

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ІНТЕНСИВНОСТІ ДЖЕРЕЛ ЗАБРУДНЕННЯ АТМОСФЕРИ НА БАЗІ ГІБРИДНИХ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ СИСТЕМ

М.І. ІЛЬІН, О.М. НОВІКОВ

Анотація. Розглянуто метод ідентифікації інтенсивності джерел хімічно взаємодійних забруднювальних домішок з урахуванням явища самоочищення під час досягнення граничної концентрації. Для обчислювальної реалізації показано можливість застосування паралельних методів на базі графічних прискорювачів архітектури Nvidia CUDA. Метод ідентифікації джерел в сукупності з паралельною обчислювальною реалізацією з використанням модифікованого методу червоно-чорного впорядкування (Д4) дає змогу скорочувати час моделювання у 12 разів та використовувати оперативну пам'ять на 30% у ході застосування графічного прискорювача Nvidia c2050 порівняно з вузлом кластера НТУУ «КПІ».

Ключові слова: метод параметричної ідентифікації, забруднення атмосфери, гібридні обчислювальні системи, GPGPU.

ВСТУП

Завдання моделювання процесів забруднення атмосфери мають практичну значущість для дослідження впливу промислового забруднення на навколишнє середовище та в контексті моніторингу в умовах надзвичайних ситуацій техногенного походження. Досліджуваним моделям притаманна трансобчислювальна складність унаслідок швидкого збільшення кількості змінних з підвищенням просторової роздільної здатності, а в разі їх використання для завдань моніторингу в реальному часі додатково виникають обмеження на максимальний час обчислень. Одним з напрямів подолання складності є застосування високопродуктивних обчислювальних систем, зокрема гібридних із застосуванням прискорювачів. Останні вирізняються високою енергоефективністю і відносно низькою вартістю (у найбільш поширеному випадку використання шейдерних блоків графічних прискорювачів загального призначення [1], [2]). На жаль, методи, що використовуються для обчислювальної реалізації в системах на базі тільки центральних процесорів, потребують модифікації у разі застосування для графічних прискорювачів через істотно меншу ємність оперативної пам'яті (та істотно більшу кількість обчислювальних ядер) [2], [3]. Таким чином, актуальним є створення нових та модифікація існуючих методів обчислювальної реалізації моделей процесів забруднення атмосфери та відповідних інформаційних технологій застосування гібридних високопродуктивних обчислювальних систем на базі графічних прискорювачів.

Мета роботи — розроблення методу ідентифікації інтенсивності джерел у процесах забруднення атмосфери хімічно взаємодійними домішками

з урахуванням аномальних фізичних властивостей явища самоочищення з досягненням граничної концентрації. Під час обчислювальної реалізації показано можливість застосування паралельних методів на базі графічних прискорювачів архітектури Nvidia CUDA.

МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ЗАБРУДНЮВАЛЬНИХ ДОМІШОК

Процес розповсюдження забруднювальних домішок в атмосфері можна подати у формі системи варіаційних нерівностей вигляду [4], [5]

$$\left(\frac{\partial u_s}{\partial t}, v_s - u_s \right) + (A(\lambda)u_s, v_s - u_s) + \psi_s(v_s) - \psi_s(u_s) \geq \geq (f_s, v_s - u_s), \quad s = 1, \dots, N_s, \quad (1)$$

$$\text{в } Q \quad \forall v \in H^1(\Omega) = V$$

з початковими умовами

$$u_s|_{t=0} = u_{s0} \text{ в } \Omega, \quad s = 1, \dots, N_s, \quad (2)$$

де $u_s(t, z)$ — функція, визначена на обмеженій відкритій множині Ω простору \mathbb{R}^n , $n = 1, 2, 3$, з гладкою границею Γ на часовому інтервалі $(0, t_k)$ для $t_k < \infty$, $\Theta = \Omega \times (0, t_k)$, $s = 1, \dots, N_s$, N_s — кількість домішок;

(f, g) — дія функціонала $f \in (H^1(\Omega))^*$ на елемент $g \in H^1(\Omega)$;

$A(\lambda): V \rightarrow V^*$ — оператор, визначений білінійною формою

$$(A(\lambda)u_s, \xi) = \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} \left(k_i(z) \frac{\partial u_s}{\partial z_i} \frac{\partial \xi}{\partial z_i} - c_i(z) \frac{\partial u_s}{\partial z_i} \xi \right) dz + \int_{\Omega} d(z) u_s \xi dz, \quad \forall \xi \in H^1(\Omega) = V, \quad s = 1, \dots, N_s, \quad (3)$$

