

Подходы к реализации мелкозернистой локально-параллельной архитектуры для моделирования экологических рисков

Ю.В. Дербина, В.В. Березовский

Поморский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Архангельск

Одним из приоритетных направлений научных исследований для решения прикладных задач народного хозяйства является обеспечение безопасности на основе качественной оценки радиационного, химического и экологического рисков. Значительная часть техногенных источников загрязнения связана с поступлением загрязнителей в почву и в зону аэрации путем инфильтрации из хранилищ жидких и пульпообразных отходов, а также из хранилищ твердых отходов, откуда загрязняющие вещества вымываются профильтровавшимися атмосферными осадками или из локальных источников хранения нефтепродуктов. Затем содержащий загрязнители фильтрат под действием гравитационных сил достигает водоносного горизонта, откуда вместе с грунтовыми водами достигает поверхностных вод. Этот процесс сопровождается явлениями сорбции, химического взаимодействия загрязнителей с радикалами почв и грунтов, а также переноса, физико-химического обмена и гидрохимических превращений. Здесь под загрязнением подземных вод понимается система процессов, обуславливающих формирование загрязнения подземных вод, как явления негативного изменения их качества. Мониторинг этого процесса играет весьма значительную роль в изучении загрязнения грунтовых вод, позволяя при правильном его проведении реализовать концепцию контролируемого загрязнения подземных вод[1].

С методической точки зрения принципиальное значение имеет модельная ориентированность мониторинга на изучение процессов загрязнения путем обоснования используемой геомиграционной модели. Без опоры на геомиграционные модели нереально проведение количественного анализа загрязнения подземных вод, непосредственно опирающегося только на данные режимных наблюдений с экстраполяцией их на прогнозное время, прежде всего из-за малой скорости миграционных процессов. Оптимальное обоснование геомиграционных и геофильтрационных моделей, которые можно было бы рекомендовать к практическому применению, и с одной стороны, обеспечивали бы адекватное описание природных процессов, а с другой - достаточную простоту модели, выводящую ее на рабочий уровень использования, может быть сделано только путем проведения природных наблюдений. Наблюдения же, за распространением загрязнителей в грунтовых водах, существенно осложняет то, что их поступление обычно имеет "очаговый" характер и, происходит неравномерно во времени, поэтому непосредственный поиск распространения загрязнителей отбором проб из буровых скважин следует проводить только после установления гидродинамической структуры потока, которое позволило бы получить достаточно определенные представления о направлениях и скоростях потока в области переноса загрязнителей[2].

Особого внимания заслуживает характеристика распространения загрязнителей по глубине потока, из понимания чего следуют требования по интервалам наблюдений, причем их обоснование целесообразно производить на базе разведочного моделирования. Решение такой задачи существенно осложняется при наличии загрязнителей пониженной и, особенно, повышенной плотности. Процессы переноса загрязнителей должны рассматриваться на базе представлений о структуре течения и баланса потока, для чего, в частности, требуется оценка инфильтрационного питания как естественного (из атмосферных осадков), так и техногенного (из хранилищ жидких и твердых отходов). Такие представления могут быть получены на основании специальных режимно-балансовых наблюдений.

При обосновании методических позиций проведения мониторинга необходимо ответить на вопросы: что, где, когда и как надо наблюдать? При мониторинге загрязнения подземных вод особое внимание следует уделять ответу на вопрос: где надо наблюдать за загрязнением подземных вод? Важно также тщательное обоснование режима наблюдений, который должен быть связан с реальной временной изменчивостью контаминантов в изучаемом потоке подземных вод. Как показывают данные наблюдений, такая изменчивость может носить непредсказуемый характер, обусловливаемый, как изменчивостью источников загрязнения, так и флюктуацией потока при периодических колебаниях элементов потока подземных вод. Переменный режим поступления техногенного загрязнения обусловливается изменчивостью фильтрации с поверхности земли, связанной с режимом осадков, в том числе с таянием снега, в котором обычно концентрируются поверхностные загрязнения, а также с изменениями технологического режима искусственных хранилищ промстоков и хвостохранилищ [3]. Переменный режим фиксируемого загрязнения может быть связан также с нестационарным режимом потока подземных вод, при котором может происходить перемещение интервала загрязнения по глубине, чем объясняются случаи наблюдения переменного во времени загрязнения в скважинах. Можно предполагать также проявления плановых флюктуаций загрязнения в потоке в связи с изменениями направления потока при нестационарном режиме фильтрации.

