

На правах рукописи



Беликов Дмитрий Анатольевич

**ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
АТМОСФЕРНОЙ ДИФФУЗИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ПЕРВИЧНЫХ И ВТОРИЧНЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ВОЗДУХА НАД
УРБАНИЗИРОВАННОЙ ТЕРРИТОРИЕЙ**

Специальность 05.13.18 – «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2006

Работа выполнена в Томском государственном университете

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Старченко А.В.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Курбацкий А.Ф.

доктор физико-математических наук,
профессор Тимченко С.В.

Ведущая организация: Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск

Защита состоится 5 октября 2006г. в 10³⁵ на заседании диссертационного совета
Д 212.267.08 при Томском государственном университете по адресу: 634050,
г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного
университета по адресу: 634050 г. Томск, пр. Ленина, 34а

Автореферат разослан 1 сентября 2006г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор технических наук



А.В. Скворцов

Актуальность работы.

Состояние атмосферы, особенно её нижней, соприкасающейся с земной поверхностью части – приземного слоя, имеет принципиальное значение для животного и растительного мира, а также человека. В настоящее время особую тревогу вызывает ухудшение качества воздуха, т.е. изменение его химического и аэрозольного состава вследствие антропогенного воздействия: выбросов в атмосферу отходов промышленных предприятий и выхлопных газов транспорта.

Для мониторинга и прогноза экологического состояния атмосферы города наряду с инструментальными исследованиями успешно применяются методы математического моделирования. Однако сложность и взаимосвязанность процессов распространения, рассеяния и химической трансформации компонент примеси, происходящих в турбулентном атмосферном пограничном слое (АПС), делают модели прогнозирования качества воздуха громоздкими в математической записи и весьма требовательными к вычислительным ресурсам. Перспективным способом решения этих проблем является применение эффективных численных схем высокого порядка точности и использование компьютеров с параллельной архитектурой при проведении вычислений.

Математическому моделированию загрязнения атмосферного воздуха посвящены работы М.Е. Берлянда, Г.И. Марчука, В.В. Пененко, Р.Д. Борнштейна, Р. J. Hurley, Н. Mayer, N. Moussiopoulos. Модели турбулентности атмосферного пограничного слоя и турбулентного переноса примеси разработаны в работах Г.С. Глушко, Б.Б. Илюшина, А.Н. Колмогорова, А.Ф. Курбацкого, А.С. Моница, А.М. Обухова, А. Andren, G.L. Mellor, Т. Yamada. Подробные исследования химических и фотохимических реакций в атмосфере провели А. Е. Алоян, Г.И. Скубневская, W.P.L Carter, J.H. Seinfeld, W.R. Stockwell. Параллельному программированию и методам распараллеливания численных алгоритмов посвящены работы В.В. Воеводина, Вл.В. Воеводина, В. И. Малышкина, В.А. Вшивкова, D. Dubdub и др.

В ближайшем будущем развитие моделей предсказания качества воздуха будет продиктовано более интенсивной антропогенной нагрузкой на атмосферу в городах и пойдёт по пути увеличения их пространственного разрешения и включения в рассмотрение большего числа процессов и атмосферных физико-химических явлений, что потребует разработки методов параллельных вычислений в задачах охраны окружающей среды.

Работа выполнялась в соответствии с основными направлениями НИР Томского государственного университета в рамках темы 1.02.04, 1.12.06 ЕЗН Министерства образования и науки РФ, а также по научным проектам, поддержанным грантами программы INCO COPERNICUS 2 Европейской комиссии (№ ICA2-CT-10024), РФФИ (№ 04-07-90219, № 05-05-98010р-Обь), Министерства образования (№ А03-2.10-686, № А04-2.10-770).

Целью работы является разработка математической модели переноса примеси и

построение эффективной параллельной реализации численного решения пространственных нестационарных адвективно-диффузионно-кинетических уравнений для исследования распространения и турбулентного рассеяния химически реагирующих загрязнителей в приземном слое атмосферы над урбанизированной территорией.

Для достижения данной цели сформулированы следующие **основные задачи исследования**:

1. Построить математическую модель переноса примеси с учетом химических и фотохимических взаимодействий между компонентами примеси, опирающуюся на явную анизотропную схему замыкания осреднённых по Рейнольдсу транспортных уравнений.

2. Разработать численные методы решения уравнений модели переноса примеси и модели атмосферного пограничного слоя и провести их апробацию.

3. Разработать эффективную параллельную реализацию вычислительного алгоритма.

4. Численно исследовать распространение примеси от точечных, линейных и площадных источников над территорией города и его окраинами.

Научная новизна полученных автором результатов заключается в следующем:

1. Разработана схема замыкания уравнения переноса на основе явной анизотропной модели турбулентности, позволяющая существенно повысить качество предсказания рассеяния примеси в конвективных условиях АПС по сравнению с применяемыми в настоящее время моделями атмосферной диффузии.

2. Предложена новая эффективная модификация явно-неявного конечно-разностного метода решения пространственных нестационарных адвективно-диффузионно-кинетических уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределённой памятью, применение которой в значительной степени сокращает временные затраты на получение решения по сравнению с обычными последовательными алгоритмами.

3. Впервые с использованием методов математического моделирования систематически проведено исследование загрязнения атмосферы города Томска озоном и другими первичными и вторичными загрязнителями воздуха, выявлены особенности их пространственно-временного распределения в различное время суток и года.

Теоретическая значимость работы следует из того, что разработанная явная анизотропная модель турбулентного переноса может быть применена к целому классу подобных задач теории переноса.

Практическая значимость работы определяется тем, что созданный алгоритм параллельного решения уравнения адвекции-диффузии позволяет с меньшими вычислительными затратами и более высоким пространственным разрешением получить детальную картину загрязнения приземного воздуха. Разработанная математическая модель и численный метод расчета используются в созданной в Томском госу-

дарственном университете совместно с Институтом оптики атмосферы СО РАН компьютерной моделирующей системе исследования качества атмосферного воздуха над крупным индустриальным центром.

Материалы проведенных исследований включены в программу читаемого в ТГУ на механико-математическом факультете специального курса лекций.

Обоснованность научных положений и выводов, сделанных в диссертационной работе, следует из адекватности используемых физических и математических моделей, что подтверждается результатами сравнения с известными теоретическими и экспериментальными данными других авторов.

На защиту выносятся:

1. Разработанная схема замыкания транспортного уравнения турбулентного переноса с использованием оригинальных алгебраических соотношений для турбулентных потоков массы.

2. Алгоритм параллельного решения дискретных адвективно-диффузионных уравнений переноса с учётом химических реакций.

3. Результаты моделирования турбулентной структуры атмосферного пограничного слоя и распространения многокомпонентной химически реагирующей примеси в атмосфере города.

Личный вклад автора. Беликов Д.А. под руководством профессора Старченко А.В. принимал участие в построении математической модели переноса примеси с учетом химических и фотохимических реакций и модели однородного атмосферного пограничного слоя. Разработал модель турбулентности, включающую уравнения для дисперсии турбулентных пульсаций температуры и корреляции пульсаций температуры с пульсациями концентраций, а также алгебраические соотношения для турбулентных напряжений и потоков. Реализовал параллельный вариант вычислительного алгоритма, осуществил тестирование математической модели переноса примеси и модели турбулентности, получил основные результаты диссертационной работы и провел их обоснование.

