

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ С ЦЕЛЬЮ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЧРЕЗВЫЧАЙНЫХ СИТУАЦИЙ

Е.А. Панасенко, А.В. Старченко

В настоящее время проблема охраны окружающей среды становится одной из важных задач науки, интерес к которой стимулируется всевозрастающими темпами технического прогресса во всех странах мира [1]. На данном этапе развития цивилизации невозможно избежать выбросов загрязняющих веществ в атмосферу, однако в случае разумного использования природных ресурсов, контроля уровня загрязнения можно обеспечить безопасный уровень воздействия на атмосферу [2,3].

В последнее время предпринимаются различные по масштабу проекты по мониторингу окружающей среды и оперативному оповещению населения. Т.к. последние исследования европейских ученых показали, что большинство людей не удовлетворено уровнем и качеством предоставляемых данных о состоянии окружающей среды. Следует заметить, что источники вредных выбросов могут находиться не только в мегаполисах, но и в небольших городах, занятых наукоемким производством, таких, например, как город Северск Томской области. Атомная станция представляет собой не столько прямую угрозу ввиду несовершенства оборудования, сколько угрозу возникновения чрезвычайной ситуации, связанной с человеческим фактором. Именно поэтому необходима система, позволяющая избежать человеческие ошибки, поскольку в данном случае последствия подобной ошибки могут быть катастрофическими. Ярким примером может служить авария 6 апреля 1993 года, когда в результате взрыва произошел выброс облака радиоактивных частиц [4].

В такой ситуации наличие постоянно работающей системы мониторинга состояния окружающей среды позволило бы в кратчайшие сроки спрогнозировать расположение участков радиоактивного загрязнения. Поэтому в последнее время огромное внимание уделяется математическому моделированию атмосферных процессов [4], разработаны математические модели, описывающие перенос и диффузию примесей. В рамках этих моделей описание распространения аэрозольных и газовых атмосферных примесей обычно представляется двумя классами задач. Первый - это решение «прямых» задач, когда по известным характеристикам источников примеси требуется найти поле её концентрации. Второй - решение «обратных» задач, когда по информации о концентрации примеси, измеренной в ряде контрольных точек, требуется найти тип, координаты и мощность её источников [5].

Для решения этих задач разработано огромное количество численных методов, кроме того, для реализации задач переноса примеси привлечена высокопроизводительная техника. Так, на сегодняшний день кластерные системы постепенно вытесняют остальные суперкомпьютеры из-за своей относительной дешевизны и легкости наращивания мощности. Огромное количество численных методов было адаптировано для использования на многопроцессорных вычислительных системах [4].

Целью данной работы является построение параллельных алгоритмов решения обратных задач охраны окружающей среды методом Г.И. Марчука [1], опирающимся на использование сопряженных уравнений переноса и диффузии субстанции.

ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ

При известном местоположении источника атмосферных загрязнений мощностью Q определить значения концентрации примеси в N точках.

При этом рассматривается область $L_x \times L_y \times L_z$. Источник примеси расположен в точке с координатами $(x_0, y_0, z_0) \in L_x \times L_y \times L_z$. Концентрация поступающей примеси рассчитывается в прямоугольной области при различной ориентации направления движения сносящего потока (рисунок 1).

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ

С учетом физической постановки задачи, уравнение «конвекции-диффузии», представляющее перенос примеси в заданном потоке представляется в следующей форме [6]:

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

где C - концентрация примеси;

U, V, W - компоненты соленоидального вектора скорости потока;

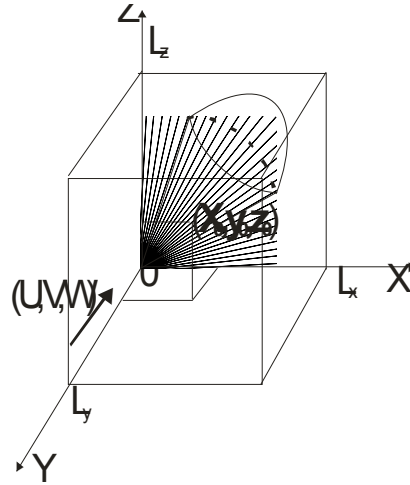


Рисунок 1 - Направление ветра

Γ, K_z - коэффициенты турбулентной диффузии;

Q - источниковый член; $Q = Q_0 \delta(t - t_0) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0)$;

Q_0 - количество выброшенного вещества (мощность источника);

t_0, x_0, y_0, z_0 - время и координаты выброса соответственно.

Пусть начальные и граничные условия для уравнения (1) имеют следующий вид:

$t = 0: C(t, x, y, z) = C_0(x, y, z)$;

$x = 0: \frac{\partial C}{\partial x} = 0; x = L_x: \frac{\partial C}{\partial x} = 0;$

$y = 0: \frac{\partial C}{\partial y} = 0; y = L_y: \frac{\partial C}{\partial y} = 0;$ (2)

$z = 0: \frac{\partial C}{\partial z} = 0; z = L_z: \frac{\partial C}{\partial z} = 0.$

ФИЗИЧЕСКИЕ ПОСТАНОВКИ НЕКОТОРЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ

По известным метеорологическим параметрам и измерениям концентрации примеси в N точках определить мощность, координаты и время срабатывания мгновенного точечного источника примеси (рисунок 2).

