

# Моделирование прямых и обратных задач диффузии-конвекции на многопроцессорных системах для прогноза и ретроспективного анализа водных экосистем

А.И. Сухинов, Д.В. Лапин, А.Е. Чистяков

Южный федеральный университет

В работе рассмотрены двумерные обратные задачи диффузии-конвекции, необходимость оперативного решения которых возникает при ретроспективном анализе техногенных и природных экологических катастроф. Описан численный алгоритм решения обратных задач, основанный на методе квазиобращения и последующего итерационного уточнения начального условия. Приводится описание параллельных алгоритмов и теоретические оценки ускорения эффективности и масштабируемости.

## 1. Введение

При ретроспективном анализе техногенных и природных катастроф и их воздействия на экологические системы, возникает необходимость решать обратные эволюционные задачи распространения и переноса вещества, для определения места и параметров воздействия на экосистему, времени происхождения выброса. Причем, возникающие в процессе решения сеточные уравнения, часто имеют слишком большую размерность, для решения на одном вычислительном узле. Более того, если ретроспективный анализ производится с целью принять решения для выполнения действий по минимизации ущерба экосистеме, время выполнения анализа играет ключевую роль. Этим и определяется необходимость разработки параллельных алгоритмов для решения обратных задач диффузии-конвекции.

## 2. Обратная эволюционная задача транспорта вещества

Будем рассматривать некорректную эволюционную задачу с обратным временем получаемую из соответствующей прямой задачи заменой  $t$  на  $-t$  (т.е. переходом к обратному времени)

$$c'_t - uc'_x - vc'_y = -(\mu c'_x)'_x - (\mu c'_y)'_y. \quad (1)$$

где  $U = \{u, v\}$  – компоненты вектора скорости,  $\mu$  – горизонтальная составляющая коэффициента турбулентного обмена.

Уравнение (1) рассматривается при следующих граничных

$$c'_n(x, y, t)|_{(x,y) \in \Gamma} = 0 \quad (2)$$

и начальных условиях:

$$c(x, y, t)|_{t=0} = c_0(x, y). \quad (3)$$

Для приближенного решения некорректной задачи (1) - (3), будем использовать следующее уравнение

$$c'_t - uc'_x - vc'_y = -(\mu c'_x)'_x - (\mu c'_y)'_y - \alpha(\mu c'''_{xx})'_x - \alpha(\mu c'''_{yy})'_y. \quad (4)$$

Данный подход был предложен в работе [1]. Уравнение (4) может быть записано в следующем виде:

$$c'_t - uc'_x - vc'_y = \left( \mu(-c - \alpha c''_{xx})'_x \right)'_x + \left( \mu(-c - \alpha c''_{yy})'_y \right)'_y. \quad (5)$$

Для удобства последующей дискретизации уравнение (5) запишем в виде следующей системы уравнений:

$$c'_i - uc'_x - vc'_y = \left( \mu(s_x)' \right)'_x + \left( \mu(s_y)' \right)'_y, \quad (6)$$

$$s_x = -c - \alpha c''_{xx}. \quad (7)$$

$$s_y = -c - \alpha c''_{yy}. \quad (8)$$

Выбор оптимального значения параметра регуляризации  $\alpha$  определялся серией численных экспериментов, с использованием последовательности  $\alpha_k = \alpha_0 q^k$ ,  $q > 0$  [2], для каждого значения  $\alpha$  оценивалось в норме сеточного пространства  $L_2h$  ( $\omega h$ ), отклонение финального решения цепочки задач - обратная-прямая задача и начального распределения для обратной задачи на сетке  $\omega_h = \omega_x \times \omega_y$  (см. ниже).

## 2.1 Дискретизация обратной задачи транспорта вещества

Расчетная область вписана в прямоугольник. Для численной реализации дискретной математической модели поставленной задачи вводится равномерная сетка  $\omega = \omega_t \times \omega_x \times \omega_y$ :

$$\omega_t = \{t^n = nh_t, 0 \leq n \leq N_t - 1, l_t = h_t N_t\}, \quad \omega_x = \{x_i = ih_x, 0 \leq i \leq N_x - 1, l_x = h_x N_x\},$$

$$\omega_y = \{y_j = jh_y, 0 \leq j \leq N_y - 1, l_y = h_y N_y\},$$

где  $n, i, j$  - индексы по временной координате и пространственным координатным направлениям  $Ox, Oy$  соответственно,  $h_t, h_x, h_y$  - шаги по временной координате и пространственным координатным направлениям  $Ox, Oy$  соответственно,  $N_t, N_x, N_y$  - количество узлов по временной координате и пространственным координатным направлениям  $Ox, Oy$  соответственно,  $l_t, l_x, l_y$  - длина расчетной области по временной координате и пространственным координатным направлениям  $Ox, Oy$  соответственно.