Основные результаты диссертации доложены соискателем на 15-ти международных, 10-ти всероссийских и 2-х региональных конференциях в Гётеборге, Иркутске, Киеве, Новороссийске, Новосибирске, Томске и опубликованы в 12-ти работах, в том числе 3 статьи в изданиях списка ВАК.

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав и заключения; общий объем работы – 177 страниц; работа содержит 7 таблиц и 52 рисунка; список цитируемой литературы включает 164 наименования.

Краткое содержание диссертационной работы:

Во **введении** сформулированы цель и задачи диссертационного исследования, обоснована его актуальность, кратко излагается содержание диссертационной работы по главам.

Первая глава посвящена общим вопросам проблемы загрязнения воздуха антропогенными выбросами, влиянию атмосферных процессов на перенос и рассеяние примеси, а также способам их математического моделирования. После перечисления основных классов загрязнителей, источников их поступления и определения влияния метеорологических условий на поведение примеси в атмосфере следует описание систем мониторинга и предсказания качества воздуха в региональном и городском масштабах. Далее на основании литературных источников приводится система дифференциальных уравнений, описывающая динамические и термодинамические процессы, происходящие в пограничном слое, обозреваются вопросы, связанные с переходом к системе уравнений для осредненных величин. Подробно рассматриваются иерархия моделей турбулентности, подходы к моделированию переноса примеси, современные механизмы химических и фотохимических реакций и существующие методы задания граничных и начальных условий. В заключительной части главы формулируются основные требования, предъявляемые к современным моделям переноса примеси и атмосферной диффузии.

Вторая глава представляет физическую постановку и математическую формулировку пространственной нестационарной эйлеровой модели переноса примеси с учетом химических взаимодействий, которая была построена на основании проведенного обзора литературных источников с обоснованием предпочтительности того или иного подхода. Для расчета концентрации компонентов примеси с учетом химических взаимодействий между ними применяется прогностическая пространственная модель, включающая транспортные уравнения с описанием адвекции, турбулентной диффузии и химических реакций:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial UC_i}{\partial x_1} + \frac{\partial VC_i}{\partial x_2} + \frac{\partial W_c C_i}{\partial x_3} = -\frac{\partial}{\partial x_1} \langle c_i u \rangle - \frac{\partial}{\partial x_2} \langle c_i v \rangle - \frac{\partial}{\partial x_3} \langle c_i w_c \rangle + S_i + R_i, \quad (1)$$
$$i = 1, \dots, n_s;$$

здесь C_i, c_i – осреднённая и пульсационная составляющие концентрации i -ой компоненты примеси; W_c, w_c – осреднённая и пульсационная составляющие вертикальной компоненты скорости примеси; $\langle \rangle$ – осреднение по Рейнольдсу, S_i – источниковый член, представляющий выбросы компонентов примеси в атмосферу; R_i описывает образование и трансформацию вещества за счет химических реакций с участием компонент примеси; n_s – количество химических компонент примеси, принятых к рассмотрению в схеме химических реакций.

В данной работе предлагается оригинальная явная анизотропная схема замыка-

ния уравнений переноса примеси (1) [4]¹:

$$-\langle cu_j \rangle = \frac{\tau}{C_{10}} \left((1 - C_{20}) \langle cu_3 \rangle \frac{\partial U_j}{\partial x_3} + \langle u_i u_1 \rangle \frac{\partial C}{\partial x_i} \right), \quad j = 1, 2; \quad (2)$$

$$-\langle cu_j \rangle = \frac{\tau}{C_{10} + D_{1c} F} \left(- (1 - C_{30}) \frac{g}{\Theta} \langle c\theta \rangle + \langle u_i u_j \rangle \frac{\partial C}{\partial x_i} \right), \quad j = 3. \quad (3)$$

Здесь F – функция, определяющая влияние поверхности на турбулентную структуру течения, $C_{10} = 3,0$, $C_{20} = 0,346$, $C_{30} = 0,333$, $D_{1c} = 0,806$ – эмпирические константы, $\tau = l/C_D \sqrt{k}$ – временной масштаб турбулентных пульсаций, g – ускорение свободного падения, Θ, θ – осреднённая и пульсационная составляющие потенциальной температуры соответственно.

Для нахождения неизвестной корреляции пульсаций температуры и концентрации $\langle c\theta \rangle$, входящей в (3), выводится дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial \langle c\theta \rangle}{\partial t} + U_i \frac{\partial}{\partial x_i} \langle c\theta \rangle = - \langle cu_3 \rangle \frac{\partial \Theta}{\partial x_3} - \langle \theta u_i \rangle \frac{\partial C}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha \frac{k}{\varepsilon} \langle u_i u_j \rangle \frac{\partial \langle c\theta \rangle}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{\tau \cdot C_x} \langle c\theta \rangle, \quad (4)$$

которое решается численно. Здесь $C_x = 5.0$. Турбулентные потоки тепла и импульса в (2)–(4) определяются с использованием алгебраических соотношений².

Для оценки и прогнозирования загрязнения атмосферы тропосферным озоном и другими вторичными загрязнителями используется полуэмпирический механизм GRS³ [7, 8]. В таблице представлены химические и фотохимические реакции этой схемы, обеспечивающие воспроизведение основных трансформаций фотолитического цикла диоксида азота, ответственного за формирование озона в приземном слое воздуха.

В соответствии с этой схемой выделяемый стационарными и подвижными источниками монооксид азота постепенно окисляется до диоксида азота, который, обладая высокой фотохимической активностью, под действием солнечного излучения с длиной волны $\approx 0,38$ мкм диссоциирует с образованием озона. Прямая (№ 3, таблица 1) и обратная (№ 4) реакции поддерживают постоянный низкий уровень озона. Образование высоких концентраций приземного озона в атмосфере городов связано с

¹ Здесь и далее считаем, что корреляции вида $\langle c_i u_j \rangle$; ($i = 1, \dots, ns$; $j = 1, \dots, 3$; $u_j = (u, v, w_c)$) не зависят от номера компоненты примеси, т.е. $\langle c_i u_j \rangle = \langle c u_j \rangle$; ($i = 1, \dots, ns$; $j = 1, \dots, 3$).

² Старченко А.В. Моделирование переноса примеси в однородном атмосферном пограничном слое // Труды Международной конференции ENVIROMIS-2000., Томск: Изд-во Томского ЦНТИ. 2000. С. 77–82.

³ Hurley P. J. The Air Pollution Model (TAPM) Version 2 / CSIRO Atmospheric Research Technical Paper. 2002. №. 55. P.37.

существованием альтернативных механизмов образования NO_2 . Выделяют два дополнительных пути: реакции с различными органическими соединениями и гидроксильными и пероксидными радикалами (№2).

Метеорологические параметры и турбулентные характеристики, необходимые для модели переноса, рассчитываются на основе современных мезомасштабных метеорологических моделей (MM5 и WRF⁴, моделирующей системы ТГУ–ИОА⁵) или при помощи нестационарной модели в приближении однородного АПС [10]. При этом используется трехпараметрическая « $k-l-\langle\theta^2\rangle$ » модель турбулентности, включающая прогностические уравнения для энергии и масштаба турбулентности, а также квадрата пульсации температуры [1].

