МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Механико-математический факультет

ДЕВЯТАЯ СИБИРСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ПАРАЛЛЕЛЬНЫМ И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫМ ВЫЧИСЛЕНИЯМ

Томск, 10–12 октября 2017 года

Сборник статей

Под редакцией
д-ра физ.-мат. наук, профессора А.В. Старченко

Томск
Издательский Дом Томского государственного университета
2017

DOI: 10.17223/9785946216531/3

Параллельная реализация микромасштабной математической модели движения воздушных масс и переноса примеси*

Е.А. Данилкин, Л.Е. Грудович, Д.В. Лещинский

Томский государственный университет, Томск
ugin@math.tsu.ru

За последние два десятилетия произошел большой скачок в развитии вычислительной техники, на смену постоянному увеличению тактовой частоты процессора вернулись к идеям параллельной и конвейерной обработки данных. Появились доступные многоядерные процессоры и многопроцессорные компьютеры. И естественно возникает вопрос, а хорошо ли используемые на практике численные методы переносятся на новые вычислительные машины, заложен ли в них параллелизм? В работе рассмотрена параллельная реализация микромасштабной математической модели движения воздушных масс и переноса примеси в уличных каньонах. Параллельная реализация выполнена для системы с распределенной памятью и опирается на принцип геометрической декомпозиции сеточной области и использование библиотеки MPI при организации обмена сообщениями между параллельными процессами.

Ключевые слова: моделирование турбулентности, уличный каньон, перенос примеси.

Население планеты в основном проживает на урбанизированных территориях и процесс урбанизации продолжается. Это приводит к загрязнению атмосферного воздуха над городами и воздействует на окружающую среду и здоровье человека. Среди всех антропогенных источников загрязнения атмосферного воздуха наиболее значительную долю загрязнения в пределах городских территорий вносит автотранспорт.

В связи с постоянным ростом количества автотранспорта увеличивается и уровень загрязнения приземного слоя атмосферы выхлопными газами. Для понимания процессов переноса выбросов автотранспорта, происходящих внутри городских кварталов, наряду с приборным контро-

* Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-1723.2017.5 и при поддержке РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 16-41-700178 р_а.

лем состава атмосферного воздуха необходимо развитие систем мониторинга состояния окружающей среды, основанных на методах математического моделирования. Такие системы позволят предсказывать детальную структуру турбулентного течения воздушных масс и концентрации газовых составляющих примеси для различных метеоусловий и конфигураций городской застройки.

В настоящее время моделирование турбулентных течений в окружающей среде осуществляется, в основном, с использованием осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (Reynolds Averaged Navier-Stokes) и переноса скалярных величин, для которых требуется решить проблему замыкания путем привлечения полуэмпирических моделей различного уровня сложности. Этот подход является значительно менее трудоемким с вычислительной точки зрения в сравнении с набирающими популярности LES и DES подходами [1–3], однако также нуждается в высокопроизводительных вычислительных алгоритмах.

Таким образом, целью данной работы является разработка и верификация двухмерной математической модели турбулентного течения и переноса примеси и численного метода ее решения адаптированного на использование многопроцессорной вычислительной техники. Основное назначение разрабатываемой модели – выполнение оперативных прогнозов и проведение параметрических расчетов.

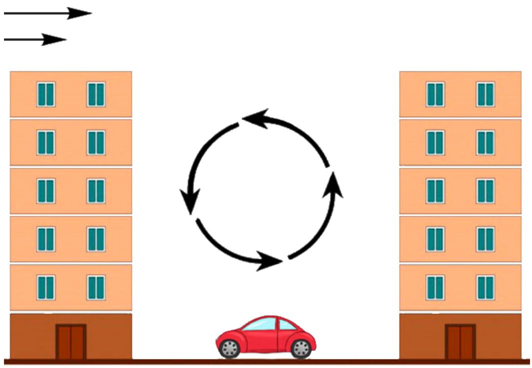

Рис. 1. Иллюстрация физической постановки задачи

Физико-математическую постановку задачи можно описать следующим образом. Рассматривается двухмерное нестационарное турбулентное движение в приземном слое воздуха над неоднородной подстилающей поверхностью с элементами крупномасштабной шероховатости. Элементы шероховатости представляют собой неподвижные непроницаемые для потока прямоугольные препятствия (здания) (рис. 1). В области исследование допускается расположение точечных и линейных источников примеси постоянной интенсивности.