Дискретные аналоги операторов конвективного и диффузионного переноса в случае граничных условий в форме Неймана могут быть записаны в следующем виде:

$$uc'_x = (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x},$$

$$(\mu c'_x)'_x = (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2},$$

где  $q_m$  - коэффициенты заполненности контрольных областей [2].

Дискретный аналог уравнения (6) с учетом приведенных выше аппроксимаций запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} (q_0)_{i,j} \frac{c_{i,j}^{n+1} - c_{i,j}^n}{h_t} - (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j}^{n+\sigma_1} - c_{i,j}^{n+\sigma_1}}{2h_x} - (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j}^{n+\sigma_1} - c_{i-1,j}^{n+\sigma_1}}{2h_x} - \\ - (q_3)_{i,j} v_{i,j+1/2} \frac{c_{i,j+1}^{n+\sigma_2} - c_{i,j}^{n+\sigma_2}}{2h_y} - (q_4)_{i,j} v_{i,j-1/2} \frac{c_{i,j}^{n+\sigma_2} - c_{i,j-1}^{n+\sigma_2}}{2h_y} = (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{(s_x)_{i+1,j}^{n+\sigma_1} - (s_x)_{i,j}^{n+\sigma_1}}{h_x^2} - \\ - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{(s_x)_{i,j}^{n+\sigma_1} - (s_x)_{i-1,j}^{n+\sigma_1}}{h_x^2} + (q_3)_{i,j} \mu_{i,j+1/2} \frac{(\bar{s}_y)_{i,j+1}^{n+\sigma_2} - (\bar{s}_y)_{i,j}^{n+\sigma_2}}{h_y^2} - (q_4)_{i,j} \mu_{i,j-1/2} \frac{(\bar{s}_y)_{i,j}^{n+\sigma_2} - (\bar{s}_y)_{i,j-1}^{n+\sigma_2}}{h_y^2} \end{aligned} \quad (9)$$

где  $c_{i,j}^{n+\sigma} = \sigma c_{i,j}^{n+1} + (1-\sigma)c_{i,j}^n$ ,  $\sigma \in [0,1]$  - вес схемы.

Дискретные аналоги уравнений (7) - (8) с запишутся в следующем виде:

$$(q_0)_{i,j} (s_x)_{i,j} = - (q_0)_{i,j} c_{i,j} - \alpha \left( (q_1)_{i,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2} \right), \quad (10)$$

$$(q_0)_{i,j} (s_y)_{i,j} = -(q_0)_{i,j} c_{i,j} - \alpha \left( (q_3)_{i,j} \frac{c_{i,j+1} - c_{i,j}}{h_y^2} - (q_4)_{i,j} \frac{c_{i,j} - c_{i,j-1}}{h_y^2} \right). \quad (11)$$

Для численного решения уравнения (5) с соответствующими начальными и граничными условиями используется схема расщепления по геометрическим направлениям – локально-одномерная при этом для четных шагов веса схемы равны  $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = 0$ , для нечетных –  $\sigma_1 = 0, \sigma_2 = 1$ .

Прямое использование разностной схемы для численного решения уравнения (5) связано с численным решением сеточного эллиптического уравнения четвертого порядка, что достаточно сложно с точки зрения вычислительной трудоемкости. Поэтому целесообразно выполнить переход к аддитивной схеме расщепления по пространственным переменным [3] вида

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\tau} + \sum_{\beta=1}^2 (E + \alpha \sigma \tau \Lambda_\beta^2)^{-1} (\alpha \Lambda_\beta^2 - \Lambda_\beta) y_n = 0$$

Помимо уменьшения вычислительной сложности, переход к усреднено-аддитивной схеме позволяет организовать параллельные вычисления, т.к. в таком случае требуется решать серию локально-одномерных, независимых по данным задач. Из этих же соображений для решения прямых задач также выбрана аддитивно-усредненная схема.