Для уравнений (1) на нижней границе ставятся граничные условия, представляющие сухое осаждение компонентов примеси. На верхней границе для концентраций C_i и корреляций $\langle c\theta \rangle$ применяются простые градиентные условия. На боковых границах расчетной области используются условия радиационного типа, способствующие выходу возмущений, сгенерировавшихся в расчетной области (погрешность метода и ошибки округления), за её пределы без отражения. Фоновые значения концентраций C_0 определяются на каждом шаге по времени предварительным расчетом при помощи боксовой модели.

Реакции и скорости реакций фотохимического механизма GRS

N	Реакции	Скорости реакций	Коэффициенты скоростей реакций
1	$R_{\text{smog}} + h\nu \rightarrow RP + R_{\text{smog}} + \eta\text{SNGOC}$	$r_1 = k_1 C_{R_{\text{smog}}}$	$k_1 = k_3 e^{(-4700(1/T - 1/316))}$
2	$RP + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2$	$r_2 = k_2 C_{RP} C_{\text{NO}}$	$k_2 = 3580/60T$
3	$\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}_3$	$r_3 = k_3 C_{\text{NO}_2}$	$k_3 = 0,0001\delta \cdot \text{TSR}/60$
4	$\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2$	$r_4 = k_4 C_{\text{NO}} C_{\text{O}_3}$	$k_4 = (924/60T)e^{-1450/T}$
5	$RP + RP \rightarrow RP + \alpha\text{H}_2\text{O}_2$	$r_5 = k_5 C_{RP} C_{RP}$	$k_5 = 1000/60$
6	$RP + \text{NO}_2 \rightarrow \text{SGN}$	$r_6 = k_6 C_{RP} C_{\text{NO}_2}$	$k_6 = 0,12/60$
7	$RP + \text{NO}_2 \rightarrow \text{SNGN}$	$r_7 = k_7 C_{RP} C_{\text{NO}_2}$	$k_7 = k_6$
8	$RP + \text{SO}_2 \rightarrow \text{SNGS}$	$r_8 = k_8 C_{RP} C_{\text{SO}_2}$	$k_8 = 0,1k_6$

В третьей главе представлен численный метод решения поставленной задачи. Дискретизация дифференциальных уравнений модели переноса примеси и не-

⁴ Применение мезомасштабных моделей MM5 и WRF к исследованию атмосферных процессов / А.В. Старченко, Д.А. Беликов, Д.А. Вражнов, А.О. Есаулов // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т.18. № 05-06. С. 455–461.

⁵ Старченко А.В. Численное моделирование городской и региональной атмосферы и оценка её влияния на перенос примеси // Вычислительные технологии. 2004. Т.9. ч.2. С. 98–108.

стационарной модели в приближении однородного АПС осуществлена с использованием метода конечного объема, обеспечивающего выполнение интегральных законов сохранения, на основе схем второго порядка аппроксимации для диффузионных (центрально-разностная схема) и адвективных (MLU-схема Ван-Лира⁶) членов уравнений переноса. Вычислительная сетка выбирается равномерной в горизонтальном направлении и сгущающейся к поверхности.

Дискретный аналог уравнения переноса (1) при фиксированном индексе $1 \leq i \leq n_s$, $S = S_i$, $R = R_i$, $\Phi = C_i$ можно записать в виде:

$$\begin{aligned} [a_P^0 - (S_P^{1k} + R_P^{1k})\Delta x\Delta y\Delta z_P + D_t + D_b]\Phi_P^{k+1} = D_t\Phi_T^{k+1} + D_b\Phi_B^{k+1} + \\ + [a_E\Phi_E^k + a_W\Phi_W^k + a_N\Phi_N^k + a_S\Phi_S^k + a_T\Phi_T^k + a_B\Phi_B^k - a_P\Phi_P^k] + b, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} a_E = \max(-F_e; 0) + D_e; \quad a_W = \max(F_w; 0) + D_w; \quad a_N = \max(-F_n; 0) + D_n; \\ a_S = \max(F_s; 0) + D_s; \quad a_T = \max(-F_t; 0); \quad a_B = \max(F_b; 0); \\ a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B - a_P^0; \\ b = (S_P^{0k} + R_P^{0k})\Delta x\Delta y\Delta z_P + Dm_P^*; \quad a_P^0 = \frac{\Delta x\Delta y\Delta z_P}{\Delta t}. \end{aligned}$$

Здесь $\Phi_P^{k+1} = \Phi(t + \Delta t, x_l, y_j, z_n)$, k – номер слоя по времени, $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – размеры конечного объема с центром в точке P (рис. 1); центры соседних конечных объемов – по направлениям сторон света N, S, E, W , а также расположенные выше T и ниже B соответственно, а центры соответствующих граней конечного объема – n, s, e, w, t, b, F, D – адвективные и диффузионные потоки через соответствующие грани конечного объема; при аппроксимации источников членов использовалась «линеаризованная»

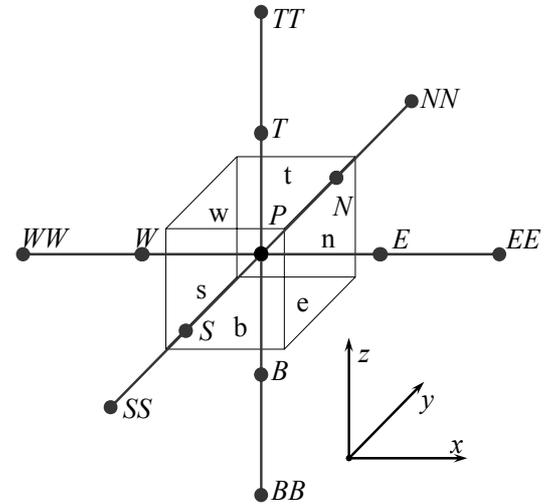


Рис. 1. Вычислительная ячейка

форма записи: $S_P^{k+1} \cong S_P^{0k} + S_P^{1k}\Phi_P^{k+1}$, $R_P^{k+1} \cong R_P^{0k} + R_P^{1k}\Phi_P^{k+1}$, $R_P^{1k}, S_P^{1k} \leq 0$; Dm_P^* содержит смешанные производные на временном слое k и наклоны в MLU-представлении потоков.

При дискретизации уравнений (1) используется явно-неявная разностная схема, которая позволяет решить проблемы, возникающие вследствие нелинейности уравнений (1), и существенно ускорить получение результата благодаря применению эконо-

⁶ Van Leer B. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second Order Scheme // Journal of Computational Physics. 1974. V.14. P. 361-370.

мичного метода прогонки при приемлемом ограничении на величину шага по времени.

Предложенная разностная схема (5) является устойчивой, если величина шага по времени удовлетворяет условию:

$$\Delta t \leq \frac{2\Delta x \Delta y \Delta z_P A_1}{(2A_1)^2 + (B_1)^2}. \quad (6)$$

Здесь: $A_1 = a_E + a_W + a_S + a_N + a_T + a_B$; $B_1 = (a_E - a_W) + (a_N - a_S) + (a_T - a_B)$.

