Распараллеливание по физическим процессам метода численного решения обратной задачи переноса примеси производилось с использованием принципа «master-slave». При использовании этого подхода 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 (3) – (4) возвращают управляющему процессу, который ищет глобальный минимум функционала:

$$\sum_{k=1}^{N}\left(Q_0 C_k^*(t,x,y)-C_k\right)^2, Q_0>0. \qquad (6)$$

Рассмотренный выше алгоритм параллельного решения обратной задачи с использованием принципа функциональной декомпозиции можно оценить следующими временными затратами:

$$T_p^{\Phi 1}\approx m\cdot t_{\text{а}}\cdot N_x^2\cdot N_z\cdot M+5\cdot t_{\text{об}}\cdot N_x^2\cdot N_z\cdot M+t_{\text{об}}\cdot M+t_{\text{а}}\cdot(M+3N),\quad N=p-1. \qquad (7)$$

Здесь $t_{\text{а}}$ – время одной арифметической операции; $t_{\text{об}}$ – время на пересылку одного числа по маршруту «master-slave» или обратно; N – количество решаемых сопряженных задач. Первое слагаемое в (7) есть затраты на одновременное решение сопряженных задач, второе – передачу slave-процессам метеорологических полей в каждый момент времени, третье – затраты на передачу рассчитанных значений $Q_0 C_k^*(t,x,y)$ master-процессу, четвертый – расчет master-процессом функционала (6). Заметим, что поскольку размеры вычислительной сетки $N_x^2\cdot N_z$ составляют несколько сотен тысяч узлов, главный вклад в (7) дают первое и второе слагаемые.

Таким образом, для характерных значений определяющих параметров ($m\approx 10\div 100$, $N_x^2\cdot N_z\approx 0.5\div 1\cdot 10^6$, $M\approx 100\div 3000$, $N\approx 5\div 20$):

$$T_p^{\Phi 1}\approx m\cdot t_{\text{а}}\cdot N_x^2\cdot N_z\cdot M+5\cdot t_{\text{об}}\cdot N_x^2\cdot N_z\cdot M/k,\quad (M/k\approx 5\div 50), N=p-1, \qquad (8)$$

где k – частота межпроцессорной передачи метеорологических параметров.

Для случая проведения последовательных расчетов при решении обратной задачи переноса примеси временные затраты с учетом принятой модели оценки представляются следующим образом:

$$T_1 \approx N \cdot m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M + t_{\text{а}} \cdot (M + 3N). \qquad (9)$$

Поскольку второе слагаемое в (9) существенно меньше первого, то для рассматриваемого алгоритма решения обратной задачи переноса примеси на p-процессорной системе получаются следующие оценки ускорения и эффективности:

$$S_p^{\Phi 1} = \frac{T_1}{T_p^{\Phi 1}} \approx \frac{N \cdot m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M + 5t_{\text{об}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M / k} =$$

$$= \frac{p-1}{1+\dfrac{5\chi}{m \cdot k}}, \quad E_p^{\Phi 1} = \frac{S_p}{p} \approx \frac{1-1/p}{1+\dfrac{5\chi}{m \cdot k}}, \quad \chi = t_{\text{об}} / t_{\text{а}} > 1. \qquad (10)$$

Из (10) видно, что при таком способе организации параллельных вычислений не удается достичь идеального параллелизма, поскольку нет хорошей балансировки загрузки используемых в расчетах p-процессов [4. С. 57; 5. С. 135]. Это связано с тем, что master-процесс не участвует в проведении массовых вычислений (не решает отдельную сопряженную задачу).

В качестве другого подхода повышения эффективности данного алгоритма может быть рассмотрен подход, в котором master-процесс также решает одну из N сопряженных задач (3) – (4). В этом случае также можно воспользоваться оценкой (8), однако в рассмотренном случае $N = p$. Тогда

$$S_p^{\Phi 2} \approx \frac{p}{1+\dfrac{5\chi}{m \cdot k}}, \; E_p^{\Phi 2} \approx \frac{1}{1+\dfrac{5\chi}{m \cdot k}}. \qquad (11)$$

В табл. 1 и 2 представлены значения времени выполнения параллельных программ, полученных при численном эксперименте, реализующих два варианта функциональной декомпозиции при решении обратной задачи при различном количестве доступных измерений концентрации выброса $(N = 5,10,20)$.

