

Параллельные алгоритмы для трехмерной фотохимической модели переноса примеси в атмосфере*

А.В. Старченко, Е.А. Данилкин, А.А. Семёнова, А.А. Барт

Национальный исследовательский Томский государственный университет

В работе представлена численная схема решения системы конвективно-диффузионно-кинетических уравнений математической модели переноса малых составляющих примеси с учетом их химических взаимодействий в атмосферном пограничном слое. Для аппроксимации конвективных членов предложена новая монотонизированная сплайновая схема высокого порядка точности. Разработаны и протестированы различные подходы распараллеливания вычислительного алгоритма, основанные на двумерной декомпозиции расчетной области с использованием синхронных или асинхронных методов межпроцессорной передачи данных для вычислительных систем с распределенной памятью.

Ключевые слова: перенос примеси в атмосфере, параллельные вычисления, двумерная декомпозиция, численная схема высокого порядка точности

1. Введение

Методы математического моделирования являются эффективным средством мониторинга и прогноза загрязнения атмосферного воздуха в региональном и городском масштабах в условиях постоянного роста уровня эмиссии антропогенных примесей в атмосферу за счет развития промышленности, тепло- и электроэнергетики и беспрецедентного увеличения количества автотранспортных средств.

С переходом от эмпирико-статического анализа качества приземного воздуха и связанного с ним использования моделей гауссовского типа к разработке теории атмосферной диффузии [1] произошел качественный скачок в методологии оценки состояния загрязнения атмосферы. Описание распространения примеси при помощи уравнения турбулентной диффузии обладает большей универсальностью, поскольку позволяет исследовать рассеяние примеси от источников различного типа, учитывать осаждение, химические реакции и другие процессы при изменяющихся погодных условиях за счет использования метеорологических параметров, рассчитываемых мезомасштабными метеорологическими моделями [2].

Необходимость подробного моделирования протекания сложных атмосферных процессов в региональных масштабах требует значительных вычислительных затрат. При этом со временем эти затраты будут возрастать, поскольку развитие моделей подобного класса идет по пути повышения пространственного разрешения и включения в математическую модель более широкого спектра атмосферных явлений [3].

При численной реализации моделей атмосферного пограничного слоя и переноса примеси важную роль играет выбор качественной, с минимальным влиянием схемной вязкости разностной схемы для аппроксимации конвективного члена уравнения. В данной работе привлекается построенная на локальных весовых сплайнах монотонизированная схема повышенного порядка точности, показывающая преимущество по сравнению с использованием широко известных для решения задач переноса схем MUSCL, ENO, SUPERBEE [4–6].

Целью данного исследования является разработка построенной на локальных весовых сплайнах разностной схемы для аппроксимации конвективных членов уравнения переноса, развитие и апробация параллельных алгоритмов, основанных на двумерной декомпозиции сеточной области, для численного решения уравнений пространственной прогностической модели переноса примеси с учетом химических реакций.

* Работа выполнена при поддержке Госзадания МОН РФ, № 6.528.2014/К.

2. Прогностическая пространственная модель переноса примеси с учетом химических и фотохимических реакций

Для расчета концентрации компонентов примеси с учетом химических взаимодействий между ними применяется эйлерова модель турбулентной диффузии, включающая транспортные уравнения с описанием адвекции, турбулентной диффузии и химических реакций [7]:

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

Здесь C_i , c_i – осредненная и пульсационная составляющие концентрации i -ой компоненты примеси; U , V , u , v – осредненные и пульсационные составляющие вектора горизонтальной скорости ветра; W , w – осредненная и пульсационная составляющие вертикальной компоненты скорости примеси; $\langle \rangle$ – обозначает 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, T – период моделирования. Расчетная область представляет параллелепипед, L_x , L_y – горизонтальные размеры области, h – высота, $-L_x/2 \leq x \leq L_x/2$, $-L_y/2 \leq y \leq L_y/2$, $0 \leq z \leq h$, $0 \leq t \leq T$.

Уравнения (1) незамкнуты, т.к. в них кроме концентрации C_i , которую необходимо определить, присутствуют дополнительные неизвестные – корреляции $\langle c_i u \rangle$, $\langle c_i v \rangle$, $\langle c_i w \rangle$, моделирующие турбулентную диффузию примеси. В данной работе для их определения используются замыкающие соотношения, которые получаются в рамках равновесного приближения для дифференциальных уравнений переноса турбулентных потоков массы в условиях локальной однородности атмосферного пограничного слоя [7]:

$$\begin{aligned} \langle c_i u \rangle &= -\frac{\tau}{C_{10}} \left((1 - C_{20}) \langle c_i w \rangle \frac{\partial U}{\partial z} + \langle u^2 \rangle \frac{\partial C_i}{\partial x} + \langle vu \rangle \frac{\partial C_i}{\partial y} + \langle wu \rangle \frac{\partial C_i}{\partial z} \right); \\ \langle c_i v \rangle &= -\frac{\tau}{C_{10}} \left((1 - C_{20}) \langle c_i w \rangle \frac{\partial V}{\partial z} + \langle uv \rangle \frac{\partial C_i}{\partial x} + \langle v^2 \rangle \frac{\partial C_i}{\partial y} + \langle wv \rangle \frac{\partial C_i}{\partial z} \right); \\ \langle c_i w \rangle &= -\frac{\tau}{C_{10} + D_{1C} F} \left(-(1 - C_{30}) \frac{g}{\Theta} \langle c_i \theta \rangle + \langle uw \rangle \frac{\partial C_i}{\partial x} + \langle vw \rangle \frac{\partial C_i}{\partial y} + \langle w^2 \rangle \frac{\partial C_i}{\partial z} \right); \\ \langle c_i \theta \rangle &= -\tau \frac{c_x}{2} \left(\langle c_i w \rangle \frac{\partial \Theta}{\partial z} + \langle \theta u \rangle \frac{\partial C}{\partial x} + \langle \theta v \rangle \frac{\partial C}{\partial y} + \langle \theta w \rangle \frac{\partial C}{\partial z} \right). \end{aligned}$$

Здесь τ – временной масштаб турбулентных пульсаций, g – ускорение свободного падения, C_{10} , C_{20} , C_{30} , D_{1C} , c_x – эмпирические константы, F – функция, определяющая влияние поверхности на турбулентную структуру течения, Θ , θ – осредненная и пульсационная составляющие потенциальной температуры: $\Theta = T(P_0/P)^{\frac{R}{c_p}}$, P – давление, P_0 – давление на поверхности, c_p – удельная теплоемкость воздуха при постоянном давлении, T – абсолютная температура, R – газовая постоянная.

