

Комплексы программ для высокопроизводительных вычислений на кластерных системах в задачах математического моделирования состояния окружающей среды

Шатров А. В., д.ф.-м.н., зав.каф. ММЭ, ВятГУ, г. Киров,

1. Постановка задач математического моделирования процессов переноса загрязняющих веществ (ЗВ)

1.1 Процессы переноса ЗВ в атмосферном пограничном слое

Исходная математическая модель представляет собой систему дифференциальных уравнений в частных производных в приближении пограничного слоя вязкого газа с учетом эффективного турбулентного переноса. Уравнения составлены для описания движения атмосферного воздуха и процессов переноса загрязнений в виде концентрации аэрозольных частиц как естественного (пыль, пыльца растительного происхождения) так и техногенного типа (выбросы промышленных предприятий, остатки горения площадных пожаров). Вывод уравнений переноса основан на теории «мелкой воды», т.е. предполагается, что размеры расчетной области $\{ L \times L \times l \}$, где L – сторона основания параллелепипеда, вырезанного из атмосферного слоя, l – высота этого параллелепипеда, таковы, что $L \gg l$. Данный подход позволяет асимптотически описать средние по тонкому слою скорости переноса атмосферного воздуха, концентрацию ЗВ в слое и выпавших осадков на поверхности расчетной области. Полное описание постановки задачи и алгоритма решения приведено в [1].

1.2. Математическая модель переноса ЗВ в пойменных течениях паводковых вод

Математическая модель паводковых течений представлена уравнениями Сен-Венана в приближении мелкой воды [2]. Эта система представляет собой систему двумерных уравнений гидродинамики жидкости, записанных для водной среды, с учетом граничных условий на поверхностях раздела воздух-вода и вода-дно, открытой границе и боковых твердых поверхностях. Основные обозначения показаны на Рис.1

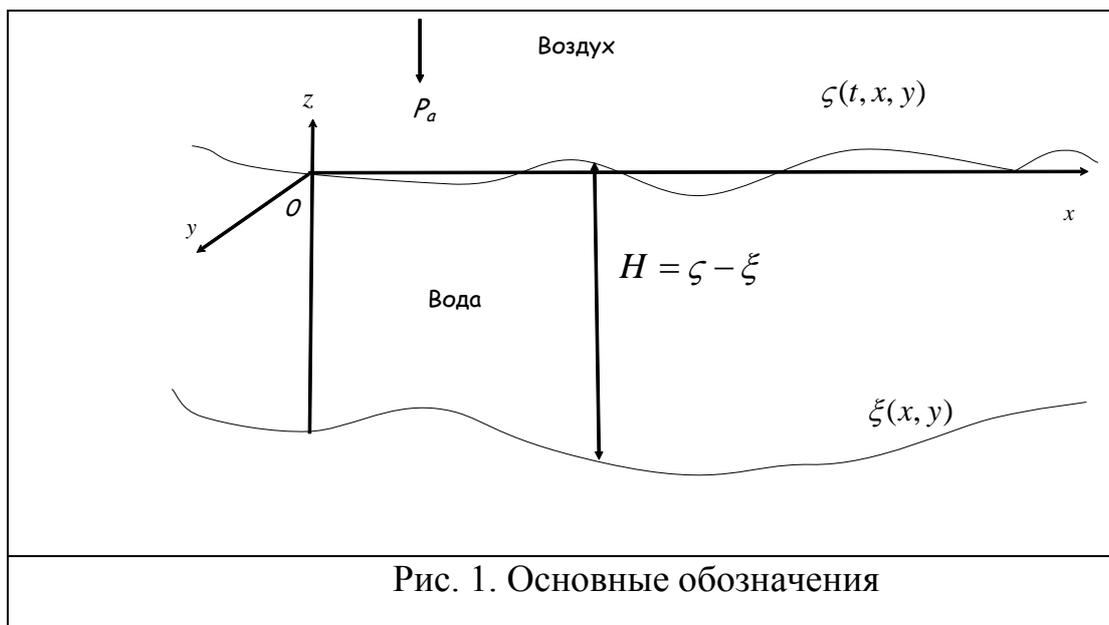


Рис. 1. Основные обозначения

Уравнения для переноса-диффузии ЗВ записывается в виде системы дифференциальных уравнений в частных производных для каждой фракции ЗВ с учетом плотности распределения источников ЗВ. Для формирования расчетной области используется ГИС с достаточно подробной расчетной сеткой, позволяющей учитывать особенности паводковых течений. Размеры двумерной расчетной области составляют от 1 до 10^2 кв. км при размерах ячейки конечно-разностной сетки от 0,25 до 25 кв. м.