Из таблиц видно, что первый вариант функциональной декомпозиции алгоритма решения обратной задачи имеет небольшое преимущество во времени выполнения параллельной программы, что обусловлено появлением дополнительных возможностей совмещения работы активных процессов, количество которых для одних и тех же условий на единицу больше, чем во втором варианте.

Таблица 1. Время счета параллельной программы (с) для первого варианта функциональной декомпозиции

Число используемых процессов (master не решает сопряженную задачу)	Время, с
$p = 6\,(N = 5)$	312
$p = 11\,(N = 10)$	316
$p = 21\,(N = 20)$	322

Таблица 2. Время счета параллельной программы (с) для второго варианта функциональной декомпозиции

Число используемых процессов (master решает сопряженную задачу)	Время, с
$p = 5\,(N = 5)$	323
$p = 10\,(N = 10)$	337
$p = 20\,(N = 20)$	354

Однако соотношение эффективности рассматриваемых параллельных программ

$$e^{\Phi} = \frac{E_p^{\Phi 1}}{E_p^{\Phi 2}} = \frac{T_1 / \left(T_p \cdot p\right)^{(\Phi 1)}}{T_1 / \left(T_p \cdot p\right)^{(\Phi 2)}} = \frac{\left(T_p \cdot p\right)^{(\Phi 2)}}{\left(T_p \cdot p\right)^{(\Phi 1)}} < 1$$

говорит в пользу лучшей масштабируемости второго варианта декомпозиции, что, кстати, хорошо согласуется с теоретическими оценками (10), (11), согласно которым $\left(e^{\Phi}\right)_{\text{теор}} \approx \frac{p}{p+1}$ (табл. 3).

Таблица 3. Отношение эффективности параллельных программ e^{Φ} для двух вариантов функциональной декомпозиции

Число измерений концентрации N	$\left(e^{\Phi}\right)_{\text{теор}} \approx \frac{p}{p+1}$	$\left(e^{\Phi}\right)_{\text{эксп}}$
5	0,83	0,86
10	0,91	0,97
20	0,95	1,01

Геометрическая декомпозиция

При решении каждой сопряженной задачи (3) – (4) использовалась одномерная (вдоль оси OY, рис. 1) геометрическая декомпозиция сеточной области. В этом случае вычисления осуществлялись в следующем порядке. N сопряженных задач (3) – (4) последовательно одна за другой решаются численно в подобласти вычислительной сетки, распределенной каждому процессу. Вычисления в течение промежутка времени $[0,T]$ проводятся каждым процессом одновременно, но для корректного расчета сеточных значений функции C^* вблизи гра-

ниц подобласти требуются сеточные значения с соседних по расположению подобластей. Это может быть обеспечено путём межпроцессорной передачи данных с использованием, например, функций блокирующего обмена MPI_SENDRECV стандарта MPI [5].

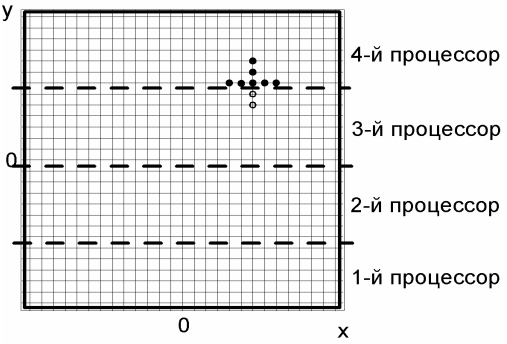


Рис. 1. Расчетная сетка в плоскости xOy с указанием распределения подобластей по четырем процессорам

Аналогично принципу функциональной декомпозиции проведем оценки временных затрат создаваемой параллельной реализации рассматриваемого алгоритма. Для этого запишем:

$$T_p^{\Gamma} \approx \frac{N \cdot m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z^2 \cdot M}{p} + \frac{5 \cdot t_{\text{об}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M / k}{p} + \\ + 4 \cdot N_x \cdot N_z \cdot N \cdot M \cdot t_{\text{об}} + N \cdot M \cdot t_{\text{об}} + t_{\text{а}} \left(M + 3N \right). \qquad (12)$$