Неизвестными в системе являются напряжения Рейнольдса $\langle uv \rangle$, $\langle uw \rangle$, $\langle vw \rangle$, турбулентные тепловые потоки $\langle u\theta \rangle$, $\langle v\theta \rangle$, $\langle w\theta \rangle$. Для задания этих корреляций используются соотношения, приведенные в работе [8].

В настоящее время в модель адаптирована сокращенная фотохимическая схема DMI [9].

3. Начальные и граничные условия. Осаждение и эмиссия

На нижней границе ставятся граничные условия, описывающие сухое осаждение компонент примеси в виде простой модели сопротивления [10], и поступление примеси от наземных источников S_i^g :

$$-\langle c_i w \rangle = Vd_i C_i - S_i^g, \quad i = 1, \dots, n_s;$$

$$Vd_i = \frac{1}{r_a + r_b + r_c}; \quad r_a = \frac{\Psi(z/z_0, z/L)}{\kappa v_*}; \quad r_b = \frac{2(Sc_i/0,72)^{\frac{2}{3}}}{\kappa v_*};$$

$$\Psi(z/z_0, z/L) = \begin{cases} \ln(z/z_0) - 2 \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 9z/L}}{1 + \sqrt{1 - 9z_0/L}} \right), & z/L \leq 0; \\ \ln(z/z_0) + 6,34 \left(\frac{z}{L} - \frac{z_0}{L} \right), & z/L > 0. \end{cases}$$

Здесь Vd_i – скорость сухого осаждения i -той компоненты примеси, r_a – аэродинамическое сопротивление турбулентной атмосферы элементам топографии поверхности, r_b – сопротивление ламинарного подслоя элементам шероховатости поверхности, r_c – сопротивление, обусловленное растительностью, z_0 – высота шероховатости, L – масштаб Обухова, Sc_i – число Шмидта для i -той компоненты примеси, $\kappa=0,41$ – постоянная фон Кармана, v_* – динамическая скорость.

На верхней границе для концентраций C_i ставятся простые градиентные условия:

$$\frac{\partial C_i}{\partial z} = 0, \quad i = 1, n_s.$$

На боковых границах расчетной области используются условия «радиационного» типа, способствующие выходу возмущений, сгенерировавшихся в области (погрешность метода и округления), за её пределы без отражения. Они формулируются следующим образом (индекс i опущен):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_{ph} \frac{\partial C}{\partial n} = \frac{\partial C_0}{\partial t} + V_{ph} \frac{\partial C_0}{\partial n},$$

где C – концентрация, C_0 – фоновая концентрация примеси, n – нормаль к поверхности, V_{ph} – фазовая скорость.

Начальные условия распределения концентрации примеси в атмосфере соответствуют своим фоновым значениям, а содержание компонент примеси в атмосфере через некоторый период моделирования (несколько десятков часов предварительного моделирования) близко к реальным условиям. Фоновые значения компонент концентрации примеси рассчитываются отдельно при отсутствии антропогенных источников.

Расчет полей метеорологических характеристик атмосферного пограничного слоя осуществляется при помощи мезомасштабной метеорологической модели [11].

4. Численный метод расчета

При представлении численного метода ограничимся рассмотрением одномерного случая для нестационарного уравнения конвекции-диффузии ($u = \text{const}$, $D = \text{const} > 0$):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + S_\Phi, \quad 0 < x < X, 0 < t \leq T. \quad (2)$$

Начальное условие: $t = 0, \Phi(0, x) = \Phi_{00}(x)$.

Граничные условия: $x = 0, \Phi(t, 0) = \Phi_0(t); x = X, \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0$.

Для области $0 \leq x \leq X$ построим сетку (рис. 1) с непересекающимися конечными объемами, равномерную по времени, и по пространству:

$$\bar{\omega}_{h,\tau} = \{(t^n, x_m), t^n = \tau \cdot n, x_m = h \cdot m + h/2, n = 0, N, m = 0, M-1, h = X/M, \tau = T/N\}.$$

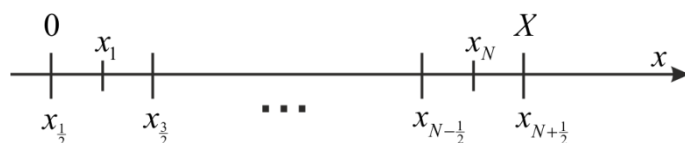


Рис. 1 Равномерная сетка по оси Ox .

$x_{m+1/2}$, $m = \overline{0, M}$ – положение граней конечного объема; x_m , $m = \overline{1, M}$ – положение узлов в конечном объеме. Обозначим сеточную функцию как $\Phi_m^n \approx \Phi(t^n, x_m)$.

Далее в соответствии со вторым шагом метода конечного объема проинтегрируем все члены уравнения (2) по m -му конечному объему на интервале времени $[t^n, t^{n+1}]$. При вычислении интегралов будем пользоваться интерполяционными формулами, а для вычисления производных – конечно-разностными. Тогда можно будет получить явную разностную схему следующего вида:

$$\frac{\Phi_m^{n+1} - \Phi_m^n}{\tau} + u \frac{\Phi_{m+1/2}^n - \Phi_{m-1/2}^n}{h} = \Gamma \frac{\Phi_{m+1}^n - 2\Phi_m^n + \Phi_{m-1}^n}{h^2} + S_\Phi.$$

В итоге каждый член уравнения (2) выражается через дискретные значения Φ в некоторых соседних узловых точках, кроме конвективного члена уравнения, в котором используются значения зависимой переменной на гранях конечного объема. Для определения таких значений через значения сеточной функции в узлах сетки используются схемы различного порядка точности. Наиболее популярными являются противопотоковая и центрально-разностная схемы [12]. Однако первая обладает значительной схемной вязкостью, а вторая является немонотонной. Поэтому для численного описания процессов с преобладающей конвекцией преимущество отдают монотонизированным схемам высокого порядка точности [4-6, 13], каждая из которых имеет свои достоинства и недостатки.

