

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ АТМОСФЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

А.В. Старченко, Д.В. Деги

Сформулирована математическая модель и предложен оригинальный метод расчета динамических и тепловых характеристик локальных атмосферных процессов над термически и орографически неоднородной шероховатой поверхностью с использованием многопроцессорной вычислительной техники. Представлены результаты тестирования предложенной численной модели.

Контроль качества воздуха является одной из актуальнейших проблем природоохранных служб. Вместе с тем имеющиеся в наличии у экологов средства диагностики уровня загрязненности воздушного бассейна не позволяют оперативно получать подробную информацию о концентрации вредных веществ в приземном слое атмосферы. Поэтому в настоящее время значительное внимание уделяется применению методов математического моделирования при диагностике и прогнозировании качества воздуха над городом [1,2].

При численном предсказании нестационарных пространственных процессов распространения и эволюции газообразных загрязнителей атмосферы наряду с данными о распределении и интенсивности источников загрязнения необходима также подробная и оперативная информация о аэродинамических характеристиках атмосферного пограничного слоя. Эту информацию можно получить, например, решая систему полных уравнений Рейнольдса [2-4], совместно с уравнениями энергии, влажности и турбулентных характеристик.

Целью данной работы является разработка математической модели и метода расчета, позволяющих эффективно использовать ресурсы современной вычислительной техники, для быстрого прогноза метеорологической ситуации над термически и орографически неоднородной шероховатой поверхностью.

Для описания динамических и тепловых процессов в атмосферном пограничном слое используется следующая система нестационарных трехмерных дифференциальных уравнений:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{D(\rho u)}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho f v + K_H \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_Z^m \frac{\partial u}{\partial z} \right); \quad (2)$$

$$\frac{D(\rho v)}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} - \rho f u + K_H \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_Z^m \frac{\partial v}{\partial z} \right); \quad (3)$$

$$\frac{D(\rho w)}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} - \rho g + K_H \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_Z^m \frac{\partial w}{\partial z} \right); \quad (4)$$

$$\frac{D(\rho\theta)}{Dt} = K_H \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_Z^h \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + \frac{\theta}{c_p T} \left(\frac{\partial Q_{rad}}{\partial z} + L_w \Phi \right); \quad (5)$$

$$\frac{D(\rho q)}{Dt} = K_H \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_Z^h \frac{\partial q}{\partial z} \right) - \Phi \quad (6)$$

и уравнение состояния

$$p = \rho RT, \quad R = R_0 \left[\frac{1-q}{M_{air}} + \frac{q}{M_{H_2O}} \right] \quad (7)$$

Здесь t - время, x, y, z - декартовы координаты, Ox направлена на восток, Oy - на север; u, v, w - компоненты скорости ветра; ρ, p, q, T - плотность, давление, влажность и температура воздуха; f - параметр Кориолиса; K_H, K_Z^m, K_Z^h - коэффициенты турбулентной диффузии; g - ускорение свободного падения; $\theta = T(p_0/p)^{R_0/c_p}$ - потенциальная температура; p_0 - давление на уровне моря; R_0 - универсальная газовая постоянная; M_{air}, M_{H_2O} - молекулярный вес сухого воздуха и паров воды; $c_p = (1-q)c_{p,air} + qc_{p,H_2O}$ -

удельная теплоемкость; Q_{rad} - радиационный тепловой поток; Φ - скорость образования жидкой фазы; L_w - скрытая теплота конденсации.