тут $d(z)$ враховує нелінійний характер хімічної взаємодії забруднювальних домішок;

$$d(z) = D(z) + Q_s(u_1 \dots u_{N_s}), \quad s = 1, \dots, N_s,$$

де $D(z)$ — процеси типу «джерело-стік»; $Q_s(u_1 \dots u_{N_s})$ — нелінійні хімічні реакції; N_s — кількість домішок. Нелінійним функціям хімічних реакцій можна надати вигляду [7]

$$Q_s(u_1 \dots u_{N_s}) = - \sum_{i=1, i \neq s}^{N_s} \alpha_{si} u_i + \sum_{i=1, i \neq s}^{N_s} \sum_{j=1, j \neq s}^{N_s} \beta_{sij} u_i u_j, \quad s = 1, \dots, N_s;$$

$$f_s(t, z) = \sum_{j=1}^n q_j(t) \delta(z - z^j) \text{ — функції джерел забруднення хімічними}$$

домішками, $s = 1, \dots, N_s$; $q_j(t)$ — інтенсивність джерел; n — кількість джерел забруднення;

$\psi_s \neq +\infty$ — опуклий, обмежений знизу функціонал

$$\psi_s(v) = \int_{\Omega} \varphi_s(v(z)) dz, \quad s = 1, \dots, N_s;$$

ψ_s — неперервно диференційований функціонал. Відповідні функції φ_s :

$$\varphi_s(v) \in \frac{d\psi_s}{dt}, \quad s = 1, \dots, N_s. \quad (4)$$

У роботі досліджується процес самоочищення у разі перевищення граничної концентрації забруднювальної домішки, що визначається як

$$\psi_s = \begin{cases} \frac{1}{2} (m_s(t, z) u_s(t, z))^2, & u_s(t, z) \geq u_{s \max}(z), \\ 0, & u_s(t, z) < u_{s \max}(z), \end{cases} \quad s = 1, \dots, N_s, \quad (5)$$

де $m_s(t, z)$ — коефіцієнт самоочищення; $m_s(t, z) \in M = L^\infty(\Theta)$, де M — простір параметрів m_s з нормою $\|m_s\|_M = \|m_s\|_{L^\infty(\Theta)}$. Допустимі значення параметрів $M_{\text{доп}} = \{m_s \in M \mid m_{s \max} \geq m_s \geq 0\}$.

У випадку відсутності аномальних властивостей самоочищення модель може бути зведена до відомої UNI-DEM (Unified Danish Eulerian Model [6, 7]).

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ІНТЕНСИВНОСТІ ДЖЕРЕЛ

Розглянемо метод ідентифікації інтенсивності джерел моделі (1)–(3), яка враховує процес самоочищення та хімічну взаємодію забруднювальних домішок, якщо збурювальні функції процесу f_s нерівності (1) не задано. Необхідно за вимірами $y_s^{\text{ВІМ}}$ у точках $z^1, \dots, z^n \in \Omega$ функції $u_s(t, z^i)$ отримати оцінки f_s , які, задовольняючи (1)–(3), забезпечували б мінімум функціонала:

$$J(u, \lambda, f_s) = \int_0^{t_k} \sum_{s=1}^{N_s} w_s \sum_{i=1}^n [y_{si}^{\text{ВІМ}}(t) - y_{si}(t)]^2 dt \rightarrow \inf_{f_s \in F_{\text{доп}}}, \quad s = 1, \dots, N_s, \quad (6)$$

де $y_{si}(t, z^i) = h(t, z^i) u_s(t, z^i)$ — функція стану, яка вимірюється в точках $z^1, \dots, z^n \in \Omega$; $h(t, z^i)$ — відомий оператор; $y_{si}^{\text{ВІМ}}(t)$ — вимірювання; f_s — збурювальні функції процесу; $F_{\text{доп}}$ — множина допустимих збурювальних функцій процесу; w_s — вагові коефіцієнти.