В данной работе предлагается новая монотонизированная схема повышенного порядка точности (до четвертого на участках монотонного изменения сеточной функции) для аппроксимации конвективного члена рассматриваемого типа уравнения. Эта схема строится с использованием локальных весовых кубических сплайнов, обладающих хорошей способностью воспроизводить монотонное распределение зависимой переменной на новом шаге по времени.

Рассмотрим построение локального весового кубического интерполяционного сплайна, построенного через «наклоны».

Вводим локальную сетку: $\bar{\omega}_h = \{x_{j-1}; x_j; x_{j+1}; x_{j+2}\}$ на отрезке $[0, X]$. Обозначим h – расстояние между узлами сетки. На каждом элементарном отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ введем полином третьей степени $S_i(x)$, коэффициенты которого надо определить. Запишем для удобства $S_i(x)$ в виде:

$$S_i(x) = a_{i0} + a_{i1}(x - x_i) + a_{i2}(x - x_i)^2 + a_{i3}(x - x_i)^3, x \in [x_i, x_{i+1}], i = j - 1, j, j + 1;$$

$$S_i(x_i) = \Phi_i, i = j - 1, j, j + 1, j + 2;$$

$$S'_i(x_i) = S'_{i-1}(x_i), i = j, j + 1;$$

$$w_{i-1} S''_{i-1}(x_i) = w_i S''_i(x_i), i = j, j + 1.$$

Так как построение (определение коэффициентов) весового кубического сплайна планируется через «наклоны» ($S'_i(x_i) = m_i, S'_i(x_{i+1}) = m_{i+1}, i = j - 1, j, j + 1$), то для единственного решения поставленной задачи необходимо поставить дополнительные условия на границах:

$$m_{j-1} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_{j-1}; m_{j+2} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_{j+2}.$$

Для определения коэффициентов сплайна воспользуемся условиями непрерывности первой производной, условиями интерполяции и условиями $w_{i-1} S''_{i-1}(x_i) = w_i S''_i(x_i), i = j, j + 1$. В итоге получаем систему:

$$\begin{cases} m_{j-1} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_{j-1}, \\ \frac{w_{i-1}}{h} m_{i-1} + 2 \left(\frac{w_{i-1}}{h} + \frac{w_i}{h} \right) m_i + \frac{w_i}{h} m_{i+1} = 3 \left(\frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{h^2} w_{i-1} + \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{h^2} w_i \right), i = j, j + 1; \\ m_{j+2} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)_{j+2}. \end{cases}$$

Производные в этой системе аппроксимируются с помощью конечных разностей второго порядка аппроксимации. Эта система имеет строгое диагональное преобладание, что обеспечивает существование и единственность весового кубического сплайна.

Далее получаем формулу для построения сплайнов через «наклоны»:

$$S_i(x) = \frac{m_{i+1} + m_i}{h^2} (x - x_i)^3 - 2 \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{h^3} (x - x_i)^3 + 3 \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{h^2} (x - x_i)^2 - \frac{2m_i + m_{i+1}}{h} (x - x_i)^2 + m_i (x - x_i) + \Phi_i.$$

Веса w_i можно задавать различными способами. Для того, чтобы сплайн без осцилляций интерполировал монотонные данные, можно воспользоваться следующей теоремой Б.И. Касова [14].

Теорема 1. Пусть весовой кубический сплайн $S \in C^1[a, b]$ с краевыми условиями $S'(x_0) = f'_0$ и $S'(x_{n+1}) = f'_{n+1}$, интерполирует монотонные данные $\{f_i\}, i = \overline{0, n+1}$. Если выполняются неравенства:

$$0 \leq f'_0 \leq 3f[x_0, x_1], \quad 0 \leq f'_{n+1} \leq 3f[x_N, x_{N+1}], \quad \frac{w_{i-1}}{w_i} \frac{h_i}{h_{i-1}} \geq \frac{f[x_i, x_{i+1}]}{f[x_{i-1}, x_i]} - 2, \\ \frac{w_i}{w_{i-1}} \frac{h_{i-1}}{h_i} \geq \frac{f[x_{i-1}, x_i]}{f[x_i, x_{i+1}]} - 2, \text{ то } S'(x) \geq 0 \text{ для всех } x \in [a, b], \text{ т.е. сплайн } S \text{ монотонен на } [a, b].$$

Для монотонно убывающих данных был сформулирован аналог этой теоремы.

Тогда при расчете весовых коэффициентов можно следовать такому алгоритму [14]: Пусть параметр w_{i-1} задан. Полагаем $w_i = w_{i-1}$. Проверяем неравенства из той теоремы, которой собираемся пользоваться. Если какое-то условие нарушается, то выражаем из него w_i , заменяя знак неравенства на знак равенства. Алгоритм начинаем с $w_0 = 1$ и далее находим все параметры $\{w_i\}$, обеспечивающие монотонность весового кубического сплайна для произвольных монотонных данных. Если на некотором шаге $w_i < \varepsilon$, ($w_i > \frac{1}{\varepsilon}$), то полагаем $w_i = \varepsilon$, ($w_i = \frac{1}{\varepsilon}$), где ε - достаточно малое положительное число, позволяющее предотвратить зануление (переполнение).

