

К вопросу конструирования параллельных вычислений при моделировании задач идентификации параметров окружающей среды

Г.Г. ШВАЧИЧ

Национальная Металлургическая Академия Украины, г. Днепропетровск

На примере уравнения переноса вредных примесей реализован алгоритм идентификации в задачах экологии. Разработан подход для реализации процедуры параллельных вычислений. Показано, что на основе разработанной математической модели возможно создание информационно-программного обеспечения для прогноза и идентификации параметров загрязнения окружающей среды для типовых объектов металлургических предприятий.

На прикладі рівняння переносу шкідливих домішок реалізовано алгоритм ідентифікації в задачах екології. Розроблено підхід для реалізації процедури паралельних обчислень. Показано, що на основі розробленої математичної моделі можливо створення інформаційно-програмного забезпечення для прогнозу і ідентифікації параметрів забруднення навколишнього середовища для типових об'єктів металургійних підприємств.

The observer identifier is realized in the problems of ecology and demonstrated on the example of equation of harmful admixtures transfer. Approach is developed for realization of procedure of parallel calculations. It is shown that creation of informatics software for a prognosis and parameters' authentication of environment pollution for the typical objects of metallurgical enterprises is possible on the basis of the mathematical model developed.

Постановка проблемы и анализ последних исследований и публикаций. Основу современных моделей динамики атмосферы составляют законы сохранения массы, момента и энергии, которые вместе с законами химии и термодинамики описывают процессы, происходящие в атмосфере, океане, почве, а также их взаимодействие [1]. В математическом выражении это системы многомерных нелинейных дифференциальных уравнений. Эти системы включают ряд входных параметров, известных из эксперимента с определенной погрешностью. Под параметрами обычно подразумеваются коэффициенты уравнений, начальные поля, характеристики области интегрирования и т.д. В каждом конкретном случае можно с какой-то достоверностью описать некоторое допустимое множество входных параметров и по результатам обработки данных измерений оценить начальное состояние рассматриваемой системы. В связи с отмеченным, решение любой конкретной задачи из данного класса определяется не только как функция пространственных координат и времени, но и как функция входных параметров. Таким образом, чтобы оценить достоверность полученного решения в пространстве входных параметров, необходимо исследовать его поведение по вариациям на их допустимом множестве. Теория чувствительности математических моделей, рассматривающая эти вопросы, получила своё развитие в теории оптимального управления и идентификации различных систем [1-3]. Входящие в ее состав постановка и методы решения обратных задач, суть которых состоит в оценке входных параметров по фактической информации о моделируемой системе, при этом не менее важны. Для задач экологии и охраны окружающей среды ряд входных параметров (мощность источников загрязнения, коэффициенты турбулентной диффузии и т.д.) могут быть определены только по экспериментальным данным. Для обработки экспериментальных данных целесообразно при этом использовать именно методы решения обратных задач [2-4]. Особенности моделирования и идентификации обратными методами подобных задач в данной работе иллю-

стрируется на примере решения одномерной задачи переноса вредных примесей на фоне атмосферных процессов, когда параметры окружающей среды предполагаются известными [1-10].

Математическая формулировка задач исследований. Исходным пунктом при идентификации параметров модели по данным измерений всегда является математическая модель (ММ) объекта, позволяющая с той или иной полнотой предсказывать изменение его состояния в зависимости от вариации входных параметров. Будем считать, что такая математическая модель задана. В простейшем случае при моделировании переноса вредных примесей на фоне атмосферных процессов, когда параметры окружающей среды считаются известными, математически эта задача формулируется следующим образом. В области определения искомой функции $y \in (-\infty, +\infty)$ требуется найти решение уравнения переноса примесей [1]

$$u\varphi'(y) + \sigma\varphi(y) = \mu\varphi''(y) + Q\delta(y - y_0), \quad (1)$$

при следующих условиях ограниченности искомого решения в области определения:

$$\left. \begin{aligned} \varphi(y)|_{y \rightarrow +\infty} &= 0 \\ \varphi(y)|_{y \rightarrow -\infty} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

В качестве входных параметров в задаче (1), (2) выступают:

- u – компонента вектора скорости частиц воздуха, [м/с];
- G – коэффициент поглощения (нейтрализации), [1/с];
- μ – коэффициент турбулентной диффузии, [м²/с];
- Q – количество выбросов загрязнения точечным источником в единицу времени, [кг/с];
- y_0 – известная координата узла расположения точечного источника загрязнения, [м].