Інтенсивності джерел шукаємо із застосуванням принципу Лагранжа, а також методу функціональної параметризації [5] для розв'язання системи варіаційних нерівностей (1)–(3) у вигляді

$$L(\cdot) = J(\cdot) + \left(\frac{\partial u_s}{\partial t} + A(\lambda) u_s - f_s, p_s \right) \Big|_{\Theta} + (\varphi(u_s), p_s) \Big|_{\Theta}, \quad s = 1, \dots, N_s;$$

$$u_s \Big|_{\Sigma} = u_{s\Sigma};$$

$$u_s \Big|_{t=0} = u_{s0} \quad \text{в } \Omega,$$

де $p_s(t, z)$ — спряжена функція, яка отримується зі спряженої системи [5]:

$$-\frac{\partial p_s}{\partial t} + A^*(\lambda)p_s = -\frac{\partial J}{\partial u_s} \quad \text{в } \Theta, \quad s = 1, \dots, N_s; \quad (7)$$

$$p_s|_{\Sigma} = p_{s\Sigma}; \quad (8)$$

$$p_s|_{t=t_k} = 0 \quad \text{в } \Omega. \quad (9)$$

Невідомі параметри інтенсивності джерел знайдемо на основі градієнтної процедури

$$f_s^{i+1} = \text{Pr} \left\{ f_s^i - \omega_{f_s} \left(\frac{\partial L(\cdot)}{\partial f_s} \right)^i \right\}, \quad s = 1, \dots, N_s,$$

де $\frac{\partial L(\cdot)}{\partial f_s} = -p_s \delta(z - z_j)$, $j = 1, \dots, n$; i — індекс поточної ітерації; f_s^0 , ω_{f_s} — задані.

Систему варіаційних нерівностей (1)–(3) розв’язано з використанням методу функціональної параметризації [4], а отже, варіаційну нерівність (1)–(3) можна подати у формі системи рівнянь:

$$\frac{\partial u_s}{\partial t} + A(\lambda)u_s + \varphi(u_s) = f_s \quad \text{в } \Theta, \quad s = 1, \dots, N_s; \quad (10)$$

$$u_s|_{\Sigma} = u_{s\Sigma}; \quad (11)$$

$$u_s|_{t=0} = u_{s0} \quad \text{в } \Omega, \quad (12)$$

де $\varphi(u_s)$ — шукана функція процесу самоочищення, визначена співвідношеннями (4), (5). Згідно з працею [4] цю функцію шукаємо у вигляді розв’язку задачі пошуку $\{\hat{u}_s(t, z), \hat{m}_s(u, t, z)\}$, що задовольняє та забезпечує мінімум функціонала:

$$J(m) = \sum_s \int_0^{t_k} \int_{\Omega} \left\{ \begin{array}{l} (u_s - u_{s \max})^2, \quad u_s|_{\Gamma_B} \geq u_{s \max} \\ (m_s (u_s - u_{s \max}))^2, \quad u_s|_{\Gamma_B} < u_{s \max} \end{array} \right\} dz dt \rightarrow$$

$$\rightarrow \inf_{m_s \in M_{\text{доп}}} , \quad s = 1, \dots, N_s.$$

У результаті розв’язання сформульованої задачі визначається коефіцієнт самоочищення $m_s(t, z)$.

ПАРАЛЕЛЬНА ОБЧИСЛЮВАЛЬНА РЕАЛІЗАЦІЯ ДЛЯ ГІБРИДНИХ СИСТЕМ НА БАЗІ ГРАФІЧНИХ ПРИСКОРЮВАЧІВ

Найбільш обчислювально складним етапом у градієнтній процедурі попереднього розділу є розв’язання систем лінійних алгебричних рівнянь (СЛАР), що виникають у разі застосування неявних кінцево-різницевоїх схем до співвідношень (7)–(9), (10)–(12). Доцільним є підвищення продуктивності його обчислювальної реалізації.

У роботі використовуються дві модифікації методу обчислювальної реалізації — прямий (на основі модифікованого методу червоно-чорного впорядкування (Д4 впорядкування, МД4) [8, 9] та LU декомпозиції, прямий МД4) і паралельний гібридний (на основі МД4 та стабілізованого методу біспряжених градієнтів, гібридний МД4 [4]). Розроблені модифікації методу відрізняються низькими вимогами до пам'яті, що дозволяє ефективно використовувати їх у високопаралельних обчислювальних системах з обмеженою ємністю оперативної пам'яті [10].

Розглянемо основні етапи обох методів. Після застосування скінченновимірної апроксимації вихідних рівнянь математичної фізики задача зводиться до розріджених СЛАР великої розмірності спеціального вигляду:

$$AU = B.$$

У випадку двовимірної області матричну модель задачі

$$\begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B^* \\ F \end{bmatrix}$$

можна звести до блокового вигляду з можливістю незалежного розв'язання для окремих блоків:

$$\begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ 0 & A'_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B^* \\ F' \end{bmatrix},$$

що дозволяє отримати розв'язок вихідної системи вдвічі меншого розміру:

$$A'_4 U_2 = F';$$

$$U_1 = A_1^{-1} B^* - A_1^{-1} A_2 U_2;$$

$$U = [U_1, U_2];$$

при цьому A'_4 спеціального вигляду, що допускає збереження без накладних витрат на позиції ненульових елементів (позиції ненульових елементів обчислюються аналітично).

