

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ НАНОДИАГНОСТИКИ ПРИРОДНОЙ И ТЕХНОГЕННОЙ СРЕДЫ МЕТОДАМИ АЭРОКОСМИЧЕСКОГО ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

Т.А. Сушкевич, С.А. Стрелков, В.В. Козодеров, А.Н. Андрианов, А.Н. Волкович, А.Б. Гаврилович, Е.В. Дмитриев, К.Н. Ефимкин, Е.А. Житницкий, Л.Д. Краснокутская, А.К. Куликов, С.В. Максакова, С.Д. Устюгов, Б.А. Фомин, В.П. Шари

С 1989 года коллектив проводит работы по проблемам распараллеливания вычислений при решении больших задач в атмосферно-оптических космических исследованиях, в аэрокосмическом дистанционном зондировании (Remote sensing), в проблемах климата, прогноза, радиационного баланса Земли и т.д., связанных с математическим моделированием переноса излучения в природных и искусственных средах и радиационного поля Земли в широком диапазоне спектра длин волн от ультрафиолета (УФ) до миллиметровых волн (ММВ). Однако впервые параллельные вычисления были реализованы в 1966 году [1] на ЭВМ БЭСМ-6 путем специального разбиения разностной сетки на непересекающиеся подобласти и использования времени обмена с магнитными лентами. Накоплен огромный опыт по проблемам переносимости, адаптации, наследования программного обеспечения при освоении различных многопроцессорных вычислительных систем кластерного типа и суперкомпьютеров. По-прежнему имеет место проблема соблюдения международных стандартов и универсальности операционного обеспечения и компиляторов Fortran. В мировой практике космической отрасли предпочтение отдается Fortran, чтобы обеспечить преемственность не только специального тематического программного обеспечения, но и масштабных баз данных как характеристик параметров атмосферы, земной поверхности, океана, так и архивов радиационных характеристик.

Новые перспективные возможности математического моделирования атмосферной радиации Земли связаны с разработкой универсальной информационно-математической системы для широкой области приложений на суперкомпьютерах и кластерах с распараллеливанием вычислений и распределением ресурсов. Не случайно в центре НАСА (США) и в центре по исследованию климата Японии ещё в 2004 году запустили самые мощные (по тем временам) параллельные компьютеры с более чем 100 тысяч процессоров. Необходимо отметить, что сложные большие трудоемкие многомерные задачи пока что использовались для выполнения стратегических космических проектов.

Гигантский научно-технический прогресс и беспрецедентный рост влияния человека на природу в XX веке в 70-е - 90-е годы привели ученых всего мира, занимающихся анализом нарастающих антропогенных и естественно-природных воздействий на окружающую среду, к выводу: решение задач объективного контроля и прогнозирования качества окружающей среды возможно лишь при создании единой международной системы мониторинга на основе эффективных средств сбора и переработки информации.

Важный шаг - разработка глобальных Геоинформационных Мониторинговых Систем (ГИМС) нового поколения с нарастающей ролью математического аппарата и информационных технологий, отражающих междисциплинарные исследования с многоцелевыми информационно-измерительными функциями и различного рода информацией (ретроспективной, текущей, прогнозной, рекомендательной), включают две части:

- система сбора информации (спутники, плавающие и летающие лаборатории, наземные станции);
- Центры обработки информации.

Ключевые вопросы ГИМС:

- Информационно-наблюдательная система EOS (Earth Observing System) как техническое воплощение ГИМС, причем преобладает космическая система наблюдений (в частности, из-за космических данных двойного назначения), наземные наблюдения используются для выборочной верификации;
- Информационные технологии и математическое моделирование (прямые и обратные задачи) как инструменты обработки аэрокосмической и наземной информации и вскрытия внутренних связей в природе, заменяя многие исследования on-site на эксперимент с моделью!

Принципиальная новизна современного космического земледования:

- От отдельных космических аппаратов и отдельных космических экспериментов переход к международной космической системе и мониторингу;
- Глобальные модели процессов и комплексные исследования наиболее представительных депрессионных регионов (Бразилия, Юго-Восток, Африка, Ростов-на-Дону, Кубань);
- Международное сотрудничество;
- Прием космических данных с зарубежных и международных космических аппаратов.

