

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СХЕМ ENO ВЫСОКОГО ПОРЯДКА ПРИ РАСЧЕТЕ ДВИЖЕНИЯ ГАЗОДИСПЕРСНОГО ОБЛАКА НА МНОГОПРОЦЕССОРНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКЕ

Вражнов Д.А., Старченко А.В.

ТГУ, Механико-математический факультет, Томск, пр. Ленина 36, vrazhnov@math.tsu.ru

Представлена модель образования и движения появившегося в результате взрыва облака с газообразными и полидисперсными компонентами. Начальный этап динамики перегретого облака с продуктами сгорания описывается на основе одномерной модели миграции. Когда температуры облака и окружающего воздуха станут примерно равны, перенос продуктов взрыва моделируется трехмерными уравнениями турбулентной диффузии с учетом осаждения полидисперсных частиц. Численное решение таких уравнений опирается на схему ENO высокого порядка.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время огромное внимание уделяется математическому моделированию атмосферных процессов. Это связано с ростом производительности вычислительной техники и, соответственно, с ростом предъявляемых требований к качеству численного прогноза. Кластерные системы на сегодняшний день постепенно вытесняют остальные суперкомпьютеры из-за своей относительной дешевизны и легкости наращивания мощности. Огромное количество численных методов было адаптировано для использования на многопроцессорных вычислительных системах, однако однозначно выделить наиболее перспективный метод крайне сложно. Это связано как с индивидуальными особенностями вычислительных систем, так и с особенностями самих поставленных задач. Класс ENO - и WENO - схем крайне привлекателен, прежде всего, при численном конечно-разностном решении уравнения переноса, поскольку эти схемы сохраняют свойство монотонности решения, обеспечивая высокую точность расчетов.

Информация играет огромную роль в современном обществе. Последние исследования европейских ученых показали, что большинство людей не удовлетворено уровнем и качеством предоставляемых данных о состоянии окружающей среды. В виду этого предпринимаются различные по масштабу проекты по мониторингу окружающей среды и оперативному оповещению населения. Следует заметить, что источники вредных выбросов могут находиться не только в мегаполисах, но и в небольших городах, занятых наукоемким производством, таких, например, как город Северск Томской области. Атомная станция представляет собой не столько прямую угрозу ввиду несовершенства оборудования, сколько угрозу возникновения чрезвычайной ситуации, связанной с человеческим фактором, т.е. ошибкой персонала, обслуживающего станцию. Именно поэтому необходима система, позволяющая избежать человеческих ошибок, поскольку в данном случае последствия подобной ошибки могут быть катастрофическими. Ярким примером может служить авария 6 апреля 1993 года, когда в результате взрыва произошел выброс облака радиоактивных частиц. Наличие постоянно работающей системы мониторинга состояния окружающей среды позволило бы в кратчайшие сроки спрогнозировать расположение участков радиоактивного загрязнения, оперативно провести разведку и эвакуацию жителей из населенных пунктов, над которыми прошло облако с продуктами взрыва.

Для создания модели движения газодисперсного облака был выбран эйлеров подход, поскольку он позволяет эффективно решать задачи, связанные с предсказанием мезомасштабного переноса выбросов.

Целью данной работы является сравнение различных схем высокого порядка для уравнения переноса, разработка модели движения газодисперсного облака и алгоритмов параллельной реализации на вычислительных системах с распределенной памятью.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ ГАЗОДИСПЕРСНОГО ОБЛАКА

Рассматривается ограниченный в прямоугольнике участок территории, на котором в момент времени $t = 0$ в точке с координатами (x_0, y_0, z_0) происходит взрыв с образованием перегретого облака, содержащего наряду с газообразными продуктами полидисперсные взвешенные частицы. Рельеф поверхности территории представляется зависимостью вида:

$$h = h(x, y), \quad 0 \leq x \leq Lx \quad 0 \leq y \leq Ly$$

с известным распределением категорий землепользования. Динамика облака с продуктами сгорания описывается на основе одномерной модели вертикальной миграции [1]:

$$\begin{aligned} \frac{dD}{dt} &= 2d |W_c - W| + \frac{gDW_c}{3(g_a - 1)C_p T}; \\ \frac{dW_c}{dt} &= g \frac{1-R}{R} - 6ad \frac{(W_c - W)|W_c - W|}{DR}; \\ \frac{dR}{dt} &= \frac{RW_c}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{g}{C_p} \right) + 6d \frac{|W_c - W|(1-R)}{D} \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь W_c - скорость подъема нагретой примеси; D - горизонтальный размер облака; R - отношение плотности продуктов взрыва к плотности окружающего воздуха; T - абсолютная температура атмосферы; g_a, C_p - показатель адиабаты и теплоемкость воздуха при постоянном давлении; $a = 1,5$; $d = 0,21$ - безразмерные эмпирические константы, значения которых предложены в [2]. Начальные условия для системы (1) имеют вид:

$$t = t_0; D = 4, 2M^{1/3}; R = 0, 43; W_c = 0, 0.$$

Скорость горизонтального перемещения облака совпадает со скоростью ветра. В начальный момент известны горизонтальный размер облака D , отношение плотности газообразных продуктов взрыва к плотности окружающего воздуха R , скорость вертикального подъема нагретой примеси, ТНТ-эквивалент взрывчатого вещества, кг.

Весь процесс движения продуктов взрыва и осаждения частиц разделяется на два этапа. Первый этап характеризуется тем, что температура в облаке существенно отличается от температуры окружающего воздуха и подъемное движение облака рассматривается целиком. Частицы, находившиеся в облаке, имеют такую же скорость, что и газообразные продукты взрыва, однако на них так же оказывает действие сила тяготения. Покинув облако, частицы испытывают действие силы сопротивления окружающего воздуха и силы тяжести. Предполагается, что частицы в облаке в первоначальный момент распределены равномерно.

Второй этап движения продуктов взрыва начинается с момента, когда температуры облака и окружающего воздуха примерно равны. В этом случае распределение газообразных компонентов и частиц описывается уравнением турбулентной диффузии.

При моделировании переноса и рассеивания примеси на основе эйлера подхода используется прогностическое уравнение переноса для осредненной концентрации $C(t, x, y, z)$:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W_{\Sigma} \frac{\partial C}{\partial z} = - \frac{\partial \langle cu \rangle}{\partial x} - \frac{\partial \langle cv \rangle}{\partial y} - \frac{\partial \langle cw \rangle}{\partial z} \quad (2)$$

Здесь $W_{\Sigma} = W - W_{sed}$, где U, V, W - компоненты скорости движения атмосферного воздуха, вычисленные при помощи мезомасштабной модели пятого поколения MM5 [3], а W_{sed} - скорость сухого осаждения частиц диаметром D_p с плотностью ρ_p , вычисляемая по формуле:

$$W_{sed} = \frac{D_p^2 g \rho_p}{18\nu}.$$

Для определения турбулентных корреляций пульсаций скорости и концентрации используются градиентные соотношения гипотезы Буссинеска:

$$\langle cu \rangle = -K \frac{\partial C}{\partial x}; \langle cv \rangle = -K \frac{\partial C}{\partial y}; \langle cw \rangle = -K_z \frac{\partial C}{\partial z}; K_z = c_m \sqrt{k} l,$$

где $c_m = 0,5$ - константа; k - турбулентная кинетическая энергия, рассчитанная с использованием модели ММ5; коэффициент турбулентной диффузии K вычисляется по формуле Смагоринского [1], а

$$l = 0,1 \frac{\int_0^H \sqrt{k} z dz}{\int_0^H \sqrt{k} dz} - \text{формула Блэкадара [1].}$$

Распределение примеси в начальный момент времени известно.

ВЫБОР СХЕМЫ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА

Для решения уравнения (2) использовались схемы ЕНО четвертого и шестого порядка для аппроксимации адвективных членов уравнения. Целесообразность использования данных схем была показана на ряде сравнительных тестов. Приведем общий алгоритм решения уравнений (2) на основе схем ЕНО.

Основная идея ЕНО-схем состоит в использовании адаптивной процедуры для выбора наиболее подходящего конечно-разностного шаблона при аппроксимации потоков на гранях рассматриваемой ячейки сетки с использованием интерполяции Лагранжа, по возможности избегающей добавления узлов с резким изменением значений сеточной функции [4].

Приведем алгоритм ЕНО для одномерного уравнения адвекции:

$$\frac{\partial j}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x}, \quad (3)$$

где $f = Uj$ - поток, j - концентрация, U - скорость. Распространение алгоритма на случай уравнения переноса приводится ниже.

Пусть нам даны $\{\bar{f}_i\}$ - осредненные по ячейкам значения функции f .