Для определения коэффициентов вертикальной турбулентной диффузии используется однопараметрическая модель турбулентности [3] с прогностическим уравнением для кинетической энергии турбулентности k :

$$\frac{D(\rho k)}{Dt} = K_z^m \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] - \frac{g}{\theta} K_z^h \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(1,2 K_z^m \frac{\partial k}{\partial z} \right) + K_H \left(\frac{\partial^2 k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 k}{\partial y^2} \right) - \frac{0,125 \rho k^{1,5}}{l} \quad (8)$$

и соотношение Блэкадара для масштаба турбулентности l :

$$l = \frac{ikappa z}{1.0 + (ikappa z/l_\infty)}; ikappa = 0,35; l_\infty = \frac{0,1 \int_0^\infty z k dz}{\int_0^\infty k dz} \quad (9)$$

Причем

$$K_z^m = 0,5 \rho \sqrt{kl}; K_z^h = K_z^m / Pr_t; Pr_t = \begin{cases} 1, & z > z_D \\ 1,35 - 0,35 z/z_D, & z \leq z_D \end{cases}$$

Коэффициент горизонтальной диффузии K_H для всех уравнений считается одинаковым и постоянным, поскольку его использование при вычислениях необходимо для обеспечения устойчивости расчетов и гладкости решения [3].

Граничные условия для системы уравнений (1) – (6) и (8) должны быть заданы на шести гранях параллелепипеда, ограничивающего область исследования. На верхней границе при $z = H$:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial v}{\partial z} = w = \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial q}{\partial z} = \frac{\partial k}{\partial z} = 0 \quad (10)$$

На боковых открытых поверхностях использовались так называемые «радиационные» граничные условия в форме Клемпа – Вильгельмсона [4], обеспечивающие устойчивость и баланс при получении численного решения за счет минимальной деформации и отражения возмущений, покидающих расчетную область. На нижнем вычислительном уровне при $z = h > 10z_0$ (z_0 - высота шероховатости поверхности) применяются уравнения приземного слоя [2,5]:

$$K_z^m \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\rho_h v_*^2 u_h}{V_h}; K_z^m \frac{\partial v}{\partial z} = \frac{\rho_h v_*^2 v_h}{V_h}; K_z^h \frac{\partial \theta}{\partial z} = \rho_h v_* \theta_*; K_z^h \frac{\partial q}{\partial z} = \rho_h v_* q_*;$$

$$(K_z^m)_h = \frac{\rho_h k v_* h}{\Phi_u(\zetaeta_h, \zetaeta_0)}; V_h^2 = u_h^2 + v_h^2; \zetaeta_h = h/L; \zetaeta_0 = \zetaeta_h z_0/h.$$

Здесь L - масштаб Монины – Обухова, v_* , θ_* , q_* - динамическая скорость, потенциальная температура и удельная влажность, определяемые по формулам:

$$v_* = \frac{k V_h}{f_u(\zetaeta_h, \zetaeta_0)}; \theta_* = \frac{\theta_h - \theta_0}{f_\theta(\zetaeta_h, \zetaeta_0)}; q_* = \frac{q_h - q_0}{f_\theta(\zetaeta_h, \zetaeta_0)}.$$

Значения параметра ζeta при $z = h$ находятся из решения нелинейного уравнения

$$\frac{\zetaeta_h f_\theta(\zetaeta_h, \zetaeta_0)}{f_u^2(\zetaeta_h, \zetaeta_0)} = \frac{gh(\theta_h - \theta_0)}{\bar{\theta} V_h^2} \quad (11)$$

вид функций f_u , f_θ , Φ_u взят из [5].

Температура поверхности почвы θ_0 рассчитывается из следующего прогностического уравнения [3]:

$$\frac{\partial \theta_0}{\partial t} = - \frac{3,72 G_s}{c_s \rho_s d} - \frac{7,4(\theta_0 - T_s)}{\tau_d} \quad (12)$$

где c_s , ρ_s , T_s - теплоемкость, плотность и температура нижних слоев почвы;

τ_d - длительность суток; $d = \sqrt{\lambda_s \tau_d / \rho_s c_s}$ - толщина эффективного слоя почвы. Значения теплового потока G_s определяются из уравнения теплового баланса

$$G_s = (1 - A) F_s - F_L - H_s - E_s, \quad (13)$$

где A - альbedo подстилающей поверхности; F_s, F_L - результирующие потоки солнечного и длинноволнового излучения, $H_s = -\rho_h c_p v_* \theta_*$, $E_s = -\rho_h L_w v_* q_*$.