Для тестирования полученной разностной схемы (5) рассматривается двумерная нестационарная задача переноса примеси, поступающей от точечного источника постоянной мощности. Поле ветра имеет постоянные и равные компоненты ($U = V = 5\sqrt{2}/2$ м/с), т.е. поток направлен под углом 45° к граням конечного объема.

На рис. 2. представлены профили концентрации в поперечном сечении вниз по потоку на некотором удалении от источника, полученные с использованием противопотоковой схемы первого порядка, схемы MLU Ван-Лиера второго порядка и схемы Ботта четвертого порядка. Видно, что выбранная в данной работе схема MLU дает результаты, хорошо согласующиеся с данными, полученными по схеме более высокого порядка аппроксимации, и точным решением задачи.

В четвертой главе описана параллельная реализация разработанной вычислительной процедуры решения адвективно-диффузионно-кинетических уравнений на многопроцессорной системе с распределённой памятью.

В работе применена одномерная декомпозиция сеточной области по горизонтальной координате, согласно которой каждому вычислительному процессору предоставляется участок подстилающей поверхности и столб атмосферы над ним. На этапе инициализации каждый процесс получает информацию о физических параметрах своей подобласти (метеорологические данные, параметры подстилающей поверхности, данные об источниках и т.д.) и подготавливается к вычислениям.

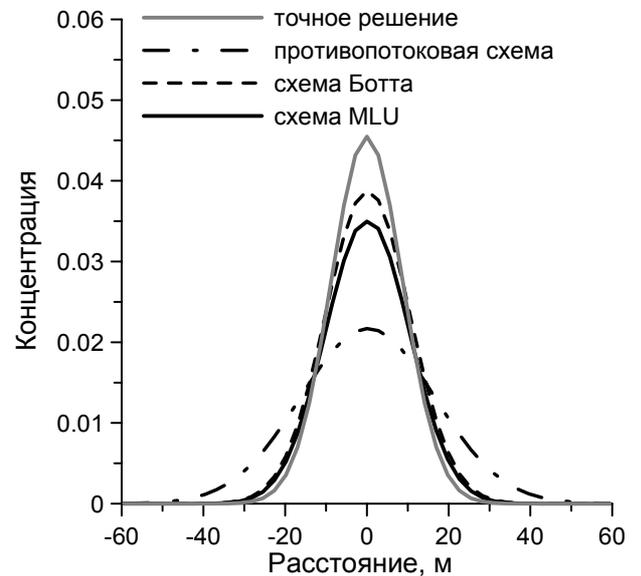


Рис. 2. Сравнение решения, полученного с применением различных методов, с точным решением

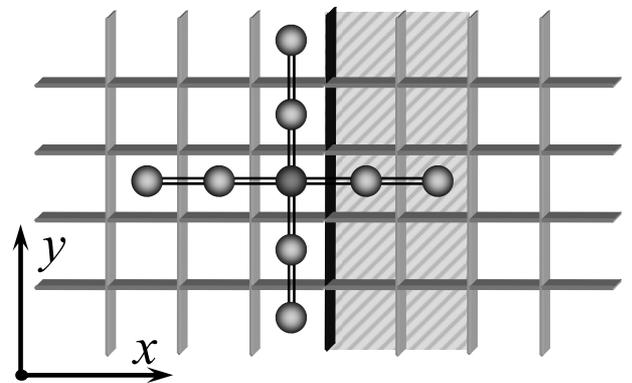


Рис. 3. Расчет приграничных значений с использованием 9-точечного шаблона (9 точек шаблона располагаются в горизонтальной плоскости)

При расчете приграничных значений в силу используемого разностного шаблона процессы нуждаются в данных, которые находятся в локальной памяти соседних процессов (рис. 3), поэтому в течение всего времени расчета соседние процессы активно обмениваются между собой данными из приграничных ячеек.

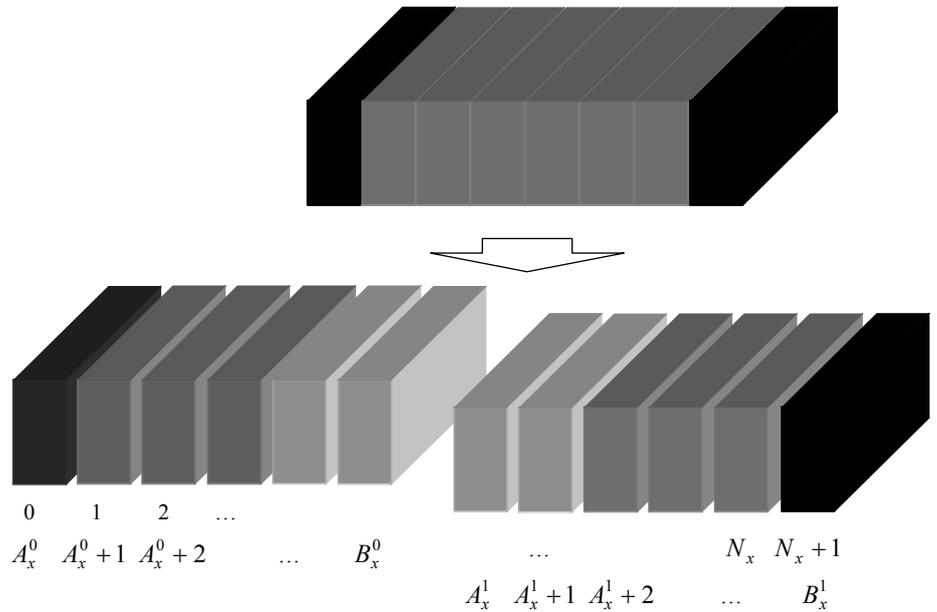


Рис. 4. Схема одномерной декомпозиции параллельной реализации явно-неявного метода на примере двух процессоров

На рис. 4 представлена декомпозиция сеточной области в случае использования двух процессоров (нулевого и первого). Вдоль горизонтального направления OX , по которому производится декомпозиция, выполняется перенумерация узлов сетки следующим образом. Нулевой вычислительный процесс ведет расчеты в подобласти с горизонтальной нумерацией узлов с первого до узла с номером $N_x/2$ (под делением подразумевается целочисленная операция).

Вычислительная область нулевого процесса ограничивается справа двумя сечениями, в которые заносятся данные, рассчитываемые правым соседом (первым процессом). Таким образом, область, с которой работает нулевой процессор, состоит из $N_x/2 + 3$ сечений с нумерацией от $A_x^0 = 0$ до $B_x^0 = N_x/2 + 2$. Аналогичным образом, расчетная область первого процессора, состоит из $N_x/2 + 3$ сечений с нумерацией от $A_x^1 = N_x/2 - 1$ до $B_x^1 = N_x + 1$. При обмене данные, получаемые от нулевого процесса, заносятся в $A_x^1, A_x^1 + 1$ сечения первого процесса. В общем случае, при декомпозиции на p процессов ширина расчетной области для любого k -ого процесса имеет вид:

$$PM = \frac{N_x}{p}. \tag{7}$$

Здесь также подразумевается целочисленное деление. В случае если N_x не делится нацело на число процессоров p , оставшиеся от деления полосы в количестве $N_x - p \cdot PM$ равномерно распределяются по процессам, т.е. часть процессов имеет ширину расчетной области $PM = N_x/p$, а оставшиеся – $PM = N_x/p + 1$. При этом,

$$\text{естественно, выполняется условие: } N_x = \sum_{\mu=0}^{p-1} PM_{\mu}.$$

Вычислительная область μ -ого процесса ($0 < \mu < p - 1$) окаймляется справа двумя сечениями, в которые заносятся данные, рассчитываемые правым соседом ($\mu + 1$ -ым процессом), и двумя сечениями слева, в которые заносятся данные, рассчитываемые левым соседом ($\mu - 1$ -ым процессом).