Вернемся к построению разностной схемы. Рассмотрим способ аппроксимации значения $\Phi_{m+1/2}^n$ в конвективном слагаемом, основанный на полученном локальном весовом кубическом сплайне:

$$\Phi_{m+1/2}^n = S_m(x_{m+1/2}).$$

Сам алгоритм построения этого сплайна позволяет монотонно приближать монотонные данные, если же данные не были монотонными – возникает проблема монотонности. Для предотвращения этой проблемы к сплайну дополнительно применяется ограничитель [15].

В этом случае сплайн-аппроксимация была реализована в следующем виде:

$$\Phi_{m+1/2}^n = \begin{cases} \Phi_m^n + \frac{1}{2} \cdot \max[0, \min(2\Theta, \Psi, 2)] \cdot (\Phi_{m+1}^n - \Phi_m^n), & u > 0 \\ \Phi_{m+1}^n - \frac{1}{2} \cdot \max[0, \min(2\hat{\Theta}, \hat{\Psi}, 2)] \cdot (\Phi_{m+1}^n - \Phi_m^n), & u \leq 0 \end{cases}$$

где

$$\Theta = \frac{\Phi_m^n - \Phi_{m-1}^n}{\Phi_{m+1}^n - \Phi_m^n}, \quad \Psi = \frac{S_m(x_{m+1/2}) - \Phi_m^n}{0,5(\Phi_{m+1}^n - \Phi_m^n)}, \\ \hat{\Theta} = \frac{\Phi_{m+2}^n - \Phi_{m+1}^n}{\Phi_{m+1}^n - \Phi_m^n}, \quad \hat{\Psi} = \frac{\Phi_{m+1}^n - S_m(x_{m+1/2})}{0,5(\Phi_{m+1}^n - \Phi_m^n)}.$$

Для доказательства работоспособности построенной схемы рассмотрим задачу (2) при $S_\Phi(t, x) = 0, X = 2$ и отсутствии диффузии со следующими начальными условиями

$$\Phi_{00}(x) = \begin{cases} 1, & x \in (0, 75; 1, 25) \\ 0, & x \notin (0, 75; 1, 25) \end{cases}$$

Точное решение для данной задачи записывается в следующем виде: $\Phi_*(t, x) = \Phi_{00}(x - ut)$.

Расчеты для этой задачи проводились при следующих условиях: $M = 100$, $u = 1$, $D = 0$, $h = 0,02$, $\tau = 0,005$, $T = 52\tau$.

Задача решалась и другими перечисленными ранее [4-6] методами. Значения норм погрешностей представлены в таблице 1.

Таблица 1. Сравнение точности методов

| | Метод | $\max_{m=0, M} \Phi_m^N - \Phi_*(T, x_m) $ | $\frac{\sqrt{\sum_{m=1, \dots, M} \Phi_m^N - \Phi_*(T, x_m) ^2}}{M}$ |
|---|---------------|---|---|
| 1 | Upwind | 0,44374 | 0,01129 |
| 2 | MLU | 0,44284 | 0,01122 |
| 3 | MUSCL | 0,27333 | 0,00513 |
| 4 | ENO | 0,31731 | 0,00618 |
| 5 | Сплайн | 0,21682 | 0,00401 |
| 6 | Схема Хартена | 0,36789 | 0,00810 |
| 7 | SuperBee | 0,32330 | 0,00607 |

На основании этих данных можно сделать вывод, что применение сплайн-функции имеет преимущество перед остальными схемами.

5. Распараллеливание численного алгоритма

Расчетная область представляет собой параллелепипед (часть приземного слоя атмосферы Земли) размером $50 \times 50 \times 2$ км, выбранный таким образом, что его квадратное основание содержит участок подстилающей поверхности с крупным населенным пунктом в центре. В расчете учитывается эмиссия примеси от площадных источников, находящихся на поверхности. Область покрывается вычислительной сеткой с размерами: $N_x \times N_y \times N_z = 100 \times 100 \times 30$ узлов. Период прогностического моделирования обычно составляет 48 часов. Шаг по времени $\Delta t_c = 6$ сек для вычисления химических преобразований и $\Delta t = 60$ сек для конвективно-диффузионных процессов. Поля метеорологических характеристик, необходимые для проведения расчета, подготавливаются до начала расчета полей концентраций с использованием мезомасштабной модели [11].

Основным направлением использования данной модели является краткосрочный прогноз качества атмосферного воздуха над урбанизированной территорией, поэтому важно обеспечить наименьшее время вычислений на компьютере. Однако, в настоящее время, имеющиеся рабочие станции и серверы с многоядерной архитектурой не способны обеспечить требуемого быстродействия при использовании обыкновенной последовательной версии программы. Однако широко распространенные в наши дни системы с параллельной архитектурой, в особенности кластеры, делают возможным эффективно сократить время вычислений за счет распараллеливания алгоритма.

При параллельной реализации алгоритма очень важно выбрать оптимальный способ распределения нагрузки между процессорами, который определяется особенностями самого алгоритма, архитектурой вычислительной системы, количеством доступных для расчета процессоров, а также соображениями физического и вычислительного характера. Рассмотрим особенно-

сти разработки параллельных программ, а также оценим ускорение и эффективность при двумерной декомпозиции сеточной области. Схема расчетной области представлена на рис. 2.