При формулировке общих постановок обратных задач для ММ (1)-(3) будем исходить из соотношений

причина – следствие. Если к причинным характеристикам отнести полную совокупность входных данных (3), то следствием будет то или иное состояние исследуемого объекта, характеризующееся полем (1)-(2). Таким образом, восстановление причинно-следственных связей будет составлять цель *прямых задач*, их обращение – *обратных*. В соответствии с методами идентификации объектов управления математическую модель ММ (1),(2) можно интерпретировать как управляемую по входным параметрам $R = \{u, G, \mu, Q, y_0\}$. Следовательно, сам объект, подлежащий управлению, во-первых – характеризуется ММ (1), (2), и, во-вторых, – если имеются наблюдения (экспериментальные данные), то может быть использован для определения параметров управления R по экспериментальным данным. Действительно, введем в рассмотрение функционал, который будем использовать в качестве меры для оценки влияния возмущений вектора входных данных R задачи (1)-(3) на вектор φ . Поскольку при выборе функционала имеется большая степень свободы, рассмотрим его структуру в виде квадратичной или линейной невязки, характеризующей отклонение расчётной концентрации φ_p с $\varphi\dot{y}$, известной из эксперимента. Обозначим его через $j(R)$ и предположим, что такое значение явно зависит от функции φ и является ограниченным, непрерывным и дифференцируемым на множествах функций φ и R . Из этих предположений следует, что могут быть определены значения векторов:

$$\left\{ \begin{array}{l} grad_{\varphi} j \equiv \left\{ \frac{\partial J(\varphi)}{\partial \varphi} \right\}, \\ grad_R j \equiv \left\{ \frac{\partial J(\varphi)}{\partial R} \right\} \end{array} \right. \quad (4)$$

В виду явной зависимости функционала от φ вычисление вектора $grad_{\varphi} j$ сводится к простым формулам дифференцирования скалярной функции по векторному аргументу. Вычисление же вектора $grad_R j$ представляет серьёзную математическую проблему [1-3]. Покажем, как этого можно избежать, используя прямые методы минимизации функционала на решениях ММ (1)-(3) [4].

Пусть в качестве дополнительной информации к задаче (1)-(3) задано условие:

$$\varphi|_{y=y_x} = \varphi\dot{y}, \quad (5)$$

где правая часть известна из эксперимента. Как следует из ММ (1), (2), компоненты вектора R различны по физическому смыслу и по структуре. Поэтому для удобства перенумеруем все его переменные (3) подряд и введем новые обозначения:

$$R = \{R_i\}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (6)$$

где N – общее количество компонентов, различных по физическому смыслу, по структуре и составляющих вектор R (3).

Следя работе [4] и допустив, что функционал $j(R)$ обладает достаточным запасом аналитичности по входным параметрам R , приблизим его в окрестности минимума искомого решения задачи (1)-(3) отрезком ряда Тейлора:

$$j_{p+\varepsilon_{R,1}}(R) = j_{p,1} + \varepsilon_R j_{p,2} + \varepsilon_R^2 j_{p,3} + \dots \quad (7)$$

где

$$\varepsilon_R = \frac{R - R_p}{R_{p+1} - R_p} \quad (8)$$

– безразмерный аргумент, $p=1, 2, 3, \dots$ – номера сеточных узлов, в которые вариацией одного из компонент вектора входных данных (3) проектируются значения вычисленного функционала на решениях ММ (1), (2). Сохраним в разложении (7) три слагаемых и воспользуемся центральными разностями для тейлоровских компонент:

$$\left. \begin{array}{l} j_{p,2} = \frac{1}{2}(j_{p+1,1} - j_{p-1,1}) \\ j_{p,3} = \frac{1}{2}(j_{p+1,1} + j_{p-1,1} - 2j_{p,1}) \end{array} \right\} \quad (9)$$

Вычислим производную от функции (8) и приравняв к нулю ее значение, построим интерполяционную формулу:

$$R = R_p - \frac{1}{2}(R_{p+1} - R_p) \frac{j_{p+1,1} - j_{p-1,1}}{j_{p+1,1} + j_{p-1,1} - 2j_{p,1}}. \quad (10)$$