Алгоритм параллельной реализации явно-неявного метода состоит из следующих шагов:

1. Декомпозиция расчетной области на p процессов; каждый процесс получает информацию о своем номере и об общем количестве процессов; определяет своих соседей слева и справа, ширину своей подобласти по формуле (7).

2. Получение процессорами начального приближения для своей подобласти $\Phi_{l,j,n}^k$.

3. Расчет коэффициентов сеточных уравнений (5) по явным формулам.

4. Прямой ход прогонки. Расчет значений прогоночных коэффициентов в каждом вертикальном столбце α_n и β_n , $n = 2, N_z - 1$ для каждой подобласти.

5. Обратный ход прогонки. Расчет значения функции $\Phi_{l,j,n}^{k+1}$ в области по формуле $\Phi_{l,j,n}^{k+1} = \alpha_n \Phi_{l,j,n+1}^{k+1} + \beta_n$; $n = N_z - 1, \dots, 1$; $k = 0, 1, 2, \dots$

6. Посылка значений сечений $A_x^\mu + 2$, $A_x^\mu + 3$ левому соседу и $B_x^\mu - 3$, $B_x^\mu - 2$ правому соответственно; прием от левого соседа сеточных значений сечений A_x^μ , $A_x^\mu + 1$ и $B_x^{\mu-1}$, $B_x^{\mu-1} - 1$ от правого соседа. В случае отсутствия соответствующего соседа операция пересылки не производится.

7. Если движение по временной оси не прекращено – возврат к п. 3.

8. Если движение по временной оси прекращено, то производится сборка всех сеточных значений $\{\Phi_{l,j,n}^{k+1}\}$ на одном процессе (например, нулевом).

В работе теоретически и практически исследовано ускорение параллельной версии программы. Результаты представлены на рис. 5. Для получения практической оценки ускорения параллельного алгоритма по отношению к последовательному был проведен ряд расчетов на кластере ИОА СО РАН для периода моделирования 1 час на сетке $100 \times 100 \times 100$ узлов с использованием схемы GRS при описании химических и фотохимических взаимодействий.

Получено хорошее согласование расчетных данных (символы) и результатов теоретической оценки (кривая).

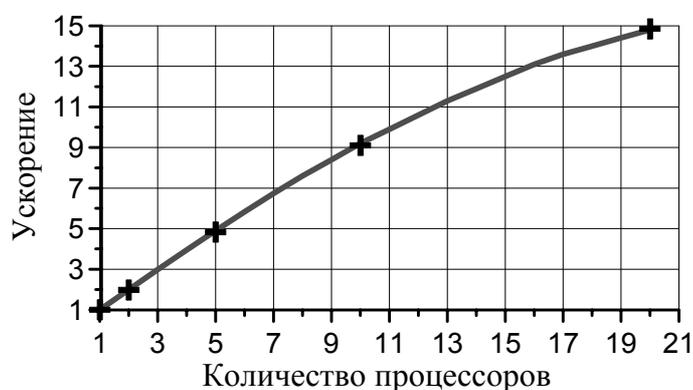


Рис. 5. Ускорение параллельной реализации программы. Линия – результаты теоретической оценки, символы – практические расчеты

Теоретическая оценка получена по формуле:

$$S_p = p / \left(1 + \frac{(p-1)p\kappa}{(2+x/4)M} \right). \quad (8)$$

Здесь S_p – ускорение, p – число используемых процессоров, κ – отношение времени передачи данных между процессами ко времени выполнения арифметической операции, x – число арифметических операций для расчета коэффициентов расчетной схемы (5), M – количество узлов горизонтальной сетки (горизонтальное сечение расчетной области представляет собой квадрат).

Ускорение, достигающее значения 14 при использовании 20-ти процессоров, свидетельствует о хорошей степени параллелизма алгоритма и удачном планировании обменов между процессами.

В пятой главе представлены результаты численного тестирования предложенной численной модели.

Тестовые расчеты турбулентного пограничного слоя производились на задачах моделирования пограничного слоя над однородной поверхностью для различных условий температурной стратификации атмосферы и динамики нестационарного пограничного слоя над однородной поверхностью (Вангара-эксперимент). На рис. 6 показаны результаты сравнения расчетов по предложенной модели с расчетами по модели, использующей градиентные замыкающие соотношения Буссинеска

$$(-\langle cu_i \rangle) = D_T \frac{\partial C}{\partial x_i}, \quad D_T = \alpha \sqrt{kl}$$