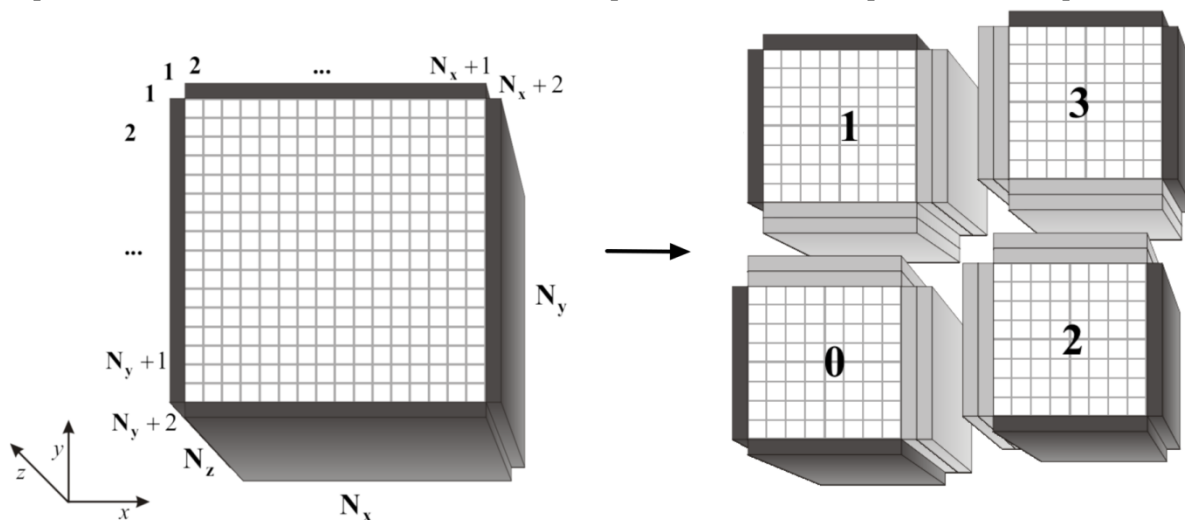


Рис. 2. Схема расчетной области и двумерной декомпозиции при параллельной реализации явно- неявного метода на примере четырех процессоров ($p = 4, p_x = 2, p_y = 2$).

Непосредственно область расчета ($2 \leq i_x \leq N_x+1$) \times ($2 \leq i_y \leq N_y+1$) окаймлена по периметру двумя рядами фиктивных ячеек вследствие используемого расчетного шаблона и для обеспечения второго или более высокого порядка аппроксимации.

6. Особенности реализации двумерной декомпозиции

Двумерная декомпозиция предполагает лучшую масштабируемость задачи, решаемой конечно-разностными или конечно-элементными методами на многопроцессорных вычислительных системах, поскольку такой подход позволяет задействовать большее число процессоров. Так, при некотором ограничении на ширину обрабатываемой сеточной области при двумерном разбиении можно использовать p^2 параллельных процессоров.

Реализация двумерной декомпозиции с использованием библиотеки MPI [16] существенно отличается от реализации одномерной. Во-первых, необходимо организовать двумерную топологию одновременно выполняемых процессов. В данной работе был выбран вариант с организацией декартовой топологии. После инициализации MPI и определения числа задействованных процессоров вызывается процедура `MPI_Dims_Create`, подбирающая оптимальные параметры $p_x \times p_y = p$, для двумерной декомпозиции, используя которые процедура `MPI_Cart_Create` создает декартову топологию с перенумерацией процессов (p_x и p_y – число одномерных разбиения, выполненных независимо вдоль координатных направлений Ox и Oy).

Далее вызовы процедур `MPI_Comm_Rank` и `MPI_Cart_Shift` позволяют определить новый номер процесса и новые номера соседних процессоров уже в декартовой топологии. Вместе с этим вычисляются размеры подобластей для каждого процесса. Такой подход позволяет организовать вычисления на любом четном числе процессоров, но для сбалансированного распределения нагрузки рекомендуется выбирать значение для p , удовлетворяющее условию $p_x = p_y = \sqrt{p}$.

Во-вторых, в двумерной декомпозиции более сложной является реализация межпроцессорных обменов. Если в одномерном случае всегда можно выбрать направление декомпозиции таким образом, что элементы трехмерного массива концентрации вдоль границы будут располагаться в памяти последовательно друг за другом, что, несомненно, будет удобным для формирования пересылаемого сообщения, то при двумерной декомпозиции добиться этого для всех направлений, по которым проводится декомпозиция, не представляется возможным. Поэтому для организации обменов при помощи процедуры `MPI_Type_Hvector` создаются новые типы данных – трехмерные массивы, представляющие собой сечения подобласти, выполненные плоскостями $X = \text{const}$ и $Y = \text{const}$ (`g_vector` и `h_vector` (рис. 2)), с размерами $(N_z, 1, N_y / p_y)$ и

$(N_z, N_x / p_x, 1)$, соответственно. Пересылка данных между процессорами осуществляется такими блоками при помощи неблокирующих операций обмена MPI_ISEND, MPI_IRECV.

В третьих, при двумерной декомпозиции непросто осуществить сбор решения на одном процессорном элементе. Для сбора решения на одном процессорном элементе, например, перед выдачей в файл процессы формируют одномерные массивы данных и пересылают процессорному элементу с номером «0», который собирает полученные данные и вновь их переписывает в соответствующем порядке в трехмерный массив.

7. Ускорение и эффективность

В работе экспериментально исследовалось ускорение параллельного алгоритма по отношению к последовательному и его эффективность. С этой целью была проведена серия расчетов на кластере ТГУ Cyberia при следующих условиях: период моделирования 1 час, вычислительная сетка $100 \times 100 \times 30$ узлов, кинетическая схема химических и фотохимических реакций DM1 [9]. Для обеспечения сбалансированной нагрузки и достижения тем самым наилучшей производительности расчеты проводились с использованием такого числа процессов, чтобы количество узлов сетки расчетной области, обрабатываемых каждым процессорным элементом, было одинаковым.