Для получения более качественной картины распространения загрязнений, проведение мониторинга должно опираться на адекватную модель этих процессов. Моделирование контаминационных процессов основывается на использовании моделей геомиграционных процессов, включающих в себя систему моделей переноса, физико-химического обмена и гидрохимических превращений. Модели, используемые для исследования влияния фильтратов свалок бытовых отходов, сконцентрированных техногенных загрязнений, искусственных хранилищ промстоков и хвостохранилищ на поверхностные и грунтовые воды должна описывать фильтрацию с учетом неоднородности строения подземного водоносного горизонта; гидродинамическую дисперсию; оседание частиц на поверхности пористой среды, вследствие гравитационных сил и сорбции, а так же обратный процесс – подъем частиц с поверхности проточных пор (суффозия); слипание частиц в более крупные (коалисцирование), распад крупных частиц на более мелкие (диспергирование). А также описывать закупоривание пор при попадании крупных частиц в горловины проточных пор, приводящее к превращению открытых пор в закрытые. Ввиду многочисленности происходящих процессов, мониторинг играет весьма значительную роль в изучении как адекватности модели, так и в юстировке входящих в модель параметров.

Наиболее точно отвечающую реальным условиям модель (по меньшей мере, качественную) можно получить решая обратную задачу по данным натурных измерений. В связи с тем, что математическая модель, описывающая рассматриваемые процессы, вычислительно сложна, т.е. требует применения высокопроизводительных вычислительных комплексов, изменение параметров мониторинга, мест его проведения и режима наблюдений в реальном времени, представляется затруднительным, что в свою очередь сказывается на качестве оценки экологических рисков. Во многих случаях решение обратной задачи для дифференциальных уравнений в частных производных является залогом успешного решения исследуемой прямой задачи и получения более полного и правильного представления о реально происходящих процессах. Современные вычислительные средства позволяют с большой степенью точности решать дифференциальные уравнения, моделирующие тот или иной физический процесс, однако, удовлетворительный результат может быть достигнут только в тех случаях, когда есть хорошее соответствие между моделью и реальным

объектом. Одним из необходимых условий этого соответствия является правильное задание коэффициентов дифференциального уравнения, которые являются некоторыми параметрами исследуемого объекта, такие как, например, фильтрационные параметры грунтов, гидродинамические характеристики течений в пластах, пористость среды, коллекторские свойства пластов. И, в этом случае, требуется проведение многочисленных прямых расчетов модели для подгонки ее коэффициентов. Результатом прямых вычислений может являться также определение новых точек наблюдений, в которых будут собираться данные, дающие возможность больше приблизить модель к реально происходящим процессам. В связи с вышесказанным, актуальным на сегодняшний день вопросом является предоставление высокопроизводительной вычислительной аппаратуры с программным комплексом, содержащим пакеты вычислительных программ, предназначенных для моделирования геофильтрации и геомиграции, в руки участников полевых работ, а также для оборудования рабочего места эколога имеющего в своем распоряжении персональный компьютер. Ускоритель высокопроизводительных вычислений должен быть способен дать исследователю возможности сравнимые с возможностями суперкомпьютера, доступ к которым для рядовых организаций, на сегодняшний день, сильно ограничен. Так, например, подобный программно-аппаратный комплекс, может позволить, на основании полученных характеристик фильтрата свалок бытовых отходов провести моделирование их влияния на поверхностные и грунтовые воды, а также указать места взятия проб и режимы наблюдений, так чтобы сложилась наиболее полная картина загрязнений создаваемых свалками. Тогда, основываясь на постоянно (в реальном времени) обновляющей свои параметры, для приближения к натурным данным, модели, можно реализовать комплекс мер, минимизирующий влияние загрязнений на поверхностные и грунтовые воды.