Международные междисциплинарные исследования системы "Природа-Общество" проводятся в рамках международных программ

1. International Human Dimensions Programme on Global Environmental Change (IHDP);
2. The World Climate Research Programme (WCRP);
3. Surface Ocean Lower Atmosphere Study (SOLAS);
4. Global Water Experiment (GEWEX);
5. Global Analysis, Integration and Modelling (GAIM);
6. Earth Models of Intermediate Complexity (EMIC) - глобальная модель взаимодействия атмосферы, геосферы, наземной биоты, океанов и человеческого общества.

Проект NEESPI - это Инициатива партнерства в области наук о Земле в Северной Евразии - по инициативе Национальной администрации космонавтики и авиации США (NASA) и Российской академии наук совместно с Агентством Росавиакосмоса:

1. ключевые научные вопросы и координация исследований состояния и динамики наземных экосистем в Северной Евразии и их взаимодействия с биосферой, атмосферой, гидросферой и климатической системой Земли для совершенствования научных представлений и развития прогностических возможностей с целью обоснования принимаемых решений и практических применений;
2. интегрирование потенциала научно-исследовательских организаций, информационных ресурсов и инфраструктуры, имеющиеся в России и других странах Северной Евразии.

Вопросы динамики социально-экономического развития и глобальных изменений окружающей среды связаны с проблемами природных стихийных и антропогенно обусловленных бедствий и катастроф, а также с катастрофами "замедленного действия" (изменение климата, истощение озонового слоя, опустынивание, обезлесивание, подъем уровня Мирового океана, уменьшение биоразнообразия и т.д.).

Наряду с "парниковой" гипотезой глобального потепления необходимо активизировать изучение оптико-метеорологической и климатической системы атмосфера-океан-суша-ледяной покров-биосфера" с учетом всей сложности обратных связей между ее компонентами.

Для диагностики и прогнозирования требуется серьезное исследование глобальных систем наблюдений и численное моделирование возможности дистанционного зондирования и мониторинга на основе "сценариев" развития в атмосфере и на земной поверхности техногенных чрезвычайных аварий и естественно-природных катастроф.

Всемирная система мониторинга и иерархия моделей - главные инструменты для прогнозирования изменений в природных процессах и разделения естественных и антропогенных воздействий.

Интерес к проблеме переноса излучения в природных средах в последнее время заметно возрос в связи с разработками космических систем глобального мониторинга Земли и многосторонним анализом физических, химических, метеорологических, биофизических процессов, ответственных за формирование радиационного поля Земли. Под влиянием антропогенных и естественно-природных воздействий "радиационный форсинг" может спровоцировать разрушение самовосстановительного потенциала биосферы и вызвать катастрофические климатические последствия. В последние годы специалисты в области климата и глобальных изменений окружающей среды признали важность радиационного форсинга, т.е. изменение радиационного поля Земли под влиянием естественно-природного и антропогенно-техногенного воздействия, который может быть не менее 40%, что привело к необходимости совершенствования радиационных блоков в моделях климата, циркуляции и т.д.

В масштабах планеты стоит актуальная проблема создания международного глобального мониторинга Земли с целью исследования её эволюции и прогнозирования естественно-природных стихийных бедствий и антропогенно-техногенных катастрофических процессов.

Это грандиозные задачи, решение которых требует разработки нанотехнологий для космических проектов, в частности, развитие гиперспектральных систем дистанционного зондирования и нанодиагностики природно-техногенной сферы, и в интересах международной кооперации по аэрокосмическому и наземному глобальному мониторингу Земли, международного глобального проекта по изучению эволюции Земли, климата и опасных явлений требуется разработка нового информационно-математического обеспечения для решения прямых и обратных задач теории переноса излучения в природных средах, реализуемого на высокопроизводительных многопроцессорных супер-ЭВМ.

С одной стороны, радиационное поле - один из неотъемлемых факторов жизнеобеспечения человека, животного и растительного мира на Земле, одна из определяющих компонент земной экосистемы и биосферы, а также климата Земли, для поведения которых характерно взаимодействие отдельных компонент с проявлением синергизма.

