

# РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В ПРИЗЕМНОМ СЛОЕ ВОЗДУХА НА МНОГОПРОЦЕССОРНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКЕ

А.В. Старченко

Проблема математического моделирования динамики атмосферы давно привлекает внимание ученых. Это вызвано тем, что исследование процессов, происходящих в атмосфере, тесно связано с решением задач теории климата и прогноза, имеющих большое практическое значение. В последние годы интерес к ней возрос в связи с проблемой взаимодействия человечества с окружающей средой. Учитывая сложность постановки натуральных экспериментов в реальных условиях, наиболее естественный подход к изучению и оценке влияния деятельности людей на атмосферу состоит в создании математических моделей, позволяющих с помощью ЭВМ оценить возмущения основных параметров, характеризующих состояние среды.

Модели атмосферного пограничного слоя и переноса примеси в силу сложности рассматриваемых процессов и значительных размеров области исследования требуют максимально возможных вычислительных ресурсов. При этом, даже при наблюдаемом нами стремительном развитии вычислительной техники (и суперкомпьютеров, в частности) ученые всё ещё значительно ограничены в своих исследованиях вследствие нехватки вычислительных ресурсов. Современные тенденции в развитии моделей атмосферного пограничного слоя направлены на повышение пространственного разрешения, включения в рассмотрение параметризации более широкого спектра атмосферных явлений. В новейших моделях переноса примеси принято учитывать химические и фотохимические реакции между загрязнителями.

Эффективным способом сокращения времени расчета является применение вычислительных систем с параллельной архитектурой. При моделировании атмосферных процессов можно выделить два основных способа параллельной реализации алгоритмов: функциональная декомпозиция задачи и геометрическая декомпозиция расчетной области. В первом случае параллельно численно решаются нестационарные уравнения, возможно, неоднородные на различных вычислительных узлах. При таком подходе распараллеливания неизбежно возникает проблема балансировки, то есть обеспечения равномерного распределения вычислительной нагрузки между параллельными процессами. Более универсальным является подход, опирающийся на декомпозицию расчетной области. При этом область исследования разделяется на подобласти, число которых равно числу процессов, ведущих расчеты независимо друг от друга.

В данной работе представлены параллельные алгоритмы численного решения прямых и обратных задач исследования качества атмосферного воздуха. Прямые задачи рассматривают изменение с течением времени концентраций компонентов и могут состоять из системы нестационарных адвективно-диффузионно-кинетических уравнений большой размерности, которые связаны между собой источниковыми членами, описывающими протекание химических и фотохимических реакций. Обратные задачи, предназначенные для определения параметров источников выбросов примеси в атмосферу по данным измерений, при применении подхода, опирающегося на использование сопряженных уравнений и двойственное представление функционала от концентрации примеси, в окончательном виде также записываются в виде системы неоднородных нестационарных уравнений с источниковыми членами. Количество таких уравнений совпадает с количеством дискретных измерений концентрации примеси, количество которых может быть также велико.

В данной работе для решения таких систем уравнений на конечно-разностных сетках с количеством узлов несколько миллионов применяется метод конечного объема и явные разностные схемы высокого порядка аппроксимации (до третьего по времени и до шестого порядка по координатным направлениям). Параллельная реализация выполняется по одному из трех рассмотренных способов: 1) функциональная декомпозиция – когда отдельное уравнение системы решается во всей вычислительной области на отдельном вычислительном узле; 2) геометрическая декомпозиция – когда все уравнения системы одно за другим решаются для подобласти (части области исследования) на отдельном вычислительном узле; 3) их комбинация – когда отдельное уравнение системы решается для подобласти на отдельном вычислительном узле.

Сравнительный анализ рассмотренных параллельных реализаций был проведен как с помощью теоретических оценок их масштабируемости, так и с помощью вычислительных экспериментов на кластере ТГУ СКИФ Siberia. Получено, что при решении систем уравнений переноса небольшой размерности второй и третий способы имеют преимущество за счет уменьшения затрат на межпроцессорную пересылку данных. При решении систем, в которых количество уравнений измеряется несколькими десятками, более предпочтительным будет подход функциональной декомпозиции задачи.

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