коэффициент турбулентной диффузии), и экспериментальными данными, полученными в

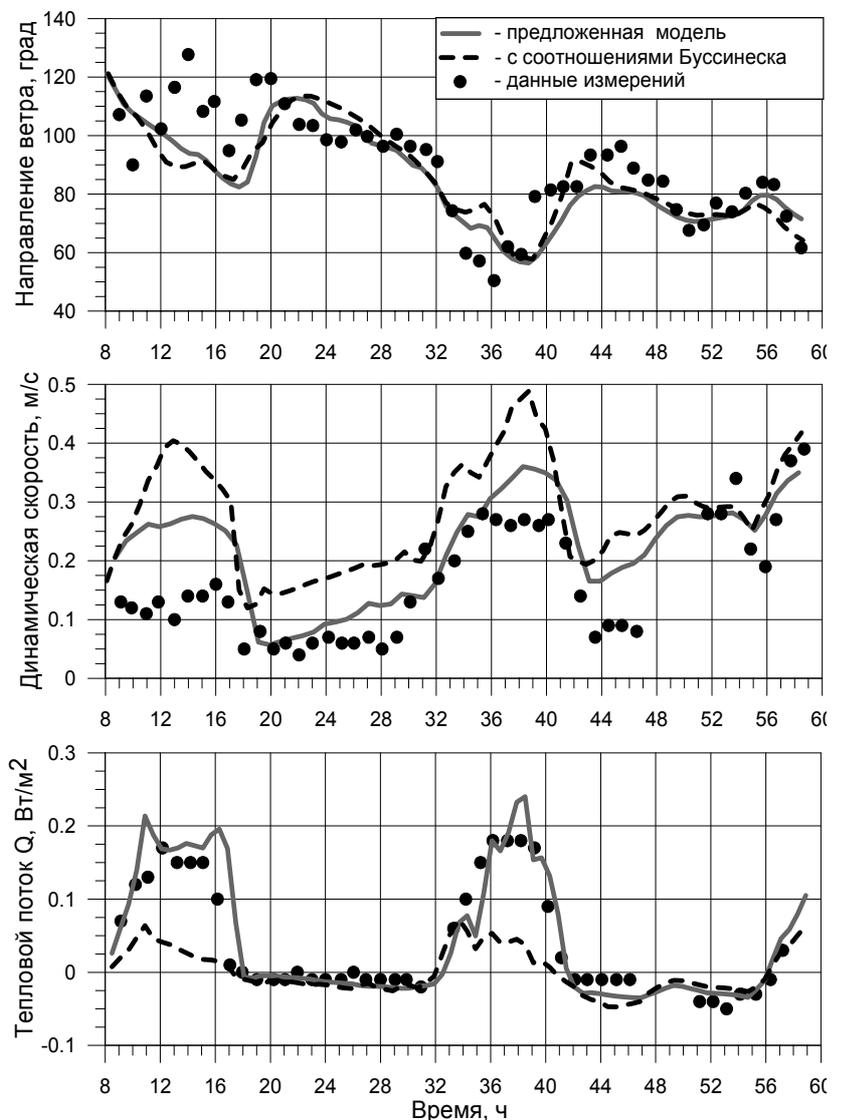


Рис. 6. Изменения направления ветра, динамической скорости конвективного теплового потока на поверхности Земли в течение Вангара-эксперимента (33–34-й день)

ходе Вангара-эксперимента⁷. Показано, что алгебраическая модель более качественно воспроизводит тонкую динамическую и термическую структуру АПС вблизи поверхности, а использование подхода, основанного на понятии турбулентной диффузии, в этом случае неэффективно.

Кроме того, тестирование также осуществлялось на задаче распространения примеси от приподнятого над поверхностью источника непрерывного действия в конвективном пограничном слое.

Распространение примеси от приземного источника, расположенного на высоте $0,067z_i$ (z_i – высота слоя инверсии), показано на рис. 7. Результаты расчетов по предложенной модели хорошо согласуются с результатами эксперимента, а модель Буссинеска (рис. 7,в) в данных условиях не способна воспроизводить тонкую структуру турбулентного рассеяния примеси.

В качестве примеров использования разработанной модели прогнозирования и оценки качества воздуха в диссертации приводятся результаты расчетов суточной и пространственной динамики концентрации некоторых загрязнителей для условий города Томска, моделирование пожара на полигоне токсичных отходов, происшедшего в январе 2003 года, и сравнение с данными мобильных измерений TOR-станции ИОА СО РАН.

На рис. 8 приведено сравнение результатов расчетов, выполненных с использованием предложенной модели переноса примеси (в качестве фотохимической модели применялся механизм GRS), с расчетными данными мо-

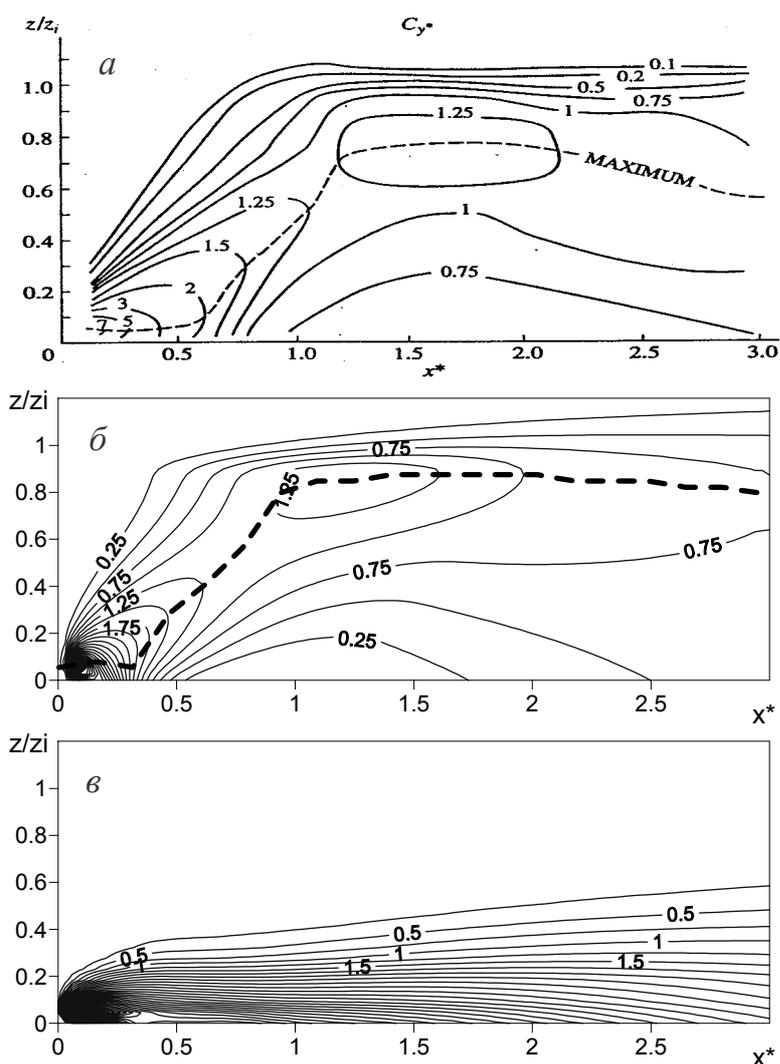


Рис. 7. Изолинии безразмерной концентрации примеси, (а) – результаты эксперимента⁸, (б) – результат моделирования по предложенной модели, (в) – результат моделирования с использованием соотношений Буссинеска

⁷ Yamada T., Mellor G. A Simulation of the Wangara Atmospheric Boundary Layer Data // Journal of the Atmospheric Sciences. 1975. V.32. P. 2309–2329.

⁸ Илюшин Б.Б., Курбацкий А.Ф. Моделирование распространения примеси в конвективном пограничном слое атмосферы // Известия АН. Физика атмосферы и океана. 1996. Т. 32. № 3. С. 307–321.

дели прогноза качества воздуха CAMx⁹ и результатами измерений TOR-станции ИОА СО РАН (<http://www.iao.ru/ru/measure/>) для условий 26-27 мая 2004 года.

Расчетные профили показывают, что приземная концентрация озона начинает расти после восхода солнца и достигает своего максимума после полудня, когда солнечная активность начинает убывать (рис. 8,а). Это обусловлено тем, что в дневное время значительной становится фотохимическая реакция фотолиза диоксида азота с образованием озона и оксида азота, скорость которой превосходит скорость обратной реакции. Такая ситуация приводит к снижению концентрации диоксида азота (рис. 8,б) в дневное время, поскольку уровень его эмиссии невысок и неспособен компенсировать потери. Обе модели хорошо воспроизводят этот эффект, также наблюдаемый в других работах.

В ночное время фотохимические реакции отсутствуют, поэтому существенное значение приобретает реакция взаимодействия оксида азота с озоном с образованием диоксида азота, что обеспечивает накопление последнего в приземном слое атмосферы.

Таким образом, профили приземной концентрации озона коррелируют с профилями уровня солнечной радиации (рис. 8,а,г) с максимальными значениями около полудня. В то время как для концентрации диоксида азота, наоборот, характерны дневные минимумы и ночные максимумы (рис. 8,б).