С другой стороны, при дистанционном зондировании объектов природно-техногенной сферы электромагнитное излучение, регистрируемое разными средствами, является основным источником информации о строении и физических свойствах планетных атмосфер и поверхностей, о состоянии окружающей среды и объектов, атмосферы, облачности, океана, гидрометеоров и всевозможных выбросов с

загрязняющими примесями (последствия техногенных аварий, военных действий, лесных и степных пожаров, извержений вулканов и т.д.).

Сложность космических исследований и реализации космических проектов обусловлена тем, что приходится иметь дело с "замкнутым кругом":

- чтобы измерить характеристики радиационного поля Земли, нужны предварительные оценочные расчеты этих характеристик на основе моделей теории переноса излучения с учетом многократного рассеяния и поглощения солнечного и собственного излучения,
- чтобы смоделировать перенос излучения в системе "атмосфера - земная поверхность - океан", нужны данные о пространственных и спектральных распределениях оптико-геофизических параметров атмосферы и океана, описывающих взаимодействие солнечного и собственного излучения с компонентами земной атмосферы и океана и земной поверхностью.

Следует обратить внимание на несогласованность теории переноса с реальными возможностями натуральных измерений. Практически отсутствуют способы одновременного экспериментального определения всего комплекса входящих в теорию физических параметров среды и тем более их изменчивости для данных конкретных, непрерывно меняющихся ситуаций в реальной окружающей среде. Поэтому физико-математическое моделирование для восполнения знаний о реальных радиационных процессах, их анализа и прогнозирования является необходимой составной частью любого космического проекта и глобальных моделей циркуляции атмосферы и океана, климата или метеорологии.

Возрастает роль "космического земледения" [2, 3] как той дисциплины, которая объединяет усилия различных специалистов и позволяет им всем вместе "заговорить" на общем языке космических исследований. "Космическое земледение" - это оперативная информация о стихийных бедствиях и экологических катастрофах антропогенно-техногенного и естественно-природного происхождения и космический мониторинг глобальных изменений окружающей среды, включая экологические катастрофы замедленного действия. В России около 30 Центров приема космической информации, а Центры обработки и анализа информации находятся в стадии формирования и становления. В марте 2003 года вышло Постановление Правительства РФ об организации государственного экологического мониторинга окружающей среды. В октябре 2005 вышла Федеральная программа по космосу и в настоящее время разрабатывается развитие этой программы на перспективу до 2020 года. Одно из важных направлений Федеральной программы по космосу связано с использованием космических данных для оптимального управления регионами с целью обеспечения их устойчивого развития [4].

Радиационное поле Земли формируется под влиянием двух компонент системы "атмосфера - земная поверхность (суша, океан)" (САП). Связи между радиационными характеристиками и параметрами атмосферы и земной поверхности описываются решениями общей краевой задачи теории переноса излучения в САП, когда важно использовать теорию многократного рассеяния [5, 6]. Сложность задачи заключается в многопараметричности модели среды, большом разнообразии процессов трансформации энергии Солнца, вариантов визирования и способов измерений. Приходится иметь дело с общими краевыми задачами для интегро-дифференциального кинетического уравнения, описывающего перенос излучения в рассеивающих, поглощающих, излучающих, преломляющих, поляризующих средах с одномерной, двумерной или трехмерной плоской или сферической геометрией. Используется линеаризованное уравнение Больцмана в приближении бинарных столкновений, основанном на дуализме "волна-частица". Теория переноса позволяет изучать влияние различных факторов на прохождение излучения в САП и получать связи конкретных параметров среды с характеристиками радиационного поля.

Для космических проектов и космических наблюдений с первых шагов освоения космического пространства необходимо было разрабатывать методологию решения двух основных классов многомерных задач теории переноса излучения :

- прежде всего для многомерной сферической оболочки (сферическая Земля с атмосферой),
- а позже для 3D плоского слоя (атмосфера над земной поверхностью), с двумя типами источников:
- внешним параллельным потоком солнечного (ультрафиолетового, коротковолнового) излучения,
- собственным (длинноволновым, инфракрасным, миллиметровым) излучением.