1. Вычисляем разделенные разности для первообразной $V(x)$ функции f ($V'(x) = f(t^n, x)$) по формулам:

$$V[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] = \frac{V(x_{i+\frac{1}{2}}) - V(x_{i-\frac{1}{2}})}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} = \bar{f}_i; \quad V[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] = \frac{V[x_{i+\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{1}{2}}] - V[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+j-\frac{3}{2}}]}{x_{i+j-\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}},$$

$j = 1, \dots, k$; k - порядок схемы.

2. В ячейке I_i начнем с двухточечного шаблона $S_2(i) = \{x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\}$ для первообразной

$V(x)$, который эквивалентен одноточечному шаблону $S_1(i) = \{I_i\}$ для $\bar{f}_i$. Заметим, что для точки $x_{i+\frac{1}{2}}$ существует два двухточечных шаблона $S_2(i) = \{x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\}$ и

$$S_2(i) = \{x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{3}{2}}\}$$

3. Для $l = 2, \dots, k$, рассмотрим шаблон $S_l(i) = \{x_{i+\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+l-\frac{1}{2}}\}$. Добавим одну из соседних

точек $x_{i-\frac{1}{2}}$ или $x_{i+l+\frac{1}{2}}$ к этому шаблону по ЕНО процедуре:

Если $\left| V[x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+l-\frac{1}{2}}] \right| < \left| V[x_{i+\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+l+\frac{1}{2}}] \right|$, тогда добавляя точку $x_{i-\frac{1}{2}}$ к шаблону $S_l(i)$ получаем $S_{l+1}(i) = \{x_{i-\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+l-\frac{1}{2}}\}$. В противном случае, нужно добавить точку $x_{i+l+\frac{1}{2}}$, чтобы получить шаблон $S_{l+1}(i) = \{x_{j+\frac{1}{2}}, \dots, x_{j+l+\frac{1}{2}}\}$

Используя интерполяцию Лагранжа для выбранной системы узлов (шаблон $S_{k+1}(i) = \{x_{i+\frac{1}{2}}, \dots, x_{i+k+\frac{1}{2}}\}$), получаем значения потоков. Заметим, что, например, на грани $x_{i+\frac{1}{2}}$ можно вычислить поток из ячейки i и из ячейки $i+1$. Обозначим их $\hat{f}_{i+1/2}^+$ и $\hat{f}_{i+1/2}^-$ соответственно.

Интегрируя уравнение (3) по конечному объему i получим:

$$\left[\frac{d\bar{f}_i(t)}{dt} \right]^n = -\frac{1}{\Delta x_i} (\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2}),$$

где $\hat{f}_{i+1/2} = h(\hat{f}_{i+1/2}^-, \hat{f}_{i+1/2}^+)$. Функция h есть монотонизирующий ограничитель схемы. В нашей работе был использован монотонизатор по Годунову:

$$h(a, b) = \begin{cases} \min_{a \leq c \leq b} f(c), & \text{if } a \leq b \\ \max_{b \leq c \leq a} f(c), & \text{if } b > a \end{cases}$$

Переход к двумерному случаю производится по следующей технологии – сначала вычисляются одномерные потоки по одной координате, а затем, одномерные потоки по второй координате. После чего, пользуясь методом Рунге-Кутты второго (или более высокого) порядка мы вычисляем значение концентрации на следующем временном слое.

Для того, чтобы вернуться от уравнения адвекции к уравнению переноса, необходимо добавить диффузионные члены в (3). Их можно аппроксимировать либо отдельно, конечно-разностными методами, либо включить их в представление потока с использованием неизвестной функции.

РЕЗУЛЬТАТЫ СРАВНЕНИЯ СХЕМ

Задача 1. Рассматривается одномерное уравнение адвекции (3). Условия проведения расчетов:

Шаг по пространству $x_i = i * h$, $h = 3750$, $-25 \leq i \leq 25$; шаг по времени $t = 40$, $t_n = n * t$, $0 \leq n \leq 280$.

Начальные и граничные значения определяются следующим образом:

$$x = -25: f(x) = 0 \quad t = 0: f(x) = \begin{cases} 0, 2 * x_i + 2, & \text{if } -10 \leq i \leq -5 \\ -0, 2 x_i, & \text{if } -5 \leq i \leq 0 \end{cases} \quad U = 5$$

Сравнивается численное решение по схеме ENO со вторым, третьим, четвертым, шестым порядком аппроксимации и точное решение. Из рисунка 1 видно, что схема третьего порядка достигает 90% значения максимума точного решения. Графики решения с использованием схемы 4 и 6 порядка различаются незначительно.