Таким образом, решение задачи идентификации ММ (1),(2) по входным параметрам (3) и известной из эксперимента функции (5), сведено к минимизации функционала $j(R)$, т. е. к задаче оптимального управления. Для одного переменного решение задачи в такой постановке сводится к отделению минимума $j(\bar{R}) = \inf j(R)$ и его уточнению итерационным методом парабол по формулам (9),(10). Функционал минимизируется по невязке, в которой расчетное значение искомой функции сравнивается с известным из эксперимента (5). Многократное повторение этой процедуры заканчивается отделением минимума невязки. При этом задачу отделения целесообразно сформировать в следующей постановке. Дано уравнение $f(R) = 0$ и числа $a, b (a < b)$, такие, что как только значения $f(a)$ и $f(b)$ будут иметь разные знаки, то произведение этих функций $f(a) \cdot f(b) < 0$ также изменит знак. Понятно, что для заданного отрезка $R \in [\bar{R}_0, R_L]$, покрытого равномерно сеточными узлами $R_p, p = \overline{1, 2m-1}, m \in Z$, когда расстояние между узлами определяется по формуле

$$DR = R_p - R_{p-1} = \frac{R_L - R_0}{2m}, \quad (11)$$

простейшим последовательным методом поиска при отделении минимума является метод бисекций. Во-первых, он без затруднений может быть реализован на параллельной ПЭВМ с $p = \overline{1, 2m-1}$ процессами. Действительно, функционал невязок

$$j(R) = (R - \varphi\dot{y})^2|_{\hat{E}=\hat{E}_c} = f^2(R_p) \quad (12)$$

можно вычислить одновременно в p -х равностоящих узлах сеточной области. Во-вторых, затем на основе анализа знаков вычисленной функции $f(R_p) = (R_p - \varphi\dot{y})$ по двум узлам, можно выбрать интервал локализации нуля и уточнить его значение по формуле (10).

Построение управляемых математических моделей различного уровня. Рассмотрим возможности построения ММ задачи (1)-(3) как управляемой системы с различным уровнем функционального наполнения. Во-первых, при определенных условиях возможно построение точного аналитического решения [1]. Во-вторых, построение приближенных численных решений этой же задачи позволяет расширить класс рассматриваемых задач идентификации. Оба из этих вариантов будут рассмотрены ниже.

1. Следуя работе [1] исключим из дифференциального уравнения (1) Дельта-функцию Дирака $\delta(y - y_0)$. Вместо одной задачи (1)-(3) теперь следует рассматривать две:

$$U \frac{d\varphi^+}{dy} + \sigma\varphi^+ = \mu \frac{d^2\varphi^+}{dy^2}, \quad y \geq [y_0 - y] \quad (13)$$

$$\varphi^+|_{y \rightarrow +\infty} = 0$$

$$U \frac{d\varphi^-}{dy} + \sigma\varphi^- = \mu \frac{d^2\varphi^-}{dy^2}, \quad y \leq [y_0 - y] \quad (14)$$

$$\varphi^-|_{y \rightarrow -\infty} = 0$$

описывающие искомое поле по обе стороны точки заданного узла y_0 . Сопряжение же решений этих задач может быть реализовано с помощью граничных условий четвертого рода:

$$\varphi^+|_{y \rightarrow +y_0} = \varphi^-|_{y \rightarrow -y_0}, \quad \mu \frac{d\varphi^+}{dy}|_{y \rightarrow +y_0} - \mu \frac{d\varphi^-}{dy}|_{y \rightarrow -y_0} + Q = 0. \quad (15)$$

Решение для ММ (ММ1) (1)- (3) окончательно принимает следующий вид:

$$\varphi_{p+\varepsilon_y,1}(y) = C \left\{ \begin{array}{l} \exp[-\beta_2 \varepsilon_y] \\ \exp[-\beta_1 \varepsilon_y] \end{array} \right\}, \quad \varepsilon_y = \left(\frac{y - y_0}{Dy1} \right) \quad (16)$$

где

$$\left. \begin{array}{l} \beta_1 = A + \Omega \\ \beta_2 = \Omega_\delta - A \end{array} \right\}, \quad \Omega = \sqrt{A + \bar{A}} \quad (17)$$

– корни характеристического уравнения

$$\beta^2 - 2A\beta - B = 0. \quad (18)$$

Входные параметры R в управляемую модель (16) входят через коэффициенты:

$$\left. \begin{array}{l} A = \frac{1}{2} \frac{U Dy1}{\mu}, \quad B = \frac{\sigma Dy1}{\mu} \\ C = \frac{Q Dy1}{2\Omega\mu} \end{array} \right\}, \quad (19)$$

образующие комплексы, имеющие нулевую размерность ($Dy1$ – некоторый линейный масштаб координаты). Таким образом, решение (16) является аналитическим, но составным относительно рассматриваемой области.