### 3. Математическая модель гидродинамики

Входными данными сконструированной выше обратной эволюционной задачи распространения и переноса вещества, является поле вектора скорости, что требует, в свою очередь, построения математической модели движения водной среды. Исходными уравнениями гидродинамики мелководных водоемов являются [5-7]:

– уравнения движения (Навье – Стокса):

$$\begin{aligned} u'_t + uu'_x + vu'_y + wu'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_x + (\mu u'_x)'_x + (\mu u'_y)'_y + (v u'_z)'_z + 2\Omega(v \sin \theta - w \cos \theta), \\ v'_t + uv'_x + vv'_y + wv'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_y + (\mu v'_x)'_x + (\mu v'_y)'_y + (v v'_z)'_z - 2\Omega u \sin \theta, \\ w'_t + uw'_x + vw'_y + ww'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_z + (\mu w'_x)'_x + (\mu w'_y)'_y + (v w'_z)'_z + 2\Omega u \cos \theta; \end{aligned} \quad (12)$$

– уравнение неразрывности в случае переменной плотности запишется следующим образом:

$$\rho'_t + (\rho u)'_x + (\rho v)'_y + (\rho w)'_z = 0. \quad (13)$$

где  $U = \{u, v, w\}$  – компоненты вектора скорости,  $p$  – превышение давления над гидростатическим давлением невозмущенной жидкости,  $\rho$  – плотность,  $\Omega$  – угловая скорость вращения земли,  $\theta$  – угол между вектором угловой скорости и вертикалью,  $\mu, \nu$  – горизонтальная и вертикальная составляющая коэффициента турбулентного обмена.

Система уравнений (12) – (13) рассматривается при следующих граничных условиях:

– на входе (устье рек Дон и Кубань) –

$$u(x, y, z, t) = u(t), \quad v(x, y, z, t) = v(t), \quad p'_n(x, y, z, t) = 0, \quad \bar{u}'_n(x, y, z, t) = 0,$$

– боковая граница (берег и дно) –

$$\rho_v \mu (u')_n(x, y, z, t) = -\tau_x(t), \quad \rho_v \mu (v')_n(x, y, z, t) = -\tau_y(t), \quad \bar{u}'_n(x, y, z, t) = 0, \quad p'_n(x, y, z, t) = 0,$$

– верхняя граница –

$$\rho \mu (u')_n(x, y, z, t) = -\tau_x(t), \quad \rho \mu (v')_n(x, y, z, t) = -\tau_y(t), \quad (14)$$

$$w(x, y, t) = -\omega - p'_t / \rho g, \quad p'_n(x, y, t) = 0,$$

– на выходе (Керченский пролив) –

$$p'_n(x, y, z, t) = 0, \quad \bar{u}'_n(x, y, z, t) = 0,$$

где  $\omega$  - интенсивность испарения жидкости,  $\tau_x, \tau_y$  - составляющие тангенциального напряжения (закон Ван-Дорна),  $\rho_v$  - плотность взвеси.

Составляющие тангенциального напряжения для свободной поверхности:

$$\tau_x = \rho_a C_p (|\vec{w}|) w_x |\vec{w}|, \quad \tau_y = \rho_a C_p (|\vec{w}|) w_y |\vec{w}|,$$

где  $\vec{w}$  - вектор скорости ветра относительно воды,  $\rho_a$  - плотность атмосферы,

$$C_p(x) = \begin{cases} 0.0088, & x < 6,6 \text{ м/с} \\ 0.0026, & x \geq 6,6 \text{ м/с} \end{cases} \text{ — безразмерный коэффициент.}$$

Составляющие тангенциального напряжения для дна, с учетом введенных обозначений, могут быть записаны следующим образом:

$$\tau_x = \rho C_p (|\vec{u}|) u |\vec{u}|, \quad \tau_y = \rho C_p (|\vec{u}|) v |\vec{u}|.$$

Рассмотренная ниже аппроксимация позволяет на основании измеренных (или вычисленных) пульсаций скоростей получить коэффициент вертикального турбулентного обмена, неоднородный по глубине [9], в соответствии с формулой:

$$\nu = C_s^2 \Delta^2 \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{V}}{\partial z}\right)^2}, \quad (15)$$

где  $\bar{U}, \bar{V}$  осредненные по времени пульсации горизонтальных компонент скорости,  $\Delta$  - характерный масштаб сетки,  $C_s$  - безразмерная эмпирическая константа, значение которой обычно определяется на основе расчета процесса затухания однородной изотропной турбулентности.