Математическая модель включает в себя осреднённые по Рейнольдсу уравнение неразрывности и уравнения Навье-Стокса [1]:

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_i} = 0; \tag{1}$$

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial \langle \mathrm{p} \rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\vartheta \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\langle u_i' u_j' \rangle; \tag{2}$$

Здесь $\langle u_i \rangle$ – осредненные проекции вектора скорости на оси координат, $\langle \mathrm{p} \rangle$ – давление, ρ – плотность, ϑ – кинематическая вязкость воздуха, $\langle u_i' u_j' \rangle$ – тензор напряжений Рейнольдса, $i, j = 1{,}2$. Ось Ox_2 направлена вертикально вверх. Замыкание системы уравнений (1)–(2) проводится с использованием двухпараметрической «k-ε» модели и градиентно-диффузионной гипотезы Буссинеска [1]. Поле концентрации загрязняющих веществ определяется из решения уравнения переноса примеси, которое имеет вид:

$$\frac{\partial \langle \mathrm{c} \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle u_j \rangle \langle \mathrm{c} \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\frac{\vartheta}{Sc} + \frac{\vartheta_T}{Sc_T}\right)\frac{\partial \langle \mathrm{c} \rangle}{\partial x_j}\right) + \mathrm{S}; \tag{3}$$

где $\langle \mathrm{c} \rangle$ - осредненное значение концентрации примеси, S – функция, описывающая распределение точечных и линейных источников примеси, Sc – число Шмидта, ϑ_T – турбулентная вязкость (определяется из «k-ε» модели), Sc_T – турбулентное число Шмидта.

При расчёте течений вокруг зданий использовался метод фиктивных областей, суть которого заключается в том, что значения векторных и скалярных величин в области преграды равны нулю, и на границах фиктивных конечных объемов нет потоков диффузии [1]. Для задания значений турбулентных параметров вблизи подстилающей поверхности и поверхности элементов шероховатости используется метод пристеночных функций [1].

Дискретизация дифференциальной задачи осуществляется методом конечного объема с использованием разнесенной сетки [4]. При построении конечно объемной сетки используется алгоритм, в рамках которого вся область исследования делится на подобласти и для каждой области задается свой признак: либо это несжимаемая среда (1), либо непроницаемое препятствие (9). При этом координаты границ подобластей подбираются так, чтобы разграничить (выделить) в отдельные подобласти непроницаемые участи внутри области исследования. На рис. 2 изображен пример области исследования, представляющий собой двумерную модель уличного каньона, где нижний правый и нижний левый квадраты представляют собой здания.

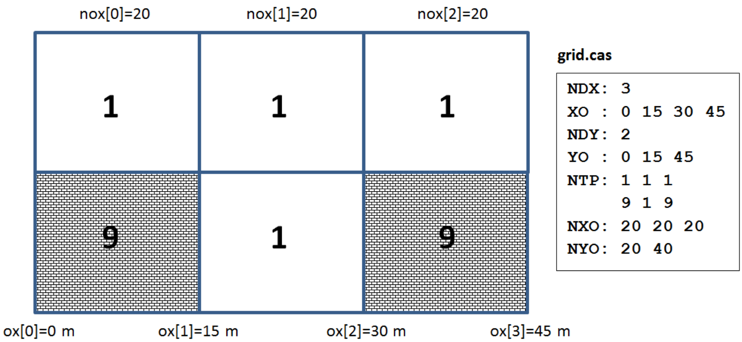

Рис. 2. Разделение области исследования на подобласти и пример содержания файла grid.cas для рассматриваемой области

Построение общей конечно объемной сетки осуществляется автоматически по данным из внешнего файла, который имеет следующую структуру. В первой строке указано общее число подобластей «NDX» в направлении оси OX (рис. 2). В следующей строке указаны «NDX+1» действительных чисел, являющихся координатами начала подобластей в направлении оси OX. Следующие две строки задают число подобластей в направлении оси OY и их координаты. Такие образом, область исследования покрывается набором смежных прямоугольников (подобластей). Далее в файле располагается матрица размера NDX* NDY, в которой заданы признаки подобластей: 1 – несжимаемая среда; 9 – непроницаемое препятствие. И в заключение следуют два массива целых чисел длиной NDX и NDY, в которых содержится число узлов в каждой подобласти в направлении осей OX, OY соответственно. На основании считанных данных строится единая глобальная сетка (сеточные линии), допускающая сгущения в выделенных подобластях, представляющих наибольший интерес для исследования или требующих высокого разрешения с точки зрения моделируемых процессов.

После того как конечно объемная сетка построена, каждое дифференциальное уравнение интегрируется по каждому конечному объему. При дискретизации уравнений движения для компонент скорости и уравнений переноса использовалась явная аппроксимация по времени и противопотоковая схема для конвективных слагаемых. Таки образом, для уравнений движения и переноса получены явные разностных формулы, которые хорошо поддаются распараллеливанию [1].

При этом уравнения движения можно решать только в том случае, если поле давления задано или каким-либо образом найдено. Если при решении использовалось неверное поле давления, найденное поле скорости не будет удовлетворять уравнению неразрывности. Для согласования полей скорости и давления в гидродинамической части модели используется схема предиктор-корректор, в соответствии с которой явная схема для уравнения движения выполняет функцию предиктора, а коррекция поля скорости выполняется на основе решения уравнения Пуассона для поправки давления методом Зейделя с красно-черным упорядочиванием [1].