Удельная влажность на поверхности считается известной функцией температуры поверхности [2].

В качестве начальных условий для системы уравнений (1) – (6) и (8) предполагается использовать либо результаты обработки данных метеонаблюдений, либо значения метеозлементов, полученные на основе глобальных метеорологических моделей.

Нижняя граница области исследования совпадает с поверхностью. Поэтому для учета орографической неоднородности расчеты проводятся в криволинейной системе координат, связанной с декартовой следующим преобразованием:

$$\xi = x, \eta = y, \zeta = \frac{H(z - \delta(x, y))}{H - \delta(x, y)} \quad (14)$$

$H, \delta(x, y)$ - верхняя и нижняя границы области исследования.

Задача решается численно на неравномерных сетках. Расчетная область составляет конечным числом непересекающихся контрольных объемов (параллелепипедов). Значения компонент скорости ветра определяются на гранях контрольных объемов, скалярных характеристик – в центре. Дискретизация дифференциальных уравнений относительно пространственных координат осуществляется с использованием метода конечных объемов [6]. Для получения конечно-разностных соотношений в нестационарном случае используется схема Адамса-Башфорта (второй порядок точности). Из-за того, что схема условно устойчива, а мезомасштабные модели, как правило, используют сетки с небольшим вертикальным шагом вблизи подстилающей поверхности, то для уменьшения ограничений на шаг по времени используется схема Кранка – Николсона для аппроксимации диффузионного слагаемого относительно координаты z . При аппроксимации конвективных членов уравнений применяется монотонизированная противопотоковая схема MLU Ван Лира [7], минимизирующая влияние схемной диффузии. В итоге получается, что исходные дифференциальные уравнения аппроксимируются явно-неявными разностными схемами, которые решаются с помощью метода прогонки вдоль вертикальной координаты для каждого узла горизонтального сечения сеточной области. При определении поля давления для ускорения сходимости вычислительного процесса принималось, что давление представляется четырьмя слагаемыми:

$$p(x, y, z, t) = p_f(z) + p_g(x, y, t) + p_h(x, y, z, t) + p_{nh}(x, y, z, t), \quad (15)$$

где $p_f(z), \rho_f(z)$ - фоновые значения давления и плотности, связанные через уравнения состояния и гидростатики; $p_g = \rho f(V_g x - U_g y); U_g; V_g$ - компоненты геострофического ветра; гидростатическая часть давления определялась из $\partial p_h / \partial z = (\rho_f - \rho) g$; p_{nh} - негидростатическая часть давления, которая рассчитывалась с помощью алгоритма [8], базирующегося на решении разностного уравнения Пуассона для поправки давления. В данной работе решение сеточных уравнений для поправки давления предлагается осуществлять с помощью полинейного метода верхней релаксации SOR и «красно-черного» упорядочивания узлов сетки [9] в плоскости Oxy .

Разработанная мезомасштабная модель была применена к исследованию метеорологических условий и химической погоды над городом Томск. Расчет проводился с использованием технологии вложенных областей. При расчете характеристик атмосферного пограничного слоя выбиралась две области размером $200 \times 200 \text{ км}^2$ и $50 \times 50 \text{ км}^2$, в центре которых находится г. Томск ($85,0^\circ \text{E } 56,5^\circ \text{N}$). Такой подход позволил повысить разрешение метеорологической модели до 0,5-1 км и использовать в расчетах 30 уровней по вертикальной координате. При задании свойств подстилающей поверхности рассматривалось девять категорий землепользования: водная поверхность, поверхность с незначительной растительностью, сельскохозяйственные угодья, лиственный, смешанный и хвойный лес, низкоэтажная, среднеэтажная и высокоэтажная городская застройка. Эти категории отличались по следующим параметрам: высота шероховатости, альbedo, теплофизические свойства почвы, параметр испарения, степень черноты, температура на глубине 2 м (для почвы). Для городских категорий дополнительно вводились средняя высота зданий, поток антропогенного тепла, коэффициент сопротивления зданий и т.п.