### 3.1 Построение и исследование дискретной модели

Расчетная область вписана в параллелепипед. Для численной реализации дискретной математической модели поставленной задачи гидродинамики вводится равномерная сетка:

$$\vec{w}_n = \{t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z; n = 0..N_t, i = 0..N_x, j = 0..N_y, k = 0..N_z; \\ N_t \tau = T, N_x h_x = l_x, N_y h_y = l_y, N_z h_z = l_z\},$$

где  $\tau$  - шаг по времени,  $h_x, h_y, h_z$  - шаги по пространству,  $N_t$  - количество временных слоев,  $T$  - верхняя граница по временной координате,  $N_x, N_y, N_z$  - количество узлов по пространственным координатам,  $l_x, l_y, l_z$  - границы параллелепипеда в направлении осей  $Ox, Oy$  и  $Oz$  соответственно.

Для решения задачи гидродинамики использовался метод поправки к давлению [7,8]. Вариант данного метода в случае переменной плотности примет вид:

$$\frac{\tilde{u} - u}{\tau} + u\tilde{u}'_x + v\tilde{u}'_y + w\tilde{u}'_z = (\mu\tilde{u}'_x)'_x + (\mu\tilde{u}'_y)'_y + (\nu\tilde{u}'_z)'_z + 2\Omega(v \sin \theta - w \cos \theta), \\ \frac{\tilde{v} - v}{\tau} + u\tilde{v}'_x + v\tilde{v}'_y + w\tilde{v}'_z = (\mu\tilde{v}'_x)'_x + (\mu\tilde{v}'_y)'_y + (\nu\tilde{v}'_z)'_z - 2\Omega u \sin \theta, \\ \frac{\tilde{w} - w}{\tau} + u\tilde{w}'_x + v\tilde{w}'_y + w\tilde{w}'_z = (\mu\tilde{w}'_x)'_x + (\mu\tilde{w}'_y)'_y + (\nu\tilde{w}'_z)'_z + 2\Omega u \cos \theta, \quad (16)$$

$$p''_{xx} + p''_{yy} + p''_{zz} = \frac{\hat{\rho} - \rho}{\tau^2} + \frac{(\hat{\rho}\tilde{u})'_x}{\tau} + \frac{(\hat{\rho}\tilde{v})'_y}{\tau} + \frac{(\hat{\rho}\tilde{w})'_z}{\tau}, \\ \frac{\hat{u} - \tilde{u}}{\tau} = -\frac{1}{\rho} \hat{p}'_x, \quad \frac{\hat{v} - \tilde{v}}{\tau} = -\frac{1}{\rho} \hat{p}'_y, \quad \frac{\hat{w} - \tilde{w}}{\tau} = -\frac{1}{\rho} \hat{p}'_z,$$

где  $\{u, v, w\}$  - компоненты вектора скорости,  $\{\hat{u}, \hat{v}, \hat{w}\}, \{\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}\}$  - компоненты полей вектора скорости на «новом» и промежуточном временных слоях соответственно,  $\bar{u} = (\tilde{u} + u) / 2$ ,  $\hat{\rho}$  и

$\rho$  - распределение плотности водной среды на новом и предыдущем временных слоях соответственно.

При построении дискретных математических моделей гидродинамики также учитывалась «заполненность» [4] контрольных ячеек, что позволяет повысить реальную точность решения в случае сложной геометрии исследуемой области за счет улучшения аппроксимации границы.

Через  $o_{i,j,k}$  обозначена «заполненность» ячейки  $(i, j, k)$ . Степень «заполненности» ячейки определяется давлением столба жидкости внутри данной ячейки. Если среднее давление в узлах, которые относятся к вершинам рассматриваемой ячейки, больше давления столба жидкости внутри ячейки, то ячейка считается заполненной полностью ( $o_{i,j,k} = 1$ ). В общем случае «заполненность» ячеек можно вычислить по следующей формуле:

$$o_{i,j,k} = \frac{P_{i,j,k} + P_{i-1,j,k} + P_{i,j-1,k} + P_{i-1,j-1,k}}{4\rho gh_z}, \quad (17)$$

где  $P = p + \rho gz$  – давление.