Спеціальна процедура зберігання A'_4 дозволяє економити понад 30% оперативної пам'яті порівняно з існуючими форматами збереження розріджених матриць [10].

Розв'язок системи $A'_4 U_2 = F'$ знаходиться з використанням двох методів — прямого та гібридного (ітераційного). Відповідно до прямого МД4 матриця A'_4 розділюється на перетинні діагональні блоки; розрахунок LU декомпозиції ведеться із застосуванням реалізації BLAS [11], що забезпечує можливість перенесення програмної реалізації без змін вихідних кодів на нові моделі графічних прискорювачів. У гібридному методі на базі МД4 обчислення $A'_4 U_2 = F'$ виконується ітераційно-паралельна реалізація методу біспряжених градієнтів (BiCGSTAB [12]).

Порівняно з реалізацією для систем без застосування прискорювачів скорочення часу моделювання досягає 12 разів. В експерименті використовувався графічний прискорювач Nvidia c2050 та вузол кластера НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського» у конфігурації 2xIntel Xeon E5440 2.83 ГГц/8 Гбайт RAM.

ПРИКЛАД ЗАСТОСУВАННЯ

Розглянемо приклад застосування для пошуку інтенсивності джерел у системі з трьох хімічно взаємодійних домішок з урахуванням аномального процесу самоочищення у разі досягнення граничної концентрації в умовах шести джерел викидів, вимірювань у 20 точках у ділянці 512×512 . Необхідно знайти інтенсивність джерел та параметр самоочищення для першої домішки.

Оцінки інтенсивності джерел та параметра самоочищення на різних кроках градієнтної процедури подано на рис. 1, 2.

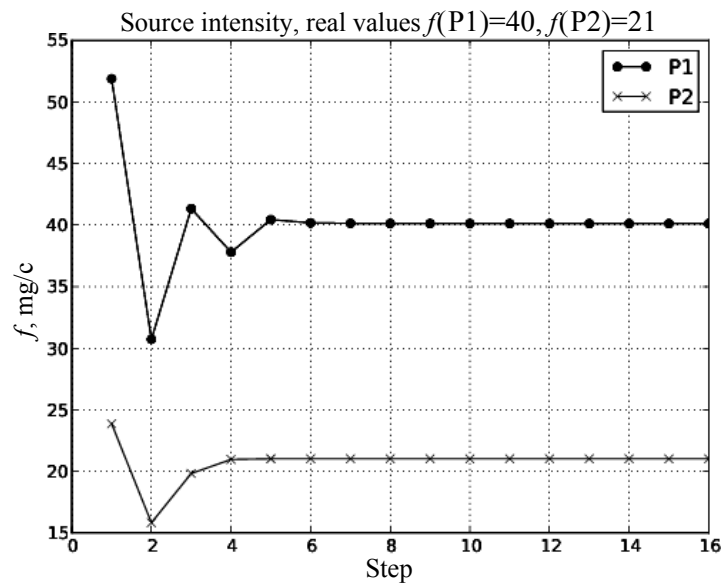


Рис. 1. Оцінки інтенсивності джерел

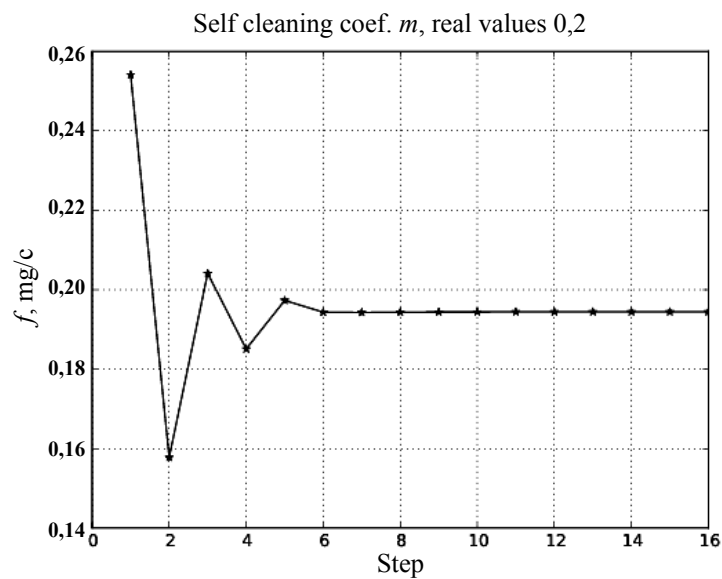


Рис. 2. Оцінки параметра самоочищення

Залежність функціонала J від кроку градієнтної процедури показано на рис. 3.