Здесь первое слагаемое есть затраты на решение N сопряженных задач в подобласти сеточной области, второе – передачу всем процессам от master-процесса, который также участвует в решении сопряженных задач, метеорологических полей с частотой k шагов, третье – затраты на передачу данных между соседними по расположению подобластей процессами, четвертое и пятое – получение и оценки минимума функционала (6) master-процессом. С учетом характерных для выбранной задачи значений параметров N_x, N_z, M, k, m, N справедливо

$$T_p^{\Gamma} \approx \frac{N \cdot m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{p} + \frac{5 \cdot t_{\text{об}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M / k}{p} + \\ + 4 \cdot N_x \cdot N_z \cdot N \cdot M \cdot t_{\text{об}} \qquad (13)$$

и с учетом оценки временных затрат последовательной программы (9) имеем

$$S_p^{\Gamma} = \frac{T_1}{T_p^{\Gamma}} \approx$$

$$\approx \frac{N \cdot m \cdot t_a \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{\frac{N \cdot m \cdot t_a \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{p} + \frac{5 \cdot t_{об} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M / k}{p} + 4 \cdot N_x \cdot N_z \cdot N \cdot M \cdot t_{об}} =$$

$$= \frac{p}{1 + \chi\left(\frac{5}{Nmk} + \frac{4p}{N_x m}\right)}, \qquad (14)$$

$$E_p^{\Gamma} = \frac{S_p^{\Gamma}}{p} \approx \frac{1}{1 + \frac{\chi}{m}\left(\frac{5}{Nk} + \frac{4p}{N_x}\right)}.$$

Поскольку в полученной оценке эффективности рассматриваемого способа распараллеливания вклад межпроцессорной передачи данных во временные затраты более значительный, стоит ожидать, что применение геометрической декомпозиции менее перспективно, чем использование функциональной декомпозиции.

Проведенный вычислительный эксперимент показал правомерность полученной теоретической оценки (табл. 4).

Таблица 4. Время счета параллельной программы для геометрической декомпозиции

Число используемых процессов	Время, с
$p = 5\,(N = 5)$	627
$p = 10\,(N = 10)$	643
$p = 20\,(N = 20)$	743

Сопоставляя результаты, приведенные в табл. 1, 2, 4, видно, что применение геометрической декомпозиции более чем в два раза уступает по быстродействию функциональной декомпозиции. Причиной этого являются коммуникационные затраты на межпроцессорную передачу данных, необходимую для корректного решения сопряженных задач (3) – (4) на всей сеточной области, разделенной между активными процессами [6].

Комбинированный способ распараллеливания

Рассмотренные выше подходы создания параллельных версий алгоритмов решения обратной задачи переноса примеси показали неплохие результаты по эффективности, однако количество используемых активных процессов в них ограничено: в случае функциональной декомпозиции – числом проведенных измерений N, а при одномерной геометрической декомпозиции – размером сетки N_x и выбранным сеточным шаблоном.

При использовании комбинированного подхода параллельной реализации предлагается для увеличения в расчетах количества используемых активных процессов совместить применение функциональной и геометрической декомпозиций. Все p активных процессов делятся на N групп, каждая из которых решает численно одну сопряженную задачу (3) – (4), используя одномерную геометрическую декомпозицию. Для получения приближенного решения процессы отдельной группы обмениваются между собой рассчитанными значениями сеточной функции вблизи границ подобластей. Поиск минимума функционала (6) выполняет один из p процессов, которому остальные передают результаты промежуточного расчета.

Проведем теоретические предварительные оценки временных затрат такого способа параллельной реализации:

$$\begin{aligned} T_p^{\text{комб}} &\approx \frac{m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{p/N} + \frac{5 \cdot t_{\text{об}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M/k}{p/N} + \\ &+ 4 \cdot N_x \cdot N_z \cdot M \cdot t_{\text{об}} + M \cdot t_{\text{об}} + t_{\text{а}} \left(M + 3N\right) \approx \\ &\approx \frac{N \cdot m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{p} + \frac{5 \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M/k \cdot t_{\text{об}} \cdot N}{p} + \\ &+ 4 N_x \cdot N_z \cdot t_{\text{об}} \cdot M. \end{aligned} \tag{15}$$