Современное народно-хозяйственное значение высокопроизводительных вычислительных технологий трудно переоценить. Они используются в широком круге прикладных задач, включая геолого-геофизические исследования, океанографию, исследование распространения инфекций, антикризисный менеджмент, метеорологию, экологический мониторинг. Многие подобные приложения требуют применения вычислительных комплексов, физически занимающих помещения в одну или более комнат, и трудно представить, как разместить, всю необходимую вычислительную аппаратуру на катере, в вертолете или просто взять ее с собой в полевые условия. С другой стороны, наличие вычислительного комплекса в месте проведения исследований может позволить сохранить организациям много времени и денег.

Современный уровень развития вычислительной техники позволяет широко применять математические методы в теоретических исследованиях, востребованных многими областями народного хозяйства. Например, при проведении экологического мониторинга, в геофизических исследованиях, в метеорологии и во многих других прикладных задачах можно использовать математические модели, в основе которых лежат уравнения математической физики. Многие модели представляют собой систему дифференциальных уравнений в частных производных, система дополняется краевыми условиями, т.е. совокупностью начальных и граничных условий. Полученная краевая задача на практике решается с использованием численных методов, таких как метод конечных элементов и метод конечных разностей. Использование параллельных вычислительных систем при расчете решений многомерных нестационарных задач математической физики может повысить точность и ускорить процесс моделирования сложных физических процессов и явлений. На данный момент преимущественным способом распараллеливания задач является крупноблочное распараллеливание, когда задача

разбивается на крупные подзадачи и каждый процессор общего назначения в составе суперкомпьютера решает выделенную ему часть.

Подобный подход имеет ряд недостатков. Во-первых, процессоры общего назначения менее эффективны, чем специализированные устройства. Во-вторых, для решения определенной задачи большая (оставшаяся) часть процессорной логики является избыточной, таким образом, с одной стороны мы имеем незначительное использование ресурсов, а с другой стороны стоимость подобной архитектуры оказывается значительно выше. Кроме того, в вычислительную сложность параллельных алгоритмов входят не только вычислительные, но и коммуникационные аспекты, которые зачастую являются «узким местом» как в производительности, так и в масштабируемости. Дело в том, что с увеличением числа процессоров блоки, на которые разбивается задача, измельчаются, увеличиваются коммуникационные затраты, решение задачи замедляется: происходит вырождение параллелизма. Решением описанных выше проблем может стать создание специализированного устройства архитектура построения, которого направлена на обход недостатков современных архитектур. К сожалению, на сегодняшний момент времени создание специализированного процессора, решающего конкретную задачу требует больших финансовых и временных затрат, чем использование массово выпускаемых процессоров общего назначения. С другой стороны использование реконфигурируемых логических устройств, когда есть возможность изменять «внутреннюю логику» процессоров позволяет обойти вышеперечисленные проблемы. Наиболее перспективным кандидатом устройств этого класса, является программируемая логическая интегральная схема (ПЛИС) FPGA. FPGA является матрицей элементарных логических модулей, которые содержат блоки умножения, суммирования, а также логические вентили и их блоки коммутации, что позволяет объединять эти модули необходимым образом, формируя произвольную логическую схему.

Задачи экологического мониторинга, обработки гидрометеорологических данных, расчеты при проектировании теплоэнергетического оборудования, моделирование геолого-геофизических процессов, многочисленные расчеты конструкций сводятся к решению систем дифференциальных уравнений в частных производных с краевыми условиями, а они, в свою очередь, к матричному формализму, которому присущ мелкозернистый параллелизм. Мелкозернистый параллелизм предполагает возможность разбить задачу на множество небольших однотипных подзадач, которые будут выполняться параллельно на отдельных вычислительных машинах (ВМ). Данные максимально распределены по системе, а программы в каждой ВМ используют минимально возможные наборы данных. Таким образом, мелкозернистость, или массовое распараллеливание означает, что в каждом вычислительном процессе в каждый момент времени содержится минимальное число команд (тело внутреннего цикла) и данных (элементы массивов, необходимые для вычисления одного витка цикла). Обязательным условием эффективного программирования при массовом распараллеливании является локальность взаимодействий, когда обмен данными происходит только в пределах ограниченного физического и структурного радиуса, независимо от размеров задачи и системы.