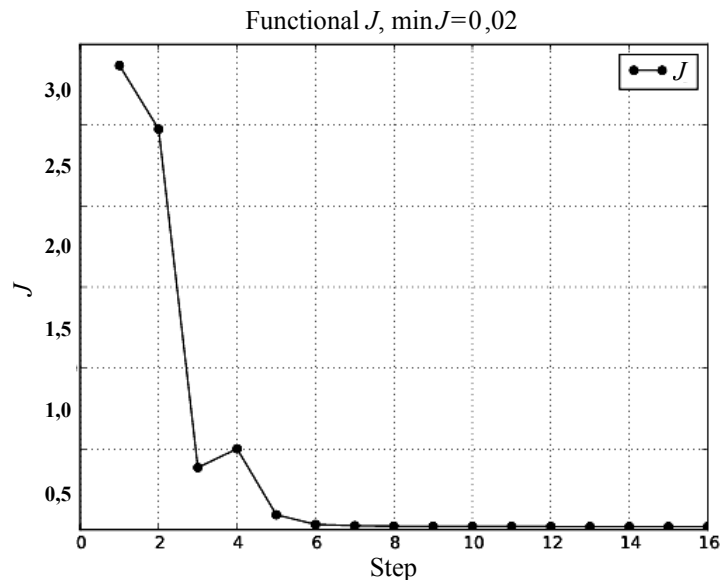


Рис. 3. Оцінки параметра самоочищення прикладу

В експерименті використовувалась гібридна модифікація МД4. Середній час виконання одного кроку на графічному процесорі Nvidia C1060 становить близько 18 с, загальний час моделювання — 4 хв.

ВИСНОВКИ

Запропоновано метод ідентифікації інтенсивності джерел у процесах забруднення атмосфери хімічно взаємодійними домішками з урахуванням аномальних фізичних властивостей явища самоочищення з досягненням стану процесу (концентрації забруднювальної домішки) граничного значення. Показано можливість застосування гібридних високопродуктивних обчислювальних систем на базі графічних прискорювачів архітектури Nvidia CUDA, що відрізняється від оригінального методу Д4 меншими на 30% вимогами до оперативної пам'яті та в 12 разів вищою продуктивністю порівняно з обчислювальною реалізацією без використання прискорювачів.

Подальші напрями досліджень пов'язані з розширенням запропонованих методів для прискорювачів відмінної від CUDA архітектури.

ЛІТЕРАТУРА

1. Anzt H. On the Performance and Energy Efficiency of Sparse Linear Algebra on GPU / H. Anzt, S. Tomov, J. Dongarra // International Journal of High Performance Computing. — 2017. — DOI:10.1177/1094342016672081.
2. Green500. — Available at: <https://www.top500.org/green500/>
3. Anzt H. Acceleration of GPU-based Krylov solvers via data transfer reduction / H. Anzt, S. Tomov, P. Luszczek, W. Sawyer, J. Dongarra // International Journal of High Performance Computing.

- of High Performance Computing Applications. — 29. — 3. — 2015. — P. 366–383.
4. Згуровский М.З. Анализ и управление односторонними физическими процессами / М.З. Згуровский, А.Н. Новиков. — К.: Наук. думка, 1996. — С. 328.
 5. Новиков А.Н. О реализации одного класса вариационных неравенств / А.Н. Новиков // Электронное моделирование. — 1994. — 1. — С. 39–45.
 6. Zlatev Z. Computational and numerical challenges in environmental modelling / Z. Zlatev, I. Dimov. — Oxford: Elsevier, 2006. — P. 373.
 7. UNI-DEM. — Available at: <http://www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/DEM/>
 8. Азиз Х. Математическое моделирование пластовых систем / Х. Азиз, Э. Сеттари. — Пер. с англ. — М.: Недра, 1982. — 407 с.
 9. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd edition / Y. Saad. — PA: SIAM, 2003. — 520 p.
 10. Ільїн М.І. Модифікація методу обчислювальної реалізації крайових задач на основі Д4 декомпозиції для гібридних систем на базі графічних процесорів / М.І. Ільїн // Вісн. НТУУ «КПІ»: Інформатика, управління та обчислювальна техніка. — 2017. — С. 63-67.
 11. cuBLAS. — Available at: <https://developer.nvidia.com/cublas>.
 12. CUSP. — Available at: <https://developer.nvidia.com/cusp>.

Надійшла 30.06.2017