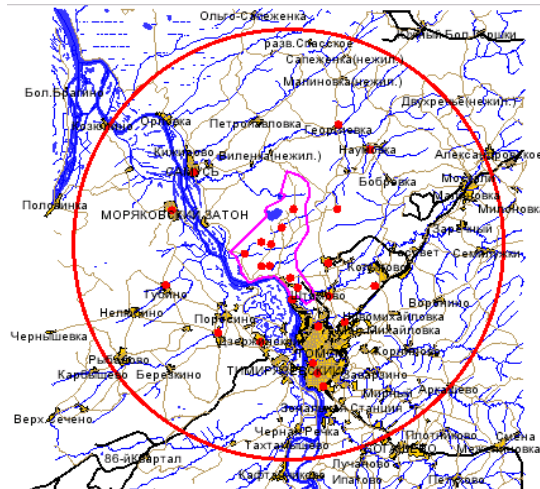


Рисунок 2 - Размещение постов наблюдения (●) в 30-ти км зоне Сибирского химического комбината

Такая задача актуальна при обработке данных автоматизированной системы контроля радиационной обстановки вблизи источников повышенной опасности.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ТРЕХМЕРНОЙ СОПРЯЖЕННОЙ ЗАДАЧИ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ

Чтобы записать математическую постановку обратной задачи, используем метод, который основан на решении уравнения, сопряженного с полуэмпирическим уравнением турбулентной диффузии, и двойственным представлением функционала от концентрации примеси [7].

Сопряженная постановка задачи получается с использованием (1) и (2). Для этого уравнение (1) умножается на некоторую функцию $C^*(t, x, y, z)$ и интегрируется по времени и пространству.

Проводя некоторые математические преобразования и используя интегрирование по частям, можем предположить, что C^* удовлетворяет уравнениям:

$$-\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial UC^*}{\partial x} - \frac{\partial VC^*}{\partial y} - \frac{\partial WC^*}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial C^*}{\partial z} = P_k; k = 1, \dots, N; \quad (3)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} C^*(T, x, y, z) = 0; \quad x = 0: UC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} = 0; \quad x = L_x: UC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} = 0; \\ y = 0: VC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} = 0; \quad y = L_y: VC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} = 0; \quad (4) \\ z = 0: \frac{\partial C^*}{\partial z} = 0; \quad z = L_z: \frac{\partial C^*}{\partial z} = 0, \end{aligned}$$

где $P_k = \delta(x - x_k) \delta(y - y_k) \delta(z - z_k) \delta(t - t_k)$, $k = 1, \dots, N$; $\delta()$ - дельта-функция; N - количество измерений концентрации $C(t, x, y, z)$ в точках с координатами (x_k, y_k, z_k) в момент времени t_k . Здесь предполагаем, что $t_k \gg 0$ настолько, что справедливым является допущение

$$C^*(0, x, y, z) = 0. \quad (5)$$

С учетом (3)-(5) получаем

$$\int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} CP_k dz dy dx dt = \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C_k^* Q dz dy dx dt; \quad k = 1, \dots, N \quad \text{или с учетом вида функций } P_k \text{ и } Q:$$

$$C_k = Q_0 C_k^*(t_0, x_0, y_0, z_0), \quad k = 1, \dots, N, \quad (6)$$

где C_k^* - решение k -ой сопряженной задачи (3)-(4) с правой частью P_k , $C_k = C(t_k, x_k, y_k, z_k)$ - измеренные значения концентрации.

Соотношение (6) можно рассматривать как уравнения относительно неизвестных Q_0, t_0, x_0, y_0, z_0 , причем решение k -ой сопряженной задачи (3)-(4) $C_k^*(t, x, y, z)$ зачастую может быть найдено только численно. Поэтому для нахождения параметров источника Q_0, t_0, x_0, y_0, z_0 был построен следующий функционал

$$\phi(R, x, y, z, t) = \sum_{k=1}^N (RC_k^*(t, x, y, z) - C_k)^2, \quad (7)$$

$$R > 0, 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z, 0 < t < T,$$

глобальный минимум которого достигается при $R = Q_0, x = x_0, y = y_0, z = z_0, t = t_0$. Проверку глобального минимума $\phi(R, x, y, z, t)$ необходимо проводить на каждом шаге по времени по всей расчетной области при одновременном численном решении N сопряженных задач (3)-(4) с различными правыми частями.

