

щепления жиров. Выработанная же методика повышения термостабильности молекул впоследствии может быть применена к другим ферментам — например, к высокоактивным антиоксидантам или «расщепителям» пластиков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Khechinashvili N.N., Fedorov M.V., Kabanov A.V., Monti S., Ghio C., Soda K.* Side chain dynamics and alternative hydrogen bonding in the mechanism of protein thermostabilization // *J. Biomol. Struct. Dyn.* 2006. V.24. P. 255–262.
2. *Калугин М.Д., Теплухин А.В.* Изучение взаимодействия кофеина с ДНК в водном растворе методом Монте-Карло с использованием параллельных вычислений // *Ж. структурной химии.* 2009. Т.50, № 5. С.878–889.
3. *Теплухин А.В.* Многопроцессорное моделирование гидратации мезоскопических фрагментов ДНК // *Математическое моделирование.* 2004. Т. 16, №11. С.15–24.

Применение суперкомпьютеров для определения городских районов — загрязнителей атмосферного воздуха



31 Применение суперкомпьютеров для определения городских районов — загрязнителей атмосферного воздуха

Прогноз и оценка качества атмосферного воздуха важны как для решения задач охраны окружающей среды, так и для предотвращения чрезвычайных ситуаций, связанных с выбросом загрязняющих веществ в атмосферный воздух. Такие исследования позволяют не только отслеживать содержание примесей в воздухе, но и определять источники выброса загрязняющих веществ и оптимизировать размещение промышленных предприятий с целью уменьшения уровня загрязнения.

В настоящее время проблема охраны окружающей среды становится одной из важных задач науки, что связано с возрастающими темпами технического прогресса во всех странах мира. Ухудшение качества атмосферного воздуха происходит вследствие выбросов в атмосферу отходов промышленных предприятий и выхлопных газов автотранспорта, что приводит к ухудшению здоровья населения, а в глобальном масштабе — к изменению климата на планете.

Избежать поступления загрязняющих веществ в атмосферу невозможно, но постоянный контроль качества воздуха позволит обеспечить безопасный уровень воздействия на атмосферу. Одним из способов оценки уровня загрязнения воздуха является контроль интенсивности выбросов вредных веществ с помощью постов наземных наблюдений. Но даже разветвленная сеть таких пунктов наблюдения не всегда может предоставить достоверную информацию для природоохранных служб. Большую помощь здесь может оказать применение методов математического моделирования. Но при разработке и исследовании математических моделей возникают некоторые проблемы, а именно: большое количество факторов, влияющих на изучаемые процессы, большие размеры исследуемого объекта, что требует высокой степени детализации при построении математической модели и вычислительной программы. Все эти факторы приводят к большим временным затратам для программных кодов, реализующих рассматриваемые математические модели, и вынуждают привлекать высокопроизводительную вычислительную технику с параллельной архитектурой, которая позволяет сокращать время расчета.

Математические модели, описывающие распространение атмосферных примесей, обычно представляются двумя классами задач. Первый — это решение «прямых» задач, когда по известным характеристикам источников примеси требуется найти поле ее концентрации. Второй — решение «обратных» задач, когда по информации о концентрации примеси, измеренной в ряде контрольных точек, требуется найти тип, координаты и мощность ее источников.

Математическая постановка обратной задачи переноса примеси получается с использованием метода Марчука [1], который основан на решении сопряженных уравнений и двойственного представления функционала от концентрации примеси. Сопряженная постановка задачи, в свою очередь, получается непосредственно из прямой задачи, а именно: адвективно-диффузионное уравнение, описывающее перенос примеси в прямой задаче, умножается на некоторую сопряженную функцию и интегрируется по времени и пространству. Сопряженные задачи решаются численно с помощью метода конечного объема и разностных аппроксимаций на равномерной сетке.

АВТОРЫ:

А.В. Старченко — докт. физ.-мат. наук, зав. кафедрой, Томский государственный университет;
e-mail: starch@math.tsu.ru

Е.А. Панасенко — канд. физ.-мат. наук, ст. преподаватель, Томский государственный университет;
e-mail: ea@math.tsu.ru

При решении обратной задачи определения характеристик источников одновременно решаются несколько однотипных задач, поэтому целесообразно при таких условиях проведения численного моделирования привлекать высокопроизводительную вычислительную технику.



Рис. 1. Станция АКВ-2

Численное решение обратной задачи переноса примеси с целью идентификации городских районов-загрязнителей осуществляется следующим образом: в качестве входных параметров используются данные измерений концентрации монооксида углерода, которые получены при помощи мобильной метеостанции АКВ-2 [2] (рис. 1). Область исследования имеет площадь размером 50×50 км, в ее центральной части находится городская территория (рис. 2).



Рис. 2. Область исследования с нанесенной горизонтальной сеткой (• – источники примеси)

Распараллеливание метода решения обратной задачи возможно по физическим процессам (функциональная декомпозиция) и с использованием геометрической декомпозиции.