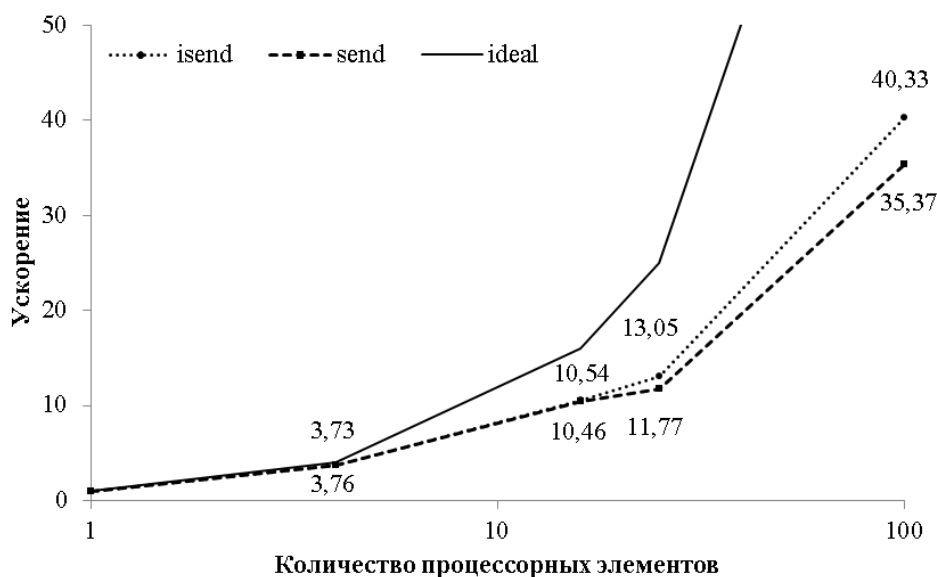


Рис. 3. Ускорение параллельной программы, полученное для различных вариантов декомпозиции расчетной области

Использовались 1, 4, 16, 25 и 100 процессоров вычислительного кластера. Графики достигнутого ускорения представлены на рис. 3, где сравнивается два варианта передачи пакетов данных между процессами:

- конфигурация 1: двумерная декомпозиция, синхронные обмены (send/recv);
- конфигурация 2: двумерная декомпозиция, асинхронные обмены, опережающая рассылка (isend/irecv).

При использовании небольшого числа процессов (до шестнадцати) использование опережающей рассылки не дает решающего преимущества, однако ситуация меняется при увеличении числа используемых процессоров. При использовании шестнадцати и более процессоров происходит увеличение числа межпроцессорных обменов, что приводит к увеличению времени простоя процессоров в ожидании завершения передачи сообщения при использовании блокирующихся операций. Эффективность конфигурации №1 снижается, что особенно отчетливо видно на фоне высокой производительности программы с асинхронными операциями (конфигурация №2) (рис. 3).

Таким образом, результаты расчетов показали, что при использовании более 16 процессов применение технологии опережающей рассылки позволяет повысить эффективность работы параллельной программы на 8-12 % по сравнению с использованием блокирующих процедур обмена сообщениями, что является весьма внушительным показателем при проведении большего объема вычислений.

8. Численный эксперимент

Решалась следующая задача: на поверхности Земли в районе города в одной ячейке сетки рассматриваемой области происходит постоянное выделение примеси. Горизонтальные размеры области исследования - 50×50 км. По пространству сетка имеет по сто узлов в каждом горизонтальном направлении и 30 уровней в высоту. Также в расчетах используется поле ветра на двое суток, предсказанное с помощью мезомасштабной модели [11].

В центре области расположен участок, из которого с интенсивностью 10^4 мг/с выделяется газообразная примесь. Требуется спрогнозировать изменение концентрации на имеющемся поле ветра на последующее время. Для решения этой задачи рассматривались три метода аппроксимации конвективных членов уравнений переноса: MLU, MUSCL [5,14] и предлагаемая сплайн-интерполяция. Ниже представлены рисунки распространения концентрации примеси и поля ветров на случай 29 часов и 41 час физического времени после начала моделирования.

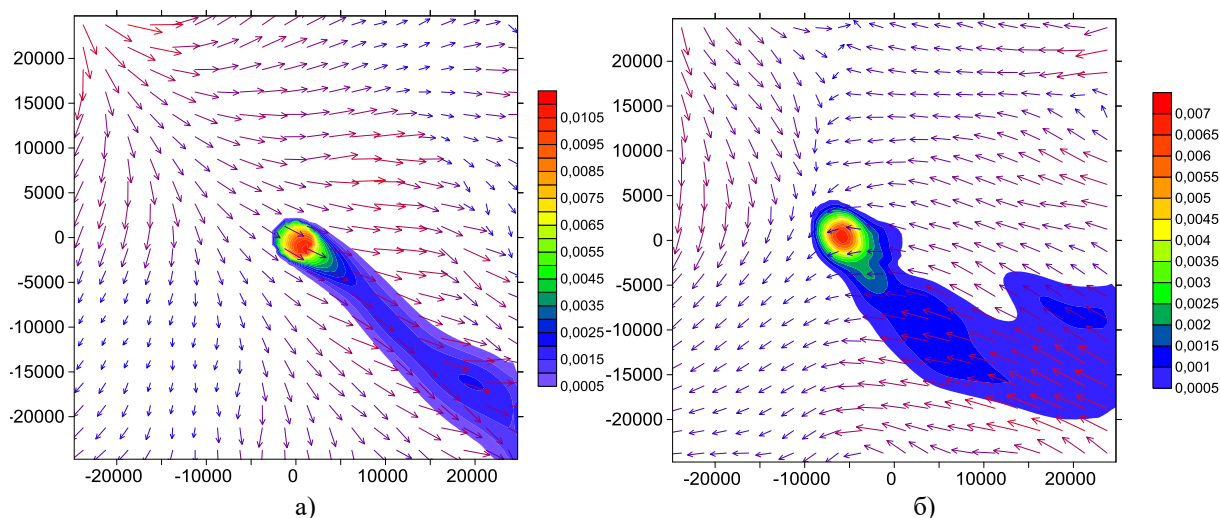


Рис. 4. Приземные концентрации примеси и поле ветра а) после 29 часов моделирования и б) после 41 часа моделирования.

Из анализа направлений полей ветров, изображенных на рис. 4, видно, что в первом случае (а) приземный ветер имеет северо-западное направление, а это и есть ситуация, приводящая к возникновению значительной схемной диффузии, поскольку ветер направлен под углом 45 градусов к линиям сетки [12]. Второй случай (б) также представляет интерес, поскольку в этот момент времени происходит перестройка приземного поля ветра с «возвращением» переносимой примеси назад к источнику.