Задача 2. На примере постановки задачи 1 сравниваются схемы Ботта, MLU и противопотоковая. Результаты отражены на рисунке 2. Подчеркнем значительное преимущество схемы ENO над схемой Ботта.

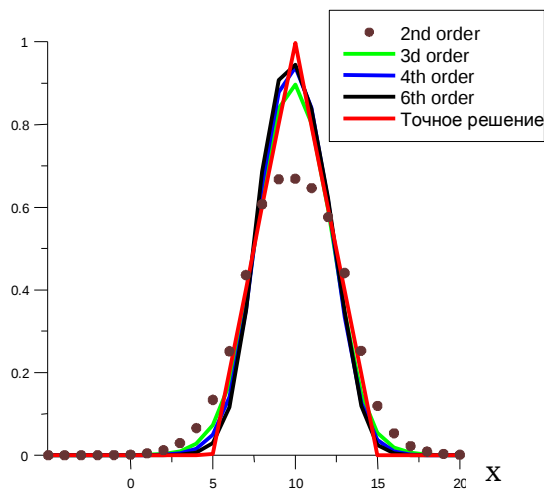


Рисунок 1. Схемы ENO разного порядка

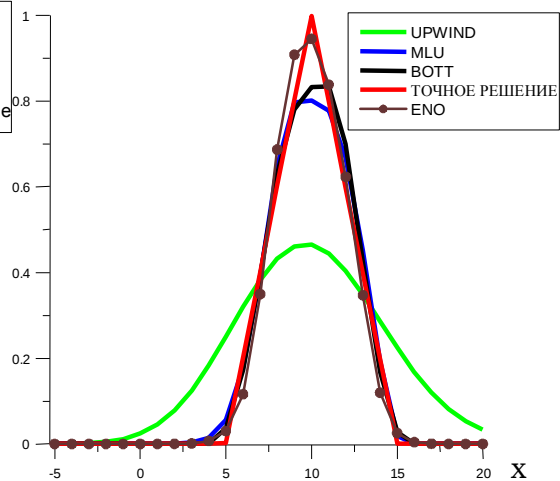


Рисунок 2. Схемы ENO, Ботта, MLU, противопотоковая схема и точное решение

Как видно из графика на рисунке 2, схема ENO хорошо описывает поведение точного решения и значение максимума точного решения.

Задача 3. Рассматривается двумерное уравнение адвекции-диффузии:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = - \frac{\partial \langle cu \rangle}{\partial x} - \frac{\partial \langle cv \rangle}{\partial y}$$

в прямоугольной области: $x_i = i * h$, $h = 3750$, $-25 \leq i \leq 25$; $y_j = j * h$, $h = 3750$, $-25 \leq j \leq 25$; шаг по времени $t = 40$, $t_n = n * t$, $0 \leq n \leq 280$. Начальные и граничные условия:

$$x = -25; -25 \leq y \leq 25: f(x, y) = 0; \quad t = 0: f(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{if } x = -5 \text{ and } y = -5 \\ 0, & \text{else} \end{cases} \quad U = V = 5,$$

коэффициенты диффузии приняты равными единице.

На рисунке 3 изображен процесс адвективно-диффузионного переноса начального распределения концентрации примеси с течением времени. Как видно из рисунка 3, схема ENO адекватно отображает процесс с физической точки зрения.

Как отмечалось выше, схемы ENO позволяют получать численные решения задачи адвекции-диффузии с высокой точностью. Кроме того, у схем ENO есть еще один плюс – это явные схемы и они хорошо распараллеливаются. При расчетах на многопроцессорной вычислительной технике с распределенной памятью предлагается использовать геометрическую декомпозицию расчетной области.