В рамках развития вычислительных средств с целью создания информационно-математического обеспечения для решения прямых и обратных (больших) задач нанодиагностики природных и техногенных сред методами гиперспектрального (сотни и тысячи диапазонов спектра электромагнитных волн от УФ до ММВ) аэрокосмического дистанционного зондирования рассматриваются следующие модели переноса излучения.

- Спектральная, пространственная и угловая структуры радиационного поля при известных условиях освещения рассчитываются как решения общей краевой задачи для уравнения переноса.
- Спектральные и пространственные структуры интегральных характеристик поля излучения рассчитываются как решения задач, отвечающих (математически) точным или разной степени приближенности линейным и нелинейным моделям.

Используются следующие приемы распараллеливания вычислений:

1. распределенные вычисления по физическим моделям:
4. многоспектральные (по спектру длин волн);
5. по оптико-геофизической погоде (по коэффициентам общей краевой задачи);
6. по источникам излучения;
- 3) распределенные вычисления на основе методического распараллеливания - декомпозиции краевых задач:
 - по моделям переноса излучения, т.е. по приближениям теории переноса излучения;
 - по подобластям;
 - по параметрам вектора функций влияния;
 - по параметрам вектора пространственно-частотных характеристик;
 - по компонентам векторных функционалов;
 - алгоритмическое распараллеливание для многомерных моделей:
 - однократное рассеяние по характеристикам;
 - многократное рассеяние по интегралам столкновений;
 - по квадрантам угловых разностных сеток;
 - по подобластям с разными сеточно-характеристическими схемами.

Программное обеспечение

Одна из целей - разработка программного обеспечения для математического моделирования радиационного поля Земли на суперкомпьютерах с распараллеливанием вычислений на основе использования средств программирования высокого уровня.

Создаваемые вычислительные средства ориентированы на обеспечение преемственности реализуемого математического обеспечения и возможностей его развития и переноса на иные высокопроизводительные ЭВМ с операционными системами UNIX и LINUX. Использование оболочек на языке управления сценариями Perl, инкапсулирующих в себе вызовы Fortran-программ в многозадачной среде, обеспечивает переносимость и интероперабельность приложений. При этом полуавтоматически решается проблема построения современного сетевого интерфейса для нашего "унаследованного" математического обеспечения (программной системы).

Программные комплексы создаваемой системы автоматизированного расчета, обработки и анализа радиационных характеристик Земли и решения задач дистанционного зондирования разрабатываются на многопроцессорных супер-ЭВМ с параллельными вычислениями под управлением через сеть с "рабочего места", организованного на РС. Создаваемая система содержит три группы программных комплексов.

Первая группа программ - формирование оптико-метеорологических моделей среды: программы работы с архивом и базами данных моделей атмосферы, облаков, дымов, земной поверхности, океана; банк спектров поглощения атмосферных газов; банк характеристик аэрозольного рассеяния и поглощения; формирование модели атмосферы; пакеты данных к программам расчета радиационных характеристик и т.д.

Вторая группа программ - численное решение скалярного уравнения переноса излучения быстрыми приближенными и репрезентативными высокоточными методами: для плоской и сферической геометрии, для системы свободная атмосфера-дымовая завеса, для системы атмосфера-океан, для системы атмосфера с многоярусными облаками, для функции влияния атмосферы, дымов, облачности, гидрометеоров, океана, для функции пропускания атмосферы, отягощенной многократным рассеянием, и т.д.

Третья группа программ - обработка и диагностика результатов расчетов: аналитическая аппроксимация и параметризация табличных функций; компьютерная графика и визуализация; решение обратных задач по восстановлению параметров среды и т.д.

Предложенная архитектура программного обеспечения с функциональным наполнением, ориентированным на решение задач мониторинга развития и оценки последствий воздействия техногенных аварий и природных катастроф, а также природно-ресурсных, экологических, геоэкоинформационных и т.п. задач, позволяет осуществлять модификацию и адаптацию вычислительно-информационной системы применительно к конкретным проблемам математического моделирования радиационных процессов в системе Земля-атмосфера или восстановления набора параметров зондируемой среды.