2. Построение более общей численной ММ (ММ2) может быть реализовано методом прямых [5]. Интересующую область определения искомого решения

задачи (1), (2) определим на прямой $y \in [y_0, y_1]$, покрытой равномерно узлами $p = \overline{1, 2m-1}$. Для каждого сеточного узла решение представляется совокупностью двух решений (13),(14). Сопряжение решений по узлам реализуется при помощи граничных условий четвертого рода (15). В такой постановке окончательно решение представляется в виде СЛАУ трехдиагональной структуры:

$$\tilde{N}_p \varphi_{p+1} - \varphi_p + D_p \varphi_{p-1} = f_p, \quad (20)$$

где

$$\left. \begin{array}{l} \tilde{N}_p = \frac{\tilde{a}^{-\beta_1}}{Det}, \quad D_p = \frac{\tilde{a}^{-\beta_2}}{Det}, \\ f_p = -\frac{Q_p Dy1 (1 - e^{-2\Omega_p})}{2\Omega\mu Det}, \\ Det = (1 + e^{-2\Omega_p}), \quad Dy1 = \frac{Y_L - Y_0}{2m}, \end{array} \right\} \quad (21)$$

– известные величины, а индекс p характеризует возможность учета зависимости входных параметров R, включая и мощность Q_p точечных источников загрязнения, от пространственной координаты y .

Обращение СЛАУ (20) достаточно просто реализуется по формулам прогонки [5]:

$$E_p = \frac{C_p}{1 - D_p E_{p-1}}, \quad G_p = \frac{D_p G_{p-1} - f_{p,1}}{1 - D_p E_{p-1}}, \quad (22)$$

При заданных значения E_0, G_0 вычисление значений последовательностей E_p и G_p по рекуррентным формулам (22) проводится в порядке возрастания номеров $p = \overline{1, 2m-1}$ – прямая прогонка. Затем, вычисление неизвестных сеточных функций φ_p производится по рекуррентной формуле:

$$\varphi_p = E_p \varphi_{p+1} + G_p \quad (23)$$

в порядке убывания номеров $p = \overline{2m-1, 0}$ – обратная прогонка. Таким образом, очевидно, что обратная прогонка может быть реализована только при условии известного правого граничного условия φ_{2m} , а прямая – при известных значениях входных коэффициентов E_0 и G_0 , учитывающих граничные условия, задаваемые на левой границе рассматриваемой области. Таким образом, вопреки предыдущим замечаниям (2), (13) и (14) было бы прекрасно, если бы вычислительные и аналитические граничные условия, задаваемые на границах рассматриваемой области $y \in [y_0, y_1]$, были бы эквивалентны аналитическим $\{-\infty, +\infty\}$. Проблема конструирования вычислительных граничных условий «на бесконечности», известна давно [7]. Обычно принято аналитические условия «на бесконечности» переносить в граничные точки расчетной сетки, которые находятся на конечном расстоянии от области, представляющей интерес. Оказалось, что предпочтительнее все же ставить «мягкие» вычислительные граничные условия, накладывающие меньшие ограничения по адекватности приближенного решения физическому [7]. Покажем, что условия «на бесконечности» наиболее оптимально вписываются в вычислительную схему на гра-

ницах расчетной сетки $y \in [y_0, y_1]$ по схеме метода прямых. Для левой границы получим следующих два решения:

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{0+\varepsilon_y}^+(y) &= \varphi_1 e^{-\beta_1(1-\varepsilon_y)}, \quad \varepsilon_y \in [0, +1] \\ \varphi_{0+\varepsilon_y}^-(y) &= \varphi_1 e^{\beta_1(\varepsilon_x-1)}, \quad \varepsilon_y \in [0, -\infty] \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

которые удовлетворяют тождественно как условиям сопряжения (15), так аналитическим граничным условиям (13). Пересчет этих условий для старта прямой прогонки дает:

$$G_0 = 0, \quad E_0 = e^{-\beta_1}, \quad (25)$$

Аналогично и для правой границы, имеем:

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{p+\varepsilon_y}^+(y) &= \varphi_{p-1} e^{-\beta_2(1+\eta_y)}, \quad \varepsilon_y \in [0, +\infty] \\ \varphi_{p+\varepsilon_y}^-(y) &= \varphi_{p-1} e^{\beta_2(1+\varepsilon_x)}, \quad \varepsilon_y \in [0, -1] \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

где номер p принимает значение правого граничного сеточного узла $p = 2m$.