Характерные ночные максимумы и дневные минимумы концентрации оксида уг-

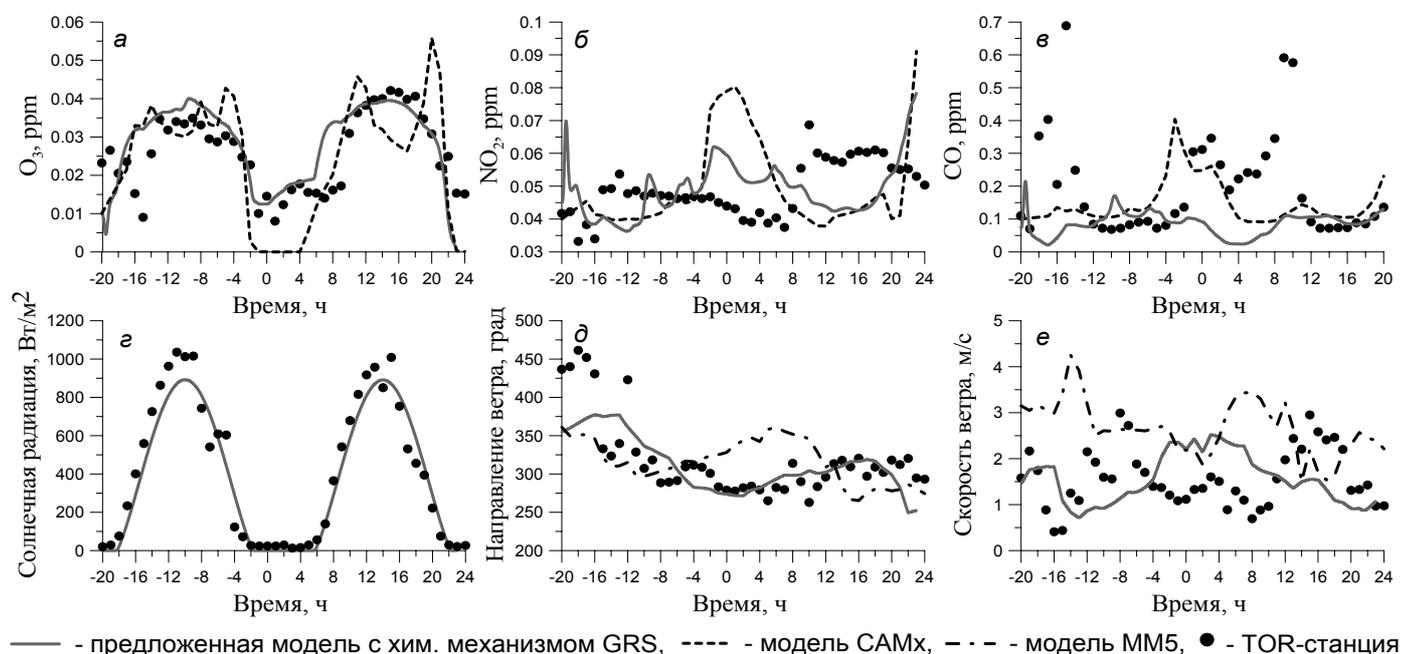


Рис. 8. Сравнения результатов расчетов моделям с данными наблюдений для условий 26–27 мая 2004 года. Отрицательная часть временной оси соответствует первым суткам моделирования, положительная – вторым

⁹ User's Guide. Comprehensive Air Quality Model with Extensions (CAMx) Version 4.20 / Environ International Corporation, Novato, CA, 2005. – Режим доступа: электронный ресурс – http://www.camx.com/files/CAMxUsersGuide_v4_20.pdf.

лерода (рис. 8,в), обусловлены фактором запирающей инверсии. Данный эффект, по всей видимости, в некоторой степени характерен и для диоксида азота (рис. 8,б).

Что касается сравнения по направлению и скорости ветра (рис. 8,д,е), то результаты расчета по нестационарной модели в приближении однородного АПС согласуются с данными измерений для г. Томска чуть лучше, чем расчеты по мезомасштабной модели MM5, используемые как входные данные в системе САМх. Это обусловлено дополнительным усвоением данных измерений структуры АПС в модели.

Эта же модель использовалась для исследования распределения концентрации озона над территорией города Томск и его пригородами. Погодные условия 27 мая 2004 года характеризовались ветром с постоянным северо-западным направлением и скоростью 1–3 м/с, безоблачным небом, что позволяет оценить динамику озона над районами города. На рис. 9,а представлено распределение приземной концентрации озона, соответствующее 10-ти часам 27 мая 2004. В это время уровень фотохимических реакций ещё невысок, а эмиссия примеси от источников протекает интенсивно. Озон вступает во взаимодействие с оксидом азота, поэтому в городе, особенно вдоль автодорог с интенсивным движением (источников NO), концентрация озона наименьшая. Часть примеси с центра города сносится ветром на окраину, поэтому на юго-востоке образуется протяженный шлейф пониженной концентрации озона.

Во второй половине дня, когда интенсивность фотохимических реакций близка к максимальной, ситуация меняется (рис. 9,б). Теперь в переносимой на юго-восток примеси создаются наиболее благоприятные условия для генерации повышенных концентраций приземного озона.

Таким образом, максимальные концентрации озона образуются во второй половине дня на окраине города с его подветренной стороны. При этом протяженность

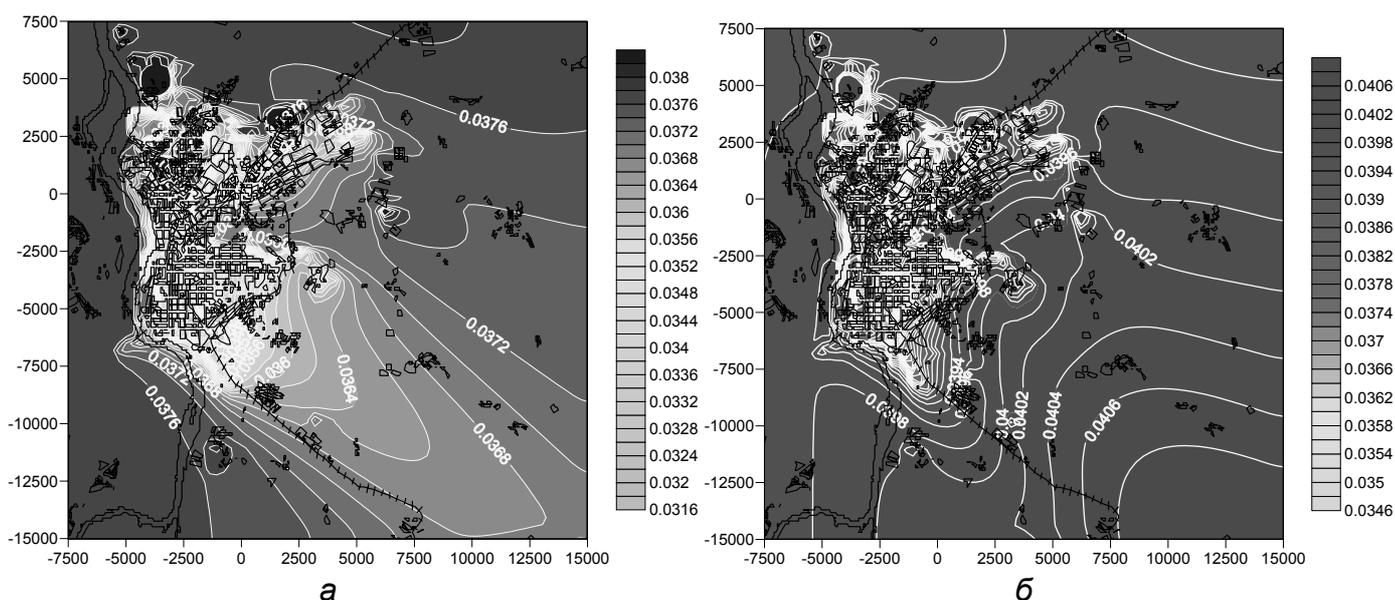


Рис. 9. Распределение концентрации приземного озона (ppm) над г. Томском и его окрестностями, в 10:00 (а) и 16:00 (б) 27 мая 2004