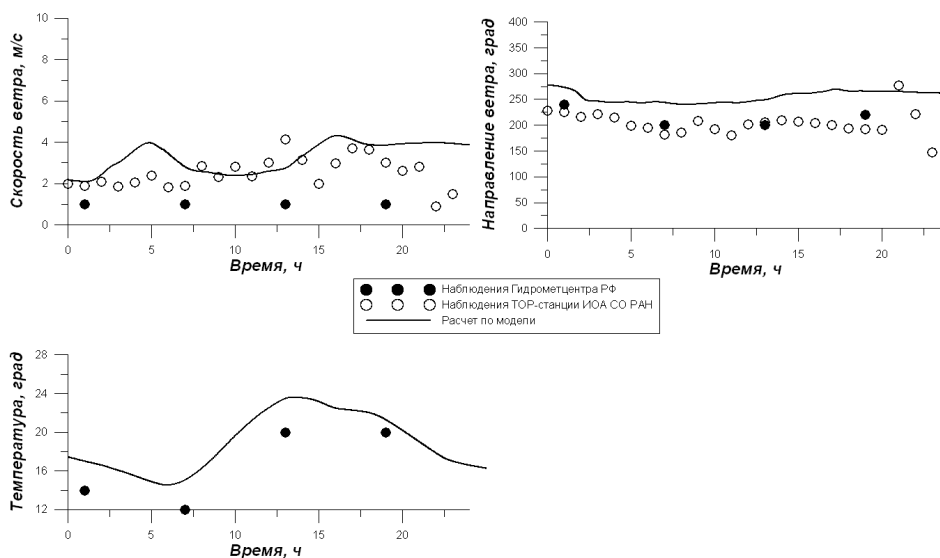


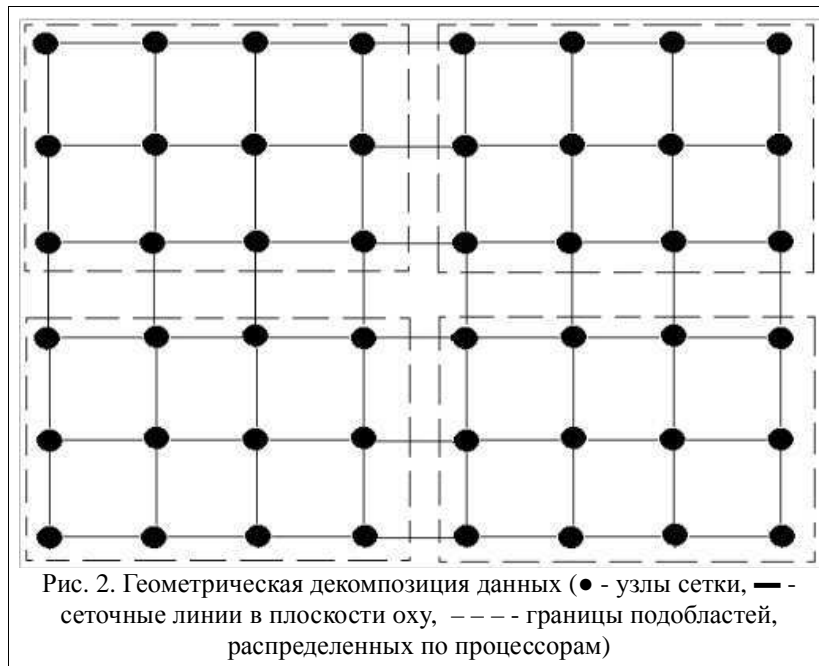
Рис. 1. Сравнение рассчитанных и измеренных значений силы и направления ветра на высоте 10 м и температуры на высоте 2 м. Сплошные линии – расчет, значки – измерения ТОР-метеостанции Института оптики атмосферы СО РАН и регионального управления Гидрометслужбы

На рисунке 1 представлены рассчитанные и измеренные значения приземной скорости ветра и температуры для реальных условий г. Томск. По сведениям Гидрометцентра РФ этот день характеризовался малооблачной погодой с преобладающим юго-западным ветром направлением 200-240 градусов и скоростью 1 м/с. Температура в течение суток колебалась от 12 до 20 градусов Цельсия. Расчеты были выполнены для случая традиционно используемой при параметризации взаимодействия атмосферного пограничного слоя теории подобия Монина-Обухова [4].