На рис. 5 и рис. 6 для указанных выше моментов времени представлены распределения концентрации примеси в случае применения схем MLU [4] и MUSCL [14], в также сплайновой схемы. Сравнение результатов можно провести по размерам локальных максимумов концентраций в правом нижнем углу рисунков. Схемы MLU и MUSCL показывают близкие результаты. Результаты применения сплайновой схемы дают больший размер области с повышенной концентрацией примеси. Другими словами, в соответствии с рис. 5 в данной области над большей частью территории приземная концентрация примеси имеет значение $0,002$ мг/м³, а при применении двух других схем предсказывается значение концентрации $0,0015$ мг/м³. Это говорит о том, что сплайновая схема точнее прогнозирует уровень концентрации и меньше сглаживает численное решение. Аналогичные выводы можно сделать и из анализа рис. 6.

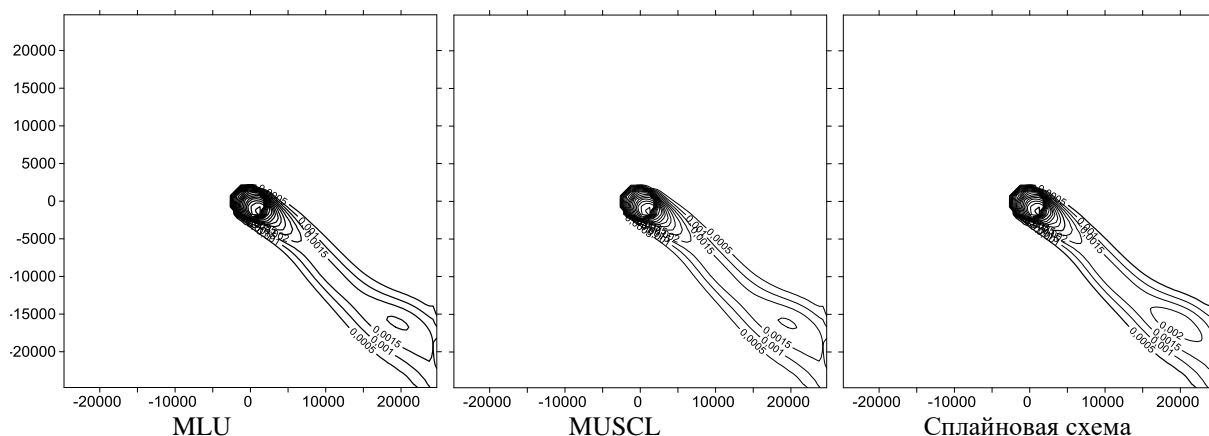


Рис. 5. Распространение концентрации примеси после 29 часов моделирования.

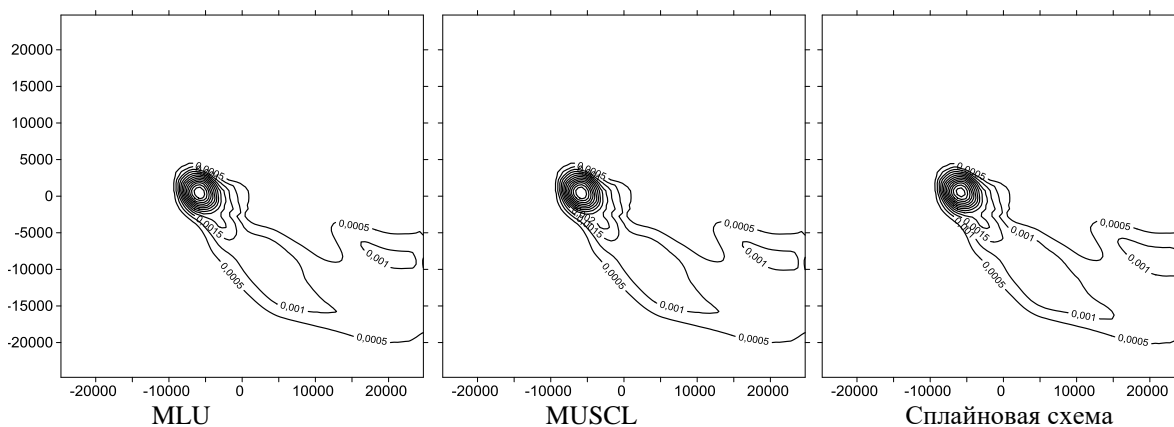


Рис. 6. Распространение концентрации примеси после 41 часа моделирования.

На основании проведенных расчетов можно заключить, что построенная сплайновая схема для аппроксимации конвективных членов уравнения переноса менее подвержена влиянию схемной диффузии, что позволяет на одной и той же сетке точнее предсказывать локальные максимумы в численном решении задач переноса примеси в атмосфере.

9. Заключение

Представлена численная схема решения системы конвективно-диффузионно-кинетических уравнений математической модели переноса малых составляющих примеси с учетом их химических взаимодействий в атмосферном пограничном слое. Для аппроксимации конвективных членов предложена новая монотонизированная сплайновая схема высокого порядка точности. Показано ее преимущество перед используемыми при решении подобных задач монотонизированными схемами второго или третьего порядка аппроксимации. Разработаны и протестированы различные подходы распараллеливания вычислительного алгоритма, основанные на двумерной декомпозиции расчетной области с использованием синхронных или асинхронных методов межпроцессорной передачи данных для вычислительных систем с распределенной памятью. Показана целесообразность применения опережающей рассылки вычисленных приграничных значений сеточной функции с помощью асинхронной передачи данных для повышения ускорения расчетов.

Литература

1. Берлянд М.Е. Прогноз и регулирование загрязнений атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1985. 272 с.
2. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 256 с.