Следовательно, для старта обратной прогонки по рекуррентной формуле (23) имеем следующее выражение:

$$\varphi_{2i} = G_{2m-1} \frac{e^{-\beta_2}}{1 - E_{2m-1} e^{-\beta_2}}, \quad (27)$$

где значения коэффициентов G_{2m-1}, E_{2m-1} предполагаются известными из процедуры прямой прогонки, что и требовалось доказать.

Таким образом, разработанный подход к решению поставленной задачи (1), (2) методом прямых (20) – (27) (математическая модель ММ2) в сравнении с ММ1 (16) значительно расширяет класс решаемых задач идентификации. Алгоритм распараллеливания ММ2 будет рассмотрен ниже.

Распараллеливание вычислений. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем в первую очередь связано высокопроизводительными вычислениями. Параллельные вычислительные системы развиваются очень быстро, а с появлением вычислительных кластеров параллельные вычисления стали доступными многим [9,10]. Во многих случаях рассмотренные выше задачи можно рассматривать и как большие системы, спецификой которых является не только большое число входных и выходных данных, но и их взаимосвязь. Принятие в качестве методологической основы разных схем расщепления многомерных экологических задач, во-первых – обеспечивает экономическую и устойчивую реализацию численных моделей методом скалярных прогонок. И, во-вторых, известно, что наибольший эффект от параллельного процессора достигается в тех случаях, когда он применяется для выполнения матричных вычислений линейной алгебры [5-10]. Покажем как это может быть реализовано на примере обращения СЛАУ типа (20). Разработка параллельной программы для программиста, привыкшего к последовательной модели программирования, может оказаться на первых порах непростым делом. Действительно, для рассматриваемой задачи распараллеливание становится возможным только при условиях определенной счетности узлов области определения СЛАУ (20), когда параметр $m = 2^k, k \in Z$. Граф параллельной структуры вычисли-

тельного алгоритма для этого случая можно представить в следующем виде, изображенном на рис. 1.

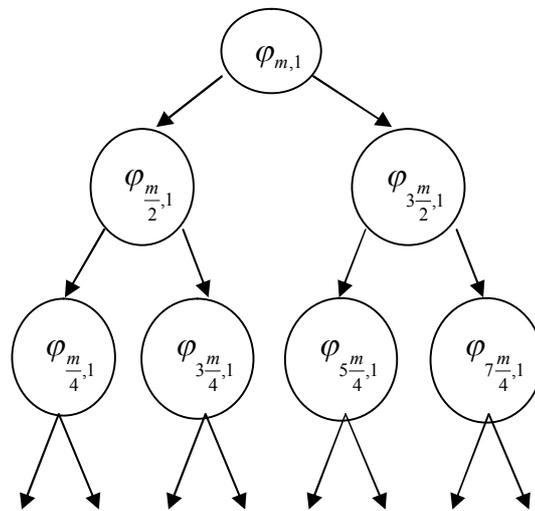


Рис. 1. Граф параллельной структуры ММ2

Отметим, что нижний ярус вычислительного графа (рис. 1), завершается последовательностью сеточных функций $\{\varphi_1, \varphi_3, \dots, \varphi_{2m-1}\}$, имеющих нечетную счетность узлов.

Таким образом, процесс распараллеливания СЛАУ (20) заключается в отображении искомого переменных φ_p в узлы графа (рис. 1). Вычислительный алгоритм, достаточно просто реализующий эту процедуру, конструируется элементарными действиями по схеме «нечетно-четной» редукции строк СЛАУ (20)[5,6].

Математическое моделирование. Тестирование алгоритма идентификации на ММ (ММ1, ММ2) проиллюстрируем при следующих исходных данных:

$$\left. \begin{aligned} U &= 0.1, \quad i / \tilde{n} \\ \mu &= 0.02, \quad i / \tilde{n} \\ G &= 0.2, \quad 1/c, \\ Q &= 0.01, \quad \hat{e}\hat{o} / \tilde{n} \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

Область определения искомого решения $\varphi(y)$ задавалось отрезком $y \in [y_0, y_1]$, который покрывался равномерно сеточными узлами $y_p, \rho = 1, 2m-1, m = 5$. Мощность точечного источника Q задавалось в срединной точке отрезка, соответствующего $y = y_m$. В качестве значений функции $\varphi(y)$, как бы известной из эксперимента, принималось значение $\varphi_y = \varphi(y_o)$, посчитанное на основе точных решений. На рис. 2, 3 приведены результаты моделирования при точных и возмущенных входных данных. Решение задач идентификации по определению турбулентного коэффициента диффузии и мощности источника загрязнения при точных входных данных при этом восстанавливаются абсолютно точно. Кроме того, результаты моделирования этих же задач с учётом погрешности входных данных ($\pm 2\%$) показывают, что с уменьшением уровня вносимых погрешностей результаты этих моделей сближаются к точному решению, что и требовалось доказать.