1.3 Математическая модель фильтрации подземных вод

Рассматривается задача о прогнозировании запасов подземных вод при эксплуатации существующих и планируемых к сооружению скважин для водоснабжения крупных городов. Задача состоит в том, чтобы рассчитать изменения уровней подземных вод в зависимости от времени. Расчетная область разбивается на прямоугольные блоки. В предположении наличия единственного водоносного пласта, постоянства уровня свободной поверхности и совершенства всех водоемов составляются балансовые уравнения для плановых потоков в приближении законов Дарси-Дюпюи и Дарси-Буссинеска [3].

2. Реализация численных расчетов

Для численного решения поставленных задач используется явная схема решения сеточных конечно-разностных уравнений. Комплексы программ реализованы в блочной структуре. Основная программа для каждой модели, как правило, выполнена в двух реализациях: последовательный код и

параллельный. Программы расчета последовательного кода используются для отладки расчетов на сетках меньших размеров и выполнены на языке Фортран -90 (доступная свободная версия бесплатно распространяется под названием GNU Fortran в составе пакета gcc). Для компиляции исходного текста программы пригоден любой компилятор языка Фортран-90. В Windows должна быть установлена система MinGW (<http://sourceforge.net/projects/mingw/files/>) и в ней пакет gcc. Программы расчета параллельного кода реализованы на языке Intel Fortran 12 in Packet Intel Cluster Studio for Linux в среде Open MP и реализуется в OS Linux Red Hat 7.0, установленной на кластерном суперкомпьютере Вятского государственного университета HP HPC Enigma X000. Использование кластерных систем для расчета реальных задач является необходимым условием ввиду их большой размерности и большой длительности времени счета, обусловленной выбором явных схем численного расчета.

Для задания данных формируются файлы данных. Так, например, для задачи переноса ЗВ в атмосферном пограничном слое в качестве исходных данных вводятся мощности и координаты расположения источников загрязнения, скорости ветра и параметры, характеризующие диффузию и темп выпадения загрязнений на земную поверхность. С помощью геоинформационной системы формируется массив данных о поверхности: коэффициенты температурного взаимодействия воздушной среды с поверхностью, типы и виды поверхности с точки зрения неоднородности. Предусмотрена возможность ступенчатого изменения по времени мощности источников и направления ветра. Выходными данными являются массивы концентраций загрязнения в узлах сетки, выводимые через заданные интервалы времени.

3. Визуализация полученных результатов.

Визуализация полученных результатов обрабатывается на основе расчетных выходных данных независимо от основной программы. Рассмотрим процедуру визуализации на примере модели переноса ЗВ в атмосферном слое. Полученные массивы расчетных данных далее обрабатываются отдельной утилитой, разработанной на основе свободно распространяемой библиотеки DISLIN, преобразующей их в изображения в формате GIF. Для представления результатов распространения примеси составлены вспомогательные файлы данных inputP0.dat, inputP1.dat, и т.п., в которых содержатся данные о концентрациях на поверхности и в приземном слое. Данные файлы затем обрабатываются программой визуализации в

анимационном режиме. Для этого достаточно запустить файл animate (специальное приложение в формате jpeg, свободно распространяемое ПО) или открыть файлы inputP0.dat, inputP1.dat и запустить их клавишей Enter. Эта работа, не требующая особых затрат машинного времени, выполняется на обычных персональных компьютерах.

Созданные программные продукты защищены авторскими правами и на них оформлены свидетельства регистрации программ для ЭВМ.

Литература

1. Шатров А.В. Шварц К.Г. Численное моделирование атмосферных влияний мезомасштабных процессов переноса примесей в окрестности г. Кирова .- Вычислительные технологии в механике сплошных сред №3, 2010, с. 117-125
2. Van Rijn, L.C., 1990. Principles of fluid flow and surface waves in rivers, estuaries, seas and oceans. Aqua Publications, The Netherlands, 1990
3. Ломакин Е.А., Мироненко В.А., Шестаков В.М. Численное моделирование геофильтрации. - М.: Недра, 1988.- 228 с.