3. Dabdub D., Seinfeld J.H. Parallel Computation in Atmospheric Chemical Modeling // Parallel Computing. 1996. V. 22. P. 111-130.
4. van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // Journal of Computational Physics, 1979. Vol. 32, No. 1. P. 101-136.
5. Harten A., Engquist B., Osher S., Chakravarthy S. R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III // Journal of Computational Physics, 1987. Vol. 71, No. 2. P. 231-303.
6. Ривин Г.С., Воронина П.В. Перенос аэрозоля в атмосфере: выбор конечно-разностной схемы. // Оптика атмосферы и океана. 1997. Т. 10. № 06. С. 623-633.
7. 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.
8. Старченко А.В. Моделирование переноса примеси в однородном атмо-сферном пограничном слое // Труды Международной конференции ENVIROMIS-2000 (Томск, Россия, 24-28 Октября 2010). Томск: Изд-во Томского ЦНТИ, 2000. С. 77-82.
9. Барт А.А., Старченко А.В., Фазлиев А.З. Информационно-вычислительная система для краткосрочного прогноза качества воздуха над территорией г. Томска. // Оптика атмосферы и океана. 2012. Т. 25. № 07. С. 594-601.
10. Hurley P. J. The Air Pollution Model (TAPM) Version 2. part 1: technical description / CSIRO Atmospheric Research Technical Paper, 2002. N. 55. URL: <https://publications.csiro.au/rpr/pub?pid=procite:771ac014-e093-4638-bde3-d53a787c681a> (accessed: 27.07.2016).
11. Starchenko A.V., Bart A.A., Bogoslovskiy N.N., Danilkin E.A., Terenteva M.V. Mathematical modelling of atmospheric processes above an industrial centre. Proc. SPIE 9292, 20th International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, (November 25, 2014), 2014. P. 929249/1-9.
12. Патанкар С. В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / С. Патанкар; Пер. с англ. под ред. В. Д. Виленского. М. : Энергоатомиздат, 1984. 149 с.
13. van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection // Journal of Computational Physics, 1977. Vol. 23, No. 3. P. 276-299.
14. Квасов Б. И. Методы изогометрической аппроксимации сплайнами. М. : ФИЗМАТЛИТ, 2006. 360 с.
15. Čada M., Torrilhon M. Compact third-order limiter functions for finite volume methods // Journal of Computational Physics, 2009. Vol. 228, No. 11. P. 4118-4145.
16. Старченко А.В., Данилкин Е.А., Лаева В.И., Проханов С.А. Практикум по методам параллельных вычислений. М.: Изд-во МГУ, 2010. 200 с.

Parallel algorithms for a three-dimensional photochemical air pollution model

A.V. Starchenko, E.A. Danilkin, A.A. Semenova, A.A. Bart

National Research Tomsk State University

The paper presents a numerical scheme for solving the system of advection-diffusion-kinetic equations of the mathematical model that describes transfer of small components in the atmospheric boundary layer considering their chemical interaction. A new high-order monotonic spline scheme was proposed for approximation of the advection terms. Various approaches to parallelizing computational algorithms for multiprocessor systems with distributed memory were developed and tested. Methods proposed are based on two-dimensional computational domain decomposition and synchronous or asynchronous interprocessor data exchange.

Keywords: air pollution, parallel computations, high-order numerical scheme

References

1. Berlyand M.E. Prognoz i regulirovaniye zagryazneniy atmosfery [Forecast and control of air pollution]. Leningrad, Gidrometeoizdat, 1985. 272 P.
2. Penenko V.V., Aloyan A.E. Modeli i metody dlya zadach okhrany okruzhayushchey sredy [Models and methods concerning environmental protection problems]. Novosibirsk, Nauka, 1985. 256 P.
3. Dabdub D., Seinfeld J.H. Parallel Computation in Atmospheric Chemical Modeling // Parallel Computing. 1996. V. 22. P. 111-130.
4. van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // Journal of Computational Physics, 1979. Vol. 32, No. 1. P. 101-136.
5. Harten A., Engquist B., Osher S., Chakravarthy S. R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III // Journal of Computational Physics, 1987. Vol. 71, No. 2. P. 231-303.
6. Rivin G.S., Voronina P.V. Aerosol transfer in the atmosphere: selection of a finite difference scheme. // Atmospheric and oceanic optics. 1997. V. 10. No. 06. P. 386-392.
7. Belikov D.A., Starchenko A.V. Investigation of formation of secondary pollutant (ozone) in the atmosphere of Tomsk // Atmospheric and oceanic optics. 2005. V. 18. No. 05-06. P. 391-398.
8. Starchenko A.V. Modeling of pollution transport in the atmospheric boundary layer above uniform surface. Proceedings of International Conference "ENVIROMIS-2000" (Tomsk, Russia, October 24-28, 2000), 2000. P 77-82.
9. Bart A.A., Starchenko A.V., Fazliev A.Z. Information-computational system for air quality short-range prognosis over territory of Tomsk. // Optika Atmosfery i Okeana. 2012. V. 25. No. 07. P. 594-601.
10. Hurley P. J. The Air Pollution Model (TAPM) Version 2. part 1: technical description / CSIRO Atmospheric Research Technical Paper, 2002. N. 55. URL: <https://publications.csiro.au/rpr/pub?pid=procite:771ac014-e093-4638-bde3-d53a787c681a> (accessed: 27.07.2016).
11. Starchenko A.V., Bart A.A., Bogoslovskiy N.N., Danilkin E.A., Terenteva M.V. Mathematical modelling of atmospheric processes above an industrial centre. Proc. SPIE 9292, 20th International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, (November 25, 2014), 2014. P. 929249/1-9.
12. Patankar S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 197 P.
13. van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection // Journal of Computational Physics, 1977. Vol. 23, No. 3. P. 276-299.

14. Kvasov B. I. *Metody izogeometricheskoy approksimatsii splaynami* [Methods shape preserving approximations by splines]. Moscow, FIZMATLIT, 2006. 360 P.
15. Čada M., Torrilhon M. Compact third-order limiter functions for finite volume methods // *Journal of Computational Physics*, 2009. Vol. 228, No. 11. P. 4118-4145.
16. Starchenko A.V., Danilkin E.A. , Laeva V.I., Prokhanov S.A. *Praktikum po metodam parallel'nykh vychisleniy* [Practical Course on Parallel Computing Techniques]. Moscow, Moscow University Press, 2010. 200P.