шлейфа определяется скоростью ветра. В условиях, близких к штилевым, область наибольших значений концентрации приземного озона располагается ближе к городу, а с увеличением скорости ветра отодвигается от него [8].

Для условий 11 июля 2005 был проведён расчет по представленной модели, результаты которого сравниваются с данными измерений, выполненными в этот же день сотрудниками TOR-станции ИОА СО РАН при помощи мобильной станции АКВ-2¹⁰ в различных районах города Томска. Получено хорошее качественное согласование результатов моделирования и измерений.

В заключении сформулированы основные выводы по результатам диссертационного исследования:

1. Разработана пространственная модель переноса примеси с учетом образования вторичных загрязнителей. Для замыкания уравнений переноса примеси предложена явная анизотропная схема. Выведены и включены в модель алгебраические соотношения для турбулентных напряжений и потоков. Для оценки и прогнозирования загрязнения атмосферы вторичными загрязнителями адаптированы три упрощенных схемы химических реакций. Необходимые метеорологические параметры рассчитываются с использованием нестационарной модели для однородного АПС либо на основе современной мезомасштабной метеорологической модели (MM5, WRF, моделирующей системы ТГУ–ИОА).

2. Для численного решения задачи применен метод конечного объема и получена явно-неявная разностная схема со вторым порядком аппроксимации дифференциальных уравнений по пространственным координатам. Разработана эффективная вычислительная процедура для решения уравнений переноса с учетом химических превращений компонент примеси, позволяющая получать решения уравнений без привлечения специальных методов для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

3. Разработана эффективная параллельная реализация явно-неявного конечно-разностного метода решения адвективно-диффузионных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределённой памятью. Создана параллельная программа, использующая одномерную декомпозицию сеточной области по одной из горизонтальных координат. Теоретический анализ ускорения и результаты применения параллельной программы на кластере ИОА СО РАН показали высокую эффективность организации параллельных вычислений, обеспечивающую 14-кратное ускорение получения результатов на 20-ти процессорах по сравнению с однопроцессорным вариантом.

4. Проведено тестирование предложенной численной модели для исследования

¹⁰ Мобильная станция АКВ-2 и её применение на примере города Томска / М.Ю. Аршинов, Б.Д. Белан, Д.К. Давыдов и др. // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т. 18. № 8. С. 643–648.

загрязнения атмосферы города с учетом образования примесей вторичной эмиссии, опирающейся на оригинальную схему замыкания уравнения переноса и алгебраические соотношения для турбулентных потоков количества движения, тепла и массы. Выявлено, что применяемые для замыкания моделей АПС и переноса примеси градиентные соотношения Буссинеска и коэффициенты турбулентной диффузии могут быть использованы лишь при условиях нейтральной и устойчивой стратификации пограничного слоя. В условиях нестационарного развития пограничного слоя и в конвективном АПС предпочтительным является применение явной анизотропной схемы замыкания.

5. Полученные результаты по моделированию турбулентного пограничного слоя хорошо согласуются с результатами метеорологических наблюдений, с данными контроля качества атмосферного воздуха, с результатами фундаментальных экспериментов, а также с результатами расчетов по модели качества воздуха CAMx версии 4.20 и мезомасштабным метеорологическим моделям (MM5, WRF, моделирующая система ТГУ–ИОА) для условий города Томска.

Основные публикации по теме диссертации:

1. Беликов Д.А. Исследование образования вторичных загрязнителей в атмосфере города с привлечением алгебраической модели турбулентного переноса примеси // Тезисы XII рабочей группы "Аэрозоли Сибири". – Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН. – 2005. – С. 36.
2. Беликов Д.А. Методы параллельных вычислений в задачах мониторинга качества атмосферного воздуха // Третья Сибирская школа-семинар по параллельным вычислениям. – Томск: Изд-во Том. ун-та. – 2006. – С. 77–85.
3. Беликов Д.А., Старченко А.В. Моделирование переноса примеси в черте города // Материалы 3-ей школы-семинара молодых ученых «Современные проблемы физики и технологии». – Томск: Изд-во Том. ун-та. – 2002. – С. 182–185.
4. Беликов Д.А., Старченко А.В. Моделирование турбулентного переноса примеси в пограничном слое атмосферы // Исследования по баллистике и смежным вопросам механики. – Томск: Изд-во Том. ун-та. – 2002. – Вып.5. – С. 67–68.
5. Беликов Д.А., Старченко А.В. Моделирование распространения промышленных выбросов в атмосфере // Материалы международной конференции "ENVIROMIS-2002". – Томск: Изд-во Том. ЦНТИ. – 2002. – С. 115–120.
6. Беликов Д.А., Старченко А.В. Численное исследование влияния погодных условий на образование вторичных загрязнителей в атмосфере города // Труды Международной Конференции «Математические Методы в Геофизике ММГ-2003». – 2003. – С. 465–469.

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. Беликов Д.А., Старченко А.В. Исследование сценариев загрязнения атмосферы города примесями вторичной эмиссии // Вычислительные технологии. – 2005. – Т. 10, ч.2. – С. 99–105.
9. Беликов Д.А., Старченко А.В. Применение высокопроизводительных вычислительных систем к исследованию образования вторичных загрязнителей вблизи индустриального центра // Труды Всероссийской научной конференции «Научный сервис в сети Интернет: технологии распределенных вычислений». – Изд. Моск. ун-та. – 2005. – С. 28–31.
10. Старченко А.В., Беликов Д.А. Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха // Оптика атмосферы и океана. — 2003. – Т. 16, № 7. – С. 657–665.
11. Старченко А. В., Беликов Д. А., Есаулов А. О. Численное моделирование влияния метеорологических параметров на качество атмосферного воздуха в городе // Труды конференции ENVIROMIS 2002. – Томск: Изд-во Томского ЦНТИ. – 2002. – С. 142–151.
12. Belikov D.A., Starchenko A.V. The computational investigation of the influence of weather conditions on ozone formation in urban atmosphere // Abstracts of NATO Advanced Study Institute "Flow and Transport Processes in Complex Obstructed Geometries: from cities and vegetative canopies to industrial problems". – Kiev. – 2004. – P. 54–56.