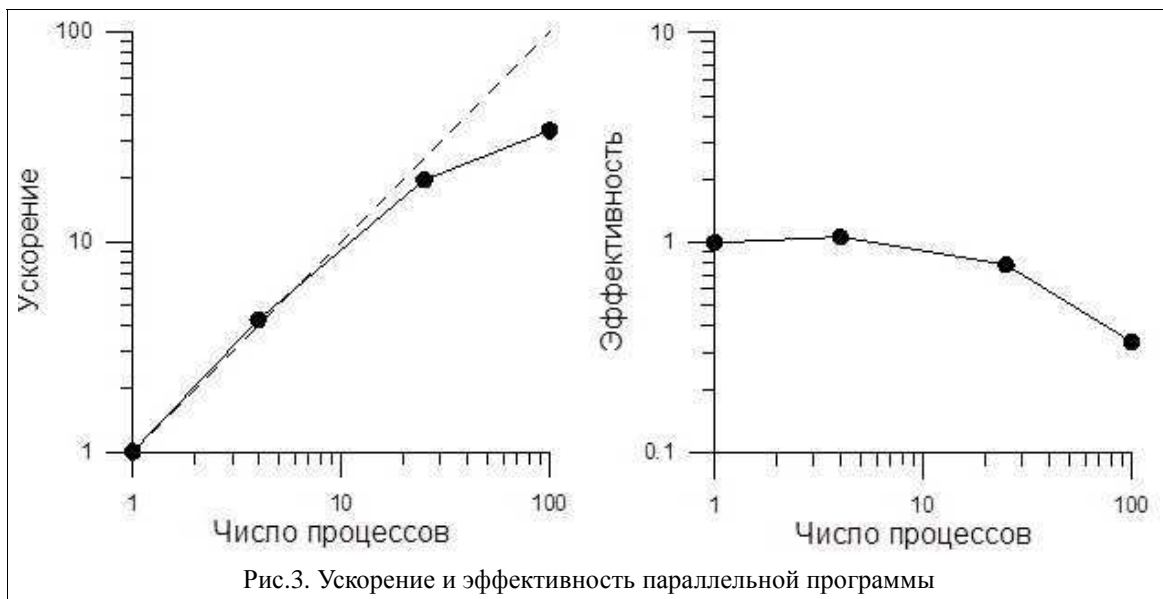
Из рисунка видно, что в дневное время рассчитанные по предлагаемому подходу значения приземной температуры соответствуют измерениям, выполненным на ТОР-метеостанции Института оптики атмосферы СО РАН (<http://meteo.iao.ru>), которая расположена на восточной окраине города. Предсказанные с использованием рассматриваемого подхода значения силы и направления приземного ветра неплохо согласуются с данными наблюдений.

Расчеты по данной модели проводились на кластере ТГУ **Cyberia**[10]. Обеспечение обмена данными между узлами кластера и согласованность работы процессоров осуществлялось с помощью библиотеки MPI. Построение параллельной версии алгоритма вычислений осуществлялось на основе принципа геометрической декомпозиции сеточной области, когда вся область исследования делится на равные по площади (или по количеству сеточных узлов) части, вычисления в которых проводятся одновременно и независимо. При написании параллельной версии программы учитывались следующие требования:

- Минимальное взаимодействие между узлами кластера;
- Эффективный расчет соответствующего подмножества компонент неизвестных каждым используемым процессором.