Результаты решения прямых задач, соответствующих математическим моделям ММ1 и ММ2, и иллюстрирующих формирование асимптотических граничных условий (25), (27) показали, что решения задач ММ1 и ММ2 тождественно совпадают.

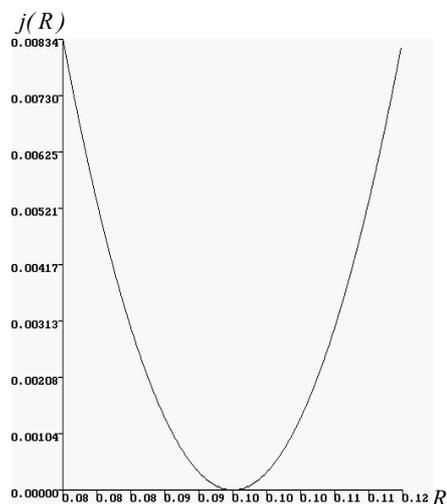


Рис. 2. Решение коэффициентной ОЗТ по определению мощности точечного источника загрязнения

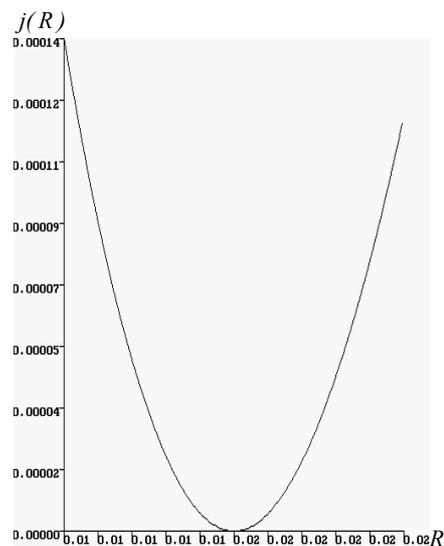


Рис. 3. Решение коэффициентной ОЗТ по определению значения коэффициента турбулентной диффузии μ

Таким образом, из анализа результатов моделирования этой задачи на основе ММ1 и ММ2 при разных моделях формирования граничных условий «на бесконечности» можно отметить следующее. Математические модели ММ1 и ММ2 с асимптотическими условиями (25) и (27) оказались практически абсолютно тождественными.

Выводы и перспективы дальнейших исследований. Разработанный алгоритм идентификации задач экологии, рассмотренный на простейшем примере конвективно-диффузионной модели переноса (1),(2), достаточно просто обобщается и на случай пространственных задач. На базе разработанной математической модели возможно и создание информационно-программного обеспечения прогноза и идентификации параметров загрязнения окружающей среды типовых объектов металлургических предприятий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982, 320 с.
2. Эйкхофф А. П. Основы идентификации систем управления. – М.: Мир, 1975, 683 с.
3. Первозванский А. А. Курс теории автоматического управления: Учеб. пособ. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. мет., 1986, 616 с.
4. Шмукин А. А. Идентификация процессов тепло - и массообмена обратными методами // Вестник ДГУ, Механика, Выпуск 1. тем 1, 1998. С. 141-143.
5. Швачич Г. Г., Шмукин А. А. Особенности конструирования параллельных вычислительных алгоритмов для ПЭВМ в задачах тепло - и массообмена // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. 2(8) 2004. С. 42-47.
6. Швачич Г. Г., Шмукин А. А. О концепции неограниченного параллелизма в задачах теплопроводности // Восточно-Европейский журнал передовых технологий 3(9) 2004. С. 81-84.
7. Швачич Г. Г., Соболенко А. В., Протопопов Д. В. Информационная система интеллектуальной поддержки принятия решений процесса прокатки // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. 3(3) 2003. С. 4-10.
8. Роч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980, 599 с.
9. Воеводин В. В., Воеводин Вл. В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ – Петербург, 2002, 608 с.
10. Системы параллельной обработки. Пер. с англ. / Под редакцией Д. Ивенса. – М.: Мир, 1985, 416 с.

пост. 05.05.06.