Для сокращения числа независимых переменных, по которым ведется поиск минимума, пользуясь необходимым условием экстремума функции нескольких переменных, из (7) можно выразить Q_0 :

$$Q_0 = \frac{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t_0, x_0, y_0, z_0) \cdot C_k)}{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t_0, x_0, y_0, z_0))^2} \quad (8)$$

Тогда после подстановки (8) в (7) потребуется искать глобальный минимум следующего функционала:

$$\phi_1(x, y, z, t) = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t, x, y, z) \cdot C_j)}{\sum_{j=1}^N (C_j^*(t, x, y, z))^2} C_k^*(t, x, y, z) - C_k \right)^2.$$

Нахождение глобального в $(0, T) \times [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ минимума $\phi_1(x, y, z, t)$ позволит установить координаты и момент срабатывания мгновенного источника, а по формуле (8) определить его интенсивность.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СОПРЯЖЕННОЙ ЗАДАЧИ

Для численного решения задачи (3)-(4) использовались метод конечного объема и явные разностные схемы. Для аппроксимации адвективных членов применялась схема MLU Ван Лира, которая незначительно уступает по точности при решении задач подобного класса схеме четвертого порядка Ботта [7].

Тестирование правильности решения обратной задачи (определения координат, времени срабатывания и интенсивности источника) проводилось с использованием результатов численного решения прямой задачи для получения необходимых входных данных по концентрации примеси.

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Следует обратить внимание на то, что при решении обратной задачи на каждом шаге по времени решается не одна, а N независимых сопряженных задач переноса типа (3)-(4), следовательно, они могут решаться параллельно.

Такие условия проведения численного моделирования заставляют привлекать высокопроизводительную вычислительную технику, в частности, вычислительный кластер ТГУ СКИФ Cyberia, на котором установлена библиотека передачи сообщений MPI (Message Passing Interface).

Распараллеливание метода численного решения обратной задачи производилось с использованием принципа «master-slave» (рисунок 3). При такой реализации управляющий процесс (master) передает каждому slave-процессу значения $(U, V, \Gamma, x_i, y_i, t_i)$, необходимые для расчетов, а подчиненные процессы (slave), получив исходные данные, в свою очередь, ведут расчеты независимо друг от друга, и найденные решения своей сопряженной задачи

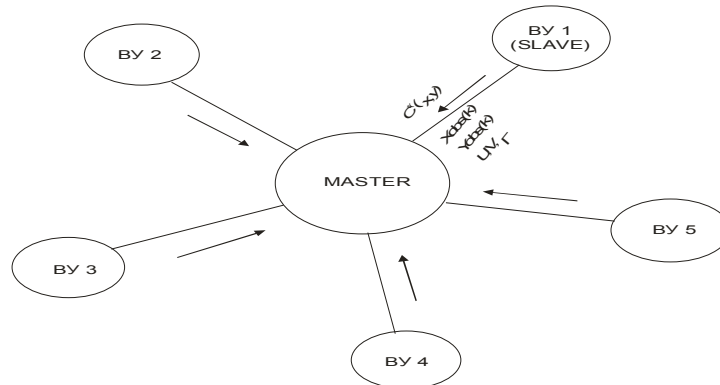


Рисунок 3 – Схема параллельной реализации

возвращают управляющему процессу, который проводит вычисления значений $\phi_1(x, y, t)$ и ищет глобальный минимум этого функционала в $(0, T) \times [0, L_x] \times [0, L_y]$.

Кроме того, в работе определялось ускорение параллельного расчета. При выполнении параллельной программы на 5 процессорах вычислительного кластера СКИФ Cyberia при указанных выше параметрах и при условии, что мастер только подсчитывает суммы для $\phi_1(x, y, t)$ и ищет его минимум, удастся получить ускорение вычислений почти в 4 раза.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе сформулирована постановка обратной задачи через аппарат сопряженных уравнений переноса и диффузии и двойственное представление функционала от концентраций примеси. Разработаны методы численного решения обратных задач, в которых по известным значениям измеренной концентрации примеси определяется месторасположение, время и мощность мгновенного выброса примеси. Разработана параллельная реализация численного решения обратных задач. Описанные в работе подходы можно применять и для реальных обратных задач, например для определения расположения и интенсивности источников загрязнения атмосферного воздуха в г.Томске.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 07-05-01126 и научно-технической программы «СКИФ-ГРИД».

ЛИТЕРАТУРА:

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды – М.:Наука, 1982.-315с.
2. Монин А.С., Обухов А.М. Основные закономерности турбулентного перемешивания в приземном слое атмосферы // Труды Геофизического института АН СССР, 1954, №24, с. 163–187.
3. Fenger J. Urban Air Quality // Atmospheric Environment 1999, vol. 33, pp. 4877-4900.
4. Вражнов Д.А., Старченко А.В. Использование схем ENO высокого порядка при расчете движения газодисперсного облака на многопроцессорной вычислительной технике//
5. Берлянд М.Я. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы.-Ленинград:Гидрометеоиздат,1985.- 270с.
6. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. – 320с.
7. Панасенко Е.А., Численное исследование переноса примеси в атмосфере // Третья всероссийская конференция молодых ученых. Фундаментальные проблемы новых технологий в 3_м тысячелетии, 2006, с.582 – 586