Вычислительная среда

Цель разработки (обеспечить максимально возможную переносимость "унаследованного" комплекса программ и обеспечить прозрачную работу в распределенной сетевой среде. Комплекс должен без значительных переделок работать на кластере рабочих станций (workstation clusters) и/или массиве параллельных процессоров (massively parallel processor (ММР)). Параллелизм реализуется в системе массовых расчетов большого набора краевых задач теории переноса излучения в широком диапазоне спектра длин волн для наборов "оптической погоды", состояний подстилающей поверхности, источников излучения.

Результаты единичных расчетов накапливаются в архивах решений, которые переформируются в управляемые базы данных и используются в дальнейшем для расчета различных функционалов и для визуальной и графической обработки в интересах конкретных целевых приложений. Программы

(вычислительные модули) для расчета "единичного" варианта реализованы на языке Fortran. Существенно, что в процессе счета варианта и при записи в архив решений используются операторы прямого доступа Fortran.

Реализация функции управления и сетевого взаимодействия "унаследованным" комплексом программ производится с помощью оболочек (wrapper's), написанных на языке описания сценариев Perl. Другими словами, производится упаковка Fortran-программ внутрь модулей на языке Perl (Perl scripts).

Языки описания "сценариев" (Perl, Python, Tcl/Tk) позволяют быстро разрабатывать приложения, ориентированные на объединение готовых компонентов и систем. В них реализован доступ к полному набору необходимых для этой цели функций операционной системы. Языки описания "сценариев", как правило, являются интерпретаторами, реализованными на языках C/C++. Их модель построения приложений основана на создании компонентов с помощью языков системного программирования (типа C/C++) и соединения таких компонентов посредством "сценариев".

Комплекс математических моделей, методов и программного обеспечения представляет собой открытую развиваемую систему математического моделирования. Использование в качестве основных языков программирования Fortran, C++ и структурирование математического обеспечения с выделением в отдельные модули фрагментов, зависящих от конкретных вычислительной и операционной систем, позволяют переносить пакеты программ на разные вычислительные системы и адаптировать к постоянно развивающимся операционным системам.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 09-01-00071, 08-01-00024, 08-07-13515-офи_ц с Роскосмосом) и Программы фундаментальных исследований РАН (проект ОМН-3(4)).

ЛИТЕРАТУРА:

1. Т.А. Сушкевич Осесимметричная задача о распространении излучения в сферической системе // Отчет № О-572-66. М.: ИПМ АН СССР, 1966.
2. Космическое земледелие: информационно-математические основы / Под ред. Садовниченко В.А. Авторы: Козодеров В.В., Косолапов В.С., Садовнический В.А., Тимошин О.А., Тищенко А.П., Ушакова Л.А., Ушаков С.А. М.: Изд-во МГУ, 1998. 571 с.
3. Космическое земледелие: Диалог природы и общества. Устойчивое развитие / Под ред. Садовниченко В.А. Авторы: Козодеров В.В., Садовнический В.А., Ушакова Л.А., Ушаков С.А. М.: Изд-во МГУ, 2000. 640 с.
4. В.В. Козодеров, Т.А. Сушкевич. Устойчивое развитие и рациональное природопользование: аэрокосмический мониторинг природно-техногенной сферы и информационно-динамические модели лценки ее состояния. / Материалы Международной конференции "Устойчивое развитие: природа - общество - человек", 5-6 июня 2006 года, Центр Международной Торговли, Москва. Организаторы: Министерство природных ресурсов Российской Федерации, Торгово-промышленная палата Российской Федерации, ЗАО "ПИК "МАКСИМА". Секция: Природа-Общество-Человек в XXI веке: рациональное природопользование и экологическая безопасность. CD-ROM.
5. Т.А. Сушкевич, С.А. Стрелков, А.А. Иолтуховский Метод характеристик в задачах атмосферной оптики. М., Наука, 1990.
6. Т.А. Сушкевич Математические модели переноса излучения. М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005.