Первое требование разрешалось путем использования двумерной декомпозиции сеточной области (рис. 2) относительно координат x и y . Для каждого «горизонтального» узла значения сеточных функций вдоль вертикальных линий сетки вычисляются одновременно и независимо с использованием метода прогонки. Данная декомпозиция является более эффективной по сравнению с одномерной декомпозицией (осуществляет меньше количество пересылок). Для обеспечения параллельных вычислений необходимо обеспечить каждую подобласть дополнительными значениями сеточных функций, которые принадлежат узлам из соседних по декомпозиции подобластей. Такая декомпозиция называется декомпозицией с перекрытием, и ее реализация требует обменов «приграничных» значений сеточной функции на каждой итерации. Важной особенностью параллельного численного метода является то, что сеточные уравнения для скоростей и скалярных характеристик решаются в одну итерацию. Кроме того, при увеличении числа используемых процессоров количество локальных итераций, необходимых для решения уравнения поправки P_{nh} , не изменяется. В то время как более «быстрые» последовательные методы при использовании декомпозиции сетки и асинхронного подхода для вычислений увеличивают количество используемых итераций для обеспечения сходимости итерационного процесса с заданной точностью.



Второе требование подразумевает выполнение следующих условий:

1. Последовательная выборка элементов из оперативной памяти;
2. Минимизация количества операций, использующих относительно большое количество тактов работы процессора (операции деления).

Первое условие выполняется путем объявления в программе массивов, имеющих размер, равный количеству используемых компонент неизвестной функции, участвующих в расчетах. То есть до момента выполнения программы каждым процессором будет статически выделяться массив только для рассчитываемых неизвестных. А для последовательной выборки элементов из оперативной памяти необходимо обеспечить соответствующий для используемого языка программирования (Fortran, C/C++) порядок вложенности инструкций циклов с параметром. Также в программе проведена минимизация операций деления.

На рис. 3 представлены графики ускорения и эффективности параллельной программы при проведении расчетов для внутренней области на сетке 50x50x30.

Выводы

Сформулирована математическая модель для проведения с высоким разрешением краткосрочного прогноза метеовеличин в атмосферном пограничном слое над термически и орографически неоднородной шероховатой поверхностью.

Разработан численный метод решения системы эволюционных нелинейных уравнений в частных производных методом конечного объема, экономичными явно-неявными монотонизированными разностными схемами второго порядка точности.

Построена эффективная параллельная реализация разработанного численного метода, обладающая свойством сохранения объема вычислений при увеличении степени декомпозиции сеточной области. Расчеты на кластере Siberia показали хорошую масштабируемость параллельной программы до 25 процессов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 12-01-00433-а.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1975. 448с.
2. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 256с.
3. Shayes G., Thunis P., Bornstein R. Topographic Vorticity-Mode Mesoscale- β (TVM) Model. Part. I: Formulation // J. Of Applied Meteorology. 1996. Vol. 25. P.1815-1823.
4. Klemp J.B., Wilhelmson R.B. The Simulation of Three-Dimensional Convective Storm Dynamics // J. of Atmos. Science. 1978. Vol.35, No.6. P.1070-1096.
5. Казаков А.Л., Лазриев Г.Л. О параметризации приземного слоя атмосферы и деятельного слоя почвы // Физика атмосферы и океана. 1978. Т.14, №3. С.257-265.
6. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152с.
7. Noll V. Evaluation of a Bounded High-Resolution Scheme for Combustor Flow Computation // AIAA Journal. 1992. Vol.30, No.1. P.64-69.
8. Данилкин Е.А., Старченко А.В. Параллельная реализация численного метода решения системы уравнений Навье-Стокса при моделировании крупных вихрей турбулентных течений // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии, 2009, Т.7, №2. – Новосибирск: НГУ. – С. 49-61
9. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем/ Дж. Ортега; Под ред. Х.Д. Икрамова. – М. «Мир», 1991 – 367с.
10. <http://skif.tsu.ru>