Распараллеливание по физическим процессам метода численного решения задачи по определению параметров источников загрязнения производится с использованием принципа «master–slave». При использовании этого принципа один из процессоров системы определяется как ведущий, а остальные – как ведомые. Ведущий процессор согласует работу и взаимодействие ведомых процессоров. Каждый процессор решает одну сопряженную задачу.

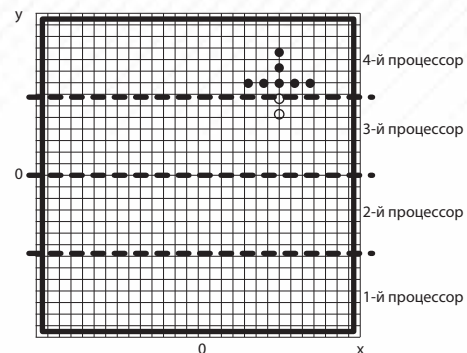


Рис. 3. Одномерная декомпозиция (четырёхпроцессорное вычислительное устройство)

Геометрическая декомпозиция расчетной области при распараллеливании решения обратной задачи переноса примеси осуществляется с использованием одномерной декомпозиции. При таком способе декомпозиции каждому процессору выделяется часть области исследования и столб атмосферы над ней. Перед началом вычислений каждый процессор получает информацию о физических параметрах своей подобласти и подготавливается к вычислениям. При этом во время вычислений каждый процессор

обменивается с соседними процессорами данными, которые были получены при его выполнении. Обмен происходит вдоль вертикальных границ подобластей (рис. 3) [3].

В табл. 1 представлены значения времени выполнения параллельной программы, реализующей функциональную и геометрическую декомпозиции при решении обратной задачи переноса примеси при различном количестве измерений концентрации выброса.

Таблица 1

Время счета (сек) для функциональной и геометрической декомпозиции

Количество измерений, N	Число процессоров	Время счета (функциональная декомпозиция), сек	Время счета (геометрическая декомпозиция), сек
5	5	323	627
10	10	337	643
20	20	354	743

Рассмотренные выше подходы создания параллельных версий алгоритмов решения обратной задачи переноса примеси показали неплохие результаты по эффективности, однако количество используемых активных процессоров в них ограничено: в случае функциональной декомпозиции – числом проведенных измерений, а при одномерной геометрической декомпозиции – размером вычислительной сетки и выбранным сеточным шаблоном. Поэтому был пред-

ложен комбинированный метод распараллеливания, в котором предлагается для увеличения в расчетах количества используемых активных процессоров совместить применение функциональной и геометрической декомпозиции. Его применение показало хорошую масштабируемость параллельной программы до 400 процессоров, т.е. обеспечение эффективности не ниже 50% при увеличении числа используемых процессоров при неизменных остальных параметрах решаемой задачи, что наглядно видно из табл. 2.

Таблица 2

Время счета для комбинированного метода

Количество измерений, N	Время счета (последовательная программа), сек	Число процессоров	Время счета (комбинированный метод), сек
5	1626	100	33
10	3922	200	42
20	7799	400	59

Предлагаемая методика решения обратных задач с использованием суперкомпьютеров прошла апробацию для реальных городских условий. Предсказанная численно картина соответствует расположению основных городских районов, ответственных за выброс в атмосферу CO, а также дает достаточно хорошую оценку уровня интенсивности выбросов (рис. 4).

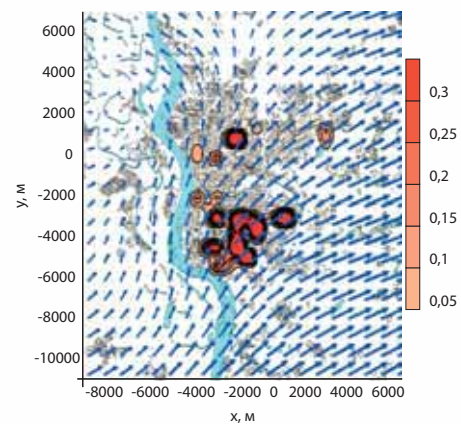


Рис. 4. Результаты решения обратной задачи переноса примеси для определения городских районов-загрязнителей (→ – векторное поле скорости)

Все приведенные вычисления были проведены на вычислительном кластере Томского государственного университета «СКИФ Cyberia».

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и научнотехнической программы «СКИФ-ГРИД».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.
2. Аршинов М.Ю. и др. Мобильная станция АКВ-2 и ее применение на примере города Томска // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т. 18, № 8. С. 643–648.
3. Панасенко Е.А., Старченко А.В. Применение многопроцессорной вычислительной техники для численной реализации метода решения обратных задач переноса примеси с целью определения источников мгновенного выброса в чрезвычайных ситуациях // Вестник Новосибирского гос. ун-та. Серия: Информационные технологии. 2009. Т. 7, № 4. С. 108–118.