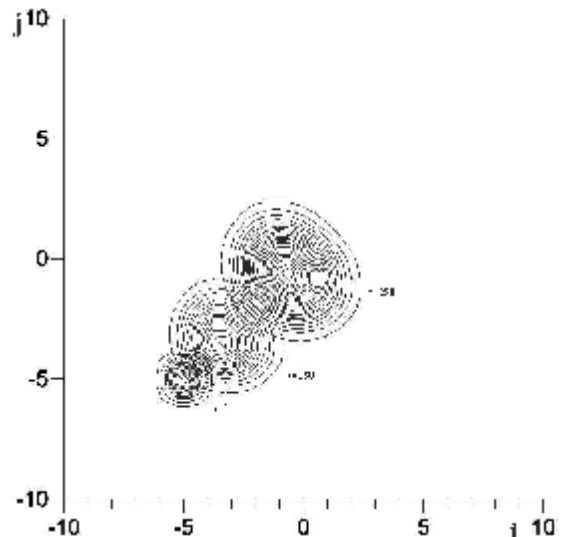


Рисунок 3. Распространение начального профиля со временем

В качестве теста для модели движения газодисперсного облака была выбрана аварийная ситуация произошедшая в г. Северск 6 апреля 1993 около 12 часов дня по местному времени. Мы предполагаем, что источник был на высоте 50 метров над поверхностью земли. Мощность источника была взята за единицу. Представлено поле ветра на 12 часов 10 минут по местному времени (рис. 4), т.е. несколько минут после момента взрыва. Кроме того, показаны данные моделирования - осадчение примеси спустя 50 минут.

Как можно видеть, след выпадающих частиц заворачивает на восток. По расчетным данным модели MM5 это объясняется сильной турбулентностью и 3-ЮЗ направлением ветра на высоте 50 метров.

Как уже отмечалось, в данной модели учитывалось осаждение частиц разных размеров. Предполагалось наличие пяти фракций частиц, размерами 10^{-6} , $5 \cdot 10^{-6}$, 10^{-5} , $2 \cdot 10^{-5}$, $5 \cdot 10^{-5}$ м. На рисунке 4 изображен след выпадения частиц размером 10^{-5} м. Располагая параметрами взрыва, можно более точно предсказать поведение газодисперсного облака.

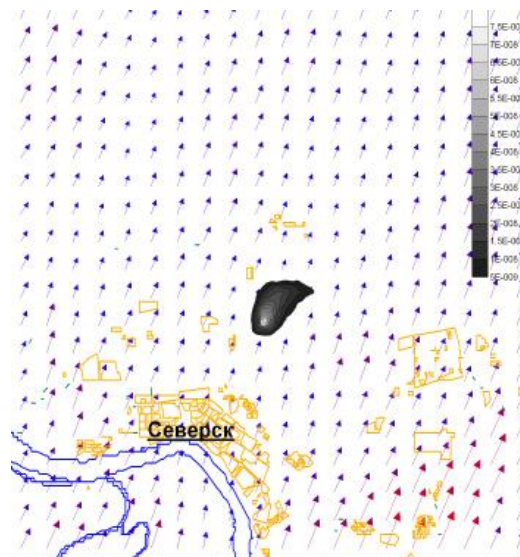


Рисунок 4. Поле ветра и осаждение частиц на 12.50 6 апреля 1993

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные сравнительные тесты показали эффективность использования ENO схем для решения уравнения переноса. Для вычисления метеорологических параметров, необходимых для инициализации модели движения газодисперсного облака можно использовать современные мезомасштабные метеорологические модели: MM5, WRF, либо диагностическую модель поля ветра, построенного на основе данных постов наблюдений. Наибольшую трудность вызывает получение оперативных данных по постам наблюдений, поскольку они не находятся в свободном доступе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Старченко А.В. Моделирование переноса примеси в однородном атмосферном пограничном слое//Труды международной конференции ENVIROMIS 2000, р. 77
2. Авраменко М.И., Вронский А.В., Бишов С.Н., Гагаринов С.В., Гусев В.Ю., Шнитко А.С., Афанасьева Г.Б. Модели и программы для расчета подъема облака после взрыва в атмосфере. 1997. Отчет РФЯЦ-ВНИИТФ, ПС.97.6607/4
3. Старченко А.В., Беликов Д.А., Вражнов Д.А., Есаулов А.О. Применение мезомасштабных моделей MM5 и WRF к исследованию атмосферных процессов // Оптика атмосферы и океана, 2005. Т 18, № 05-06. С.455-461
4. C.-W. Shu Numerical experiments on the accuracy of ENO and modified ENO schemes//Journal of Scientific Computing, v5 (1990), p. 127149

APPLICATION OF HIGH-ORDER ENO-SCHEMES FOR THE PREDICTION OF GAS-DISPERSED CLOUD TRANSPORT ON MULTIPROCESSOR COMPUTERS

Vrazhnov Denis Aleksandrovich, Starchenko Alexander Vasilievich

In this work, three dimensional model of transport of overheated cloud with gaseous and polydisperse components appeared after explosion is presented. The dynamics of the cloud with products of burning is described by one-dimensional migration model. The movement of the cloud begins when temperatures of the cloud and surrounding air are practically the same. In this case, distribution of the gas components and particles is described by turbulent diffusion equation. Numerical solver is based on ENO schemes of high order.