Тестирование вычислительного алгоритма проведено на задаче исследования течения в начальном участке плоского канала при низких числах Рейнольдса. Рассматривался ламинарный поток вязкой несжимаемой жидкости между двумя пластинами. Профиль скорости в начальном участке плоского канала сравнивался с аналитическим решением, полученным С.М. Таргом [5]. На рис. 3 представлено сравнение аналитического и численного решения, а именно сравнение осевой скорости в различных сечениях канала. Получен хороший уровень соответствия результатов численного моделирования и аналитического решения.

Рис. 3. Распределение осевой скорости при аналитическом и численном решении в различных сечениях канала

В качестве основного подхода распараллеливания выбрана геометрическая декомпозиция сеточной области. В рассматриваемом случае возможны два различных способа разделения значений сеточной функции по вычислительным узлам – одномерная или ленточная схема, двухмерное или блочное разбиение узлов вычислительной сетки.

На этапе декомпозиции, когда производится разделение данных на блоки для построения параллельного алгоритма, каждому процессорному элементу вместе с выделенной сеточной подобластью распределялись все значения сеточной функции, принадлежащие этой подобласти. На этапе планирования коммуникаций, когда устанавливаются связи между блоками, расчеты в которых выполняются параллельно, из-за используемого шаблона явной разностной схемы для вычисления очередного приближения в приграничных узлах каждой подобласти потребовались значения сеточной функции с соседнего граничащего процессорного элемента. Для этого на каждом процессорном элементе создавались фиктивные ячейки для хранения данных с соседнего процессорного элемента и организовывались пересылки этих граничных значений, необходимых для обеспечения однородности вычислений [1] (рис. 4). Для организации обмена сообщениями использовалась библиотека MPI.

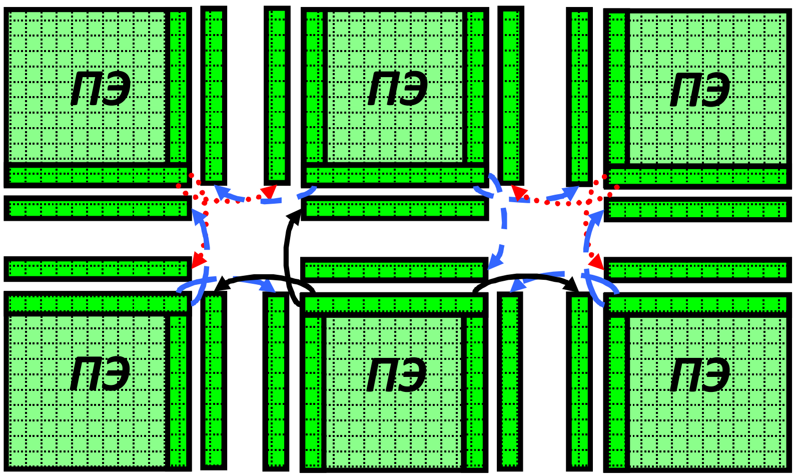

Рис. 4. Иллюстрация организации пересылок граничных сеточных значений при 2D-декомпозиции для обеспечения однородности вычислительного процесса

Время, затрачиваемое на пересылку данных при организации обменов, можно уменьшить, используя технологию опережающей рассылки, когда вычисления во внутренней области проходят на фоне пересылки уже вычисленных граничных значений сеточной функции. Использование многопроцессорной вычислительной техники позволило значительно сократить время вычислений при решении описанной задачи, с нескольких часов до нескольких минут, в зависимости от размера исследуемой области. В таблице представлено время, затрачиваемое на моделирование ламинарного течения в начальном участке плоского канали при использовании 1, 4, 16, 25, 64 и 100 процессов.

Время счета (2D-декомпозиция) для случая моделирования ламинарного течения в канале на сетке 120×40

Число процессов	1	4	16	25	64
Время счета, мин	38,72	23,58	2,67	1,18	0,85

Заключение

Для исследования турбулентных течений в уличных каньонах разработана и верифицирована двумерная математическая модель турбулентного течения и численный метод ее решения. Верификация проведена на задаче моделирования ламинарного течения в начальном участке плоского канала. Разработан параллельный алгоритм решения рассматриваемой задачи.

Литература

1. Старченко А.В., Нутерман Р.Б., Данилкин Е.А. Численное моделирование турбулентных течений и переноса примеси в уличных каньонах. Томск : Изд-во Томского государственного университета, 2015. 252 с.
2. Sagaut P. Large eddy simulation for Incompressible Flow 3rd ed. An Series: Scientific Computation, 2006. 556 p.
3. Danilkin E.A., Starchenko A.V. Large eddy simulation of turbulent flow and of pollutant transport in a street canyon // Proc. SPIE 9680, 21th International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics. 2015.
4. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / пер. с англ. М. : Энергоатомиздат, 1984. 149 с.
5. Жукаускас А.А. Конвективный перенос в теплоприемниках. М. : Наука, 1982. 472 с.