Тогда

$$S_p^{\text{комб}} = \frac{T_1}{T_p^{\text{комб}}} \approx$$

$$\approx \frac{N \cdot m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{\frac{N \cdot m \cdot t_{\text{а}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M}{p} + \frac{5 \cdot N \cdot t_{\text{об}} \cdot N_x^2 \cdot N_z \cdot M/k}{p} + 4 \cdot N_x \cdot N_z \cdot M \cdot t_{\text{об}}} = \tag{16}$$

$$= \frac{p}{1+\frac{\chi}{m}\left(\frac{5}{k}+\frac{4p}{N\cdot N_x}\right)},$$

$$E_p^{\text{комб}} = \frac{S_p^{\text{комб}}}{p} \approx \frac{1}{1+\frac{\chi}{m}\left(\frac{5}{k}+\frac{4p}{N\cdot N_x}\right)}, \quad \frac{p}{N} = 1,2,3,\ldots$$

Сравнивая оценки параллельных реализаций (14) и (16), можно отметить, что эффективность комбинированного подхода не хуже, чем при геометрической декомпозиции, но количество используемых активных процессов можно увеличить на порядок, что при имеющей место масштабируемости параллельной версии алгоритма должно привести к значительному сокращению времени счета (рис. 2).

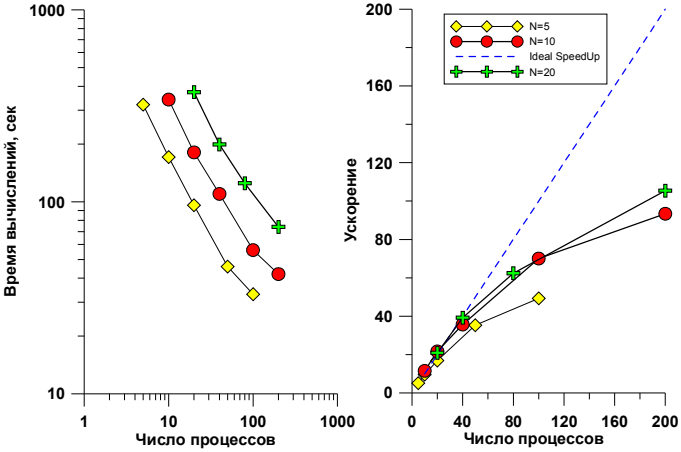


Рис. 2. Время счета (слева) и ускорение (справа) параллельной программы решения обратной задачи переноса примеси (комбинированный способ распараллеливания)

Результаты численных расчетов с использованием комбинированного подхода показывают снижение времени счета с уменьшением вычислительной трудоемкости задачи, замедление ускорения параллельной программы с ростом числа используемых процессов и при сокращении количества сопряженных задач N. Комбинированный подход действительно на порядок позволяет увеличить число используемых процессов, при этом эффективность параллельной программы остается на уровне не менее 50%, что является неплохим для задач такого класса показателем.

Заключение

В работе с единых позиций сформулированы математические постановки для решения обратных задач по определению параметров источника загрязнения атмосферного воздуха. Математические постановки опираются на аппарат сопряженных уравнений и двойственное представление функционала от концентрации примеси. Для ускорения численного решения задачи обоснованы и применены следующие способы параллельной реализации задач переноса примеси: функциональная декомпозиция, геометрическая декомпозиция и комбинированный способ. Проведены оценки ускорения и эффективности всех трех подходов параллельной реализации, которые показали, что в целом функциональная декомпозиция имеет существенное преимущество по сравнению с остальными подходами.

Литература

1. **Марчук Г.И.** Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. 320 с.
2. **Панасенко Е.А.** Определение городских районов-загрязнителей атмосферного воздуха по данным наблюдений / Е.А. Панасенко, А.В. Старченко // Оптика атмосферы и океана. 2009. Т. 22, № 03. С. 279-283.
3. **Van Leer B.** Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme // J. Comput. Phys. 1974. Vol.14. P. 361-370.
4. **Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.** Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. 608 с.
5. **Малышкин В.Э., Корнеев В.Д.** Параллельное программирование мультикомпьютеров. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006. 296 с.
6. **Старченко А.В.** Параллельные вычисления в задачах охраны окружающей среды // Вторая Сибирская школа-семинар по параллельным вычислениям. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2004. С. 17-22.