Фундаментальный выбор в пользу применения технологий высокопроизводительных вычислений на реконфигурируемых устройствах позволит удовлетворять вычислительные нужды в полевых условиях, что даст большую скорость обработки данных, повысит их точность, даст большую гибкость в проведении полевых исследований и сократит время необходимое для их проведения[4]. Применение семейства программируемых вентильных матриц FPGA в создании высокопроизводительных ускорителей для выполнения требовательных к вычислительным нагрузкам приложений, разрабатывается в ряде ведущих университетов мира. Рабочая группа FHPGA университета г. Эдинбург в рамках проекта Maxwell разрабатывает высокопроизводительный ком-

пьютер на программируемых вентилях, показав что прирост производительности по сравнению с современным процессором общего назначения может достигать 100 и 1000 раз[5]. FPGA применяются также как ускорители процессоров общего назначения в суперкомпьютерах, например, Cray-XD1, SGI – RASC. В настоящее время в семейства Virtex-5 LX и LXT входит 15 приборов. По словам производителя, семейство Virtex-5 обеспечивает проектировщикам преимущества 65-нм технологии и является единственным семейством FPGA со встроенными блоками PCI Express Endpoint и Ethernet MAC. Употребление платформы LXT дает вероятность сократить время разработки, уменьшить потребляемую мощность и освободить ресурсы матрицы за счет наличия готовых элементов последовательного подключения. Модели Virtex-5 LX155 и LX155T предназначены для приложений, требовательных к ресурсам и связанных с интенсивными вычислениями. В качестве примера, группа приводит медицинское оборудование, работающее с изображениями, системы промышленной автоматизации и высокопроизводительные компьютеры[6].

Другой возможностью реализации мелкозернистой локально-параллельной архитектуры матриц вычислителей является использование современных графических процессоров (GPU) таких как, например, графических процессоров серии фирмы NVIDIA[7]. Это высокопараллельные вычислительные устройства высокая производительность которых достигается за счет использования мультипроцессорного массива состоящего из SIMD наборов процессоров, так называемая SIMT архитектура (одна инструкция много потоков).

В докладе показано, каким образом можно реализовать схему локально-параллельных взаимодействий вычислителей используя разделенную память мультипроцессоров GPU. Использование парадигмы мелкозернистых локально-параллельных вычислений, один раз реализованная на мультипоточном процессоре, позволяет в дальнейшем избежать тщательного планирования синхронизации параллельно исполняющихся потоков и эффективно использовать иерархию памяти GPU. Локальность взаимодействий вычислителей, когда каждый из них передает данные только своему соседу, и при реализации обменов шаблонов взаимодействия одинаков для всех вычислителей матрицы, позволяет распределить потоки таким образом, что обращение к банкам разделенной памяти не вызывает конфликтов.

Литература

1. Мироненко В.А., Румынин В.Г., Проблемы гидрогеоэкологии, тома 1,2, 1998; том 3, 1999.
2. Шестаков В.М., Физико-химическая гидрогеодинамика 2007
3. Гольдберг В.М., Взаимосвязь загрязнения подземных вод и природной среды. 1987
4. MNB Technologies Press Release, 2007, <http://www.mnbtech.com>
5. Baxter R. et.al., Maxwell — a 64 FPGA Supercomputer, Adaptive Hardware and Systems, 2007. AHS 2007. Second NASA/ESA Conference on (2007), pp. 287-294
6. <http://www.xilinx.com/>
7. <http://www.nvidia.com/>