Погрешность аппроксимации математической модели равна  $O(\tau + \|h\|^2)$ , где  $\|h\| = \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2}$ . Доказано сохранение потока на дискретном уровне разработанной гидродинамической модели, а также отсутствие неконсервативных диссипативных слагаемых, полученных в результате дискретизации системы уравнений. Достаточное условие устойчивости и монотонности разработанной модели определяется на основе принципа максимума [10] при ограничениях на шаг по пространственным координатам:

$$h_x < |2\mu / u|, \quad h_y < |2\mu / v|, \quad h_z < |2\nu / w| \quad \text{или} \quad \text{Re} \leq 2N,$$

где  $\text{Re} = |V| \cdot l / \mu$  – числа Рейнольдса,  $l$  – характерный размер области,  $N = \max\{N_x, N_y, N_z\}$ .

Дискретные аналоги системы уравнений (16) решаются адаптивным модифицированным попеременно – треугольным методом вариационного типа [11-13].

## 4. Параллельные алгоритмы

### 4.1 Параллельная реализация для систем с общей памятью

Параллельная реализация основана на том факте, что при выборе аддитивно-усредненной схемы расщепления по пространственным переменным, получаемые локально-одномерные задачи не зависят по данным и могут решаться одновременно. В рассматриваемом двухмерном случае необходимо выполнить два шага расщепления.

Так как аддитивно-усредненная схема выбрана и для прямой и для обратной задачи, то принцип параллельного выполнения одинаков для обеих задач, разница заключается лишь в том, что использование аддитивно-усредненной схемы для прямой задачи приводит к необходимости решать трехдиагональные СЛАУ, а для обратной задачи — пятидиагональные СЛАУ. Такие СЛАУ решаются методом, соответственно, трех- и пятидиагональной прогонки [3].

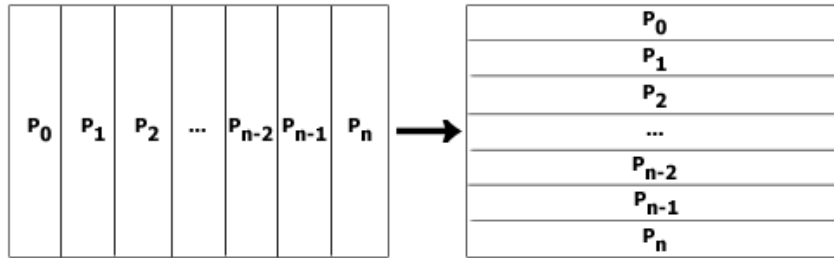
Время, необходимое для решения таких СЛАУ на системе с общей памятью [14], имеющей  $k$  вычислителей можно оценить, соответственно, как:

$\frac{(7 \cdot N \cdot M + 7 \cdot M \cdot N)t_a}{k}$  и  $\frac{(23 \cdot N \cdot M + 23 \cdot M \cdot N)t_a}{k}$ , где  $t_a$  - время выполнения одной арифметической операции,  $N$  и  $M$  - размеры вычислительной области.

После выполнения всех ( $K$ ) шагов по времени, для каждой из задач, выполняется расчет невязки, требующий времени  $5 \cdot N \cdot M \cdot t_a$  для выполнения арифметических операций.

## 4.2 Параллельная реализация для систем с распределенной памятью

Параллельная реализация для систем с распределенной памятью отличается необходимостью выполнять транспонирование матрицы на решающем поле, **Рис. 1**.



**Рис. 1.** Распределение неизвестных по узлам, транспонирование

При этом между шагами расщепления по пространственным переменным необходимо передать  $N \cdot M \cdot (1 - 1/p)$  чисел с плавающей запятой двойной точности, т.е.  $N \cdot M \cdot (1 - 1/p) \cdot 8$  байт. Здесь  $p$  - количество вычислителей в системе с распределенной памятью. Этот объем данных передается за  $p$  операций передач. Таким образом, время затрачиваемое на передачу этих данных составляет  $p \cdot t_l + N \cdot M \cdot (1 - 1/p) \cdot 8 \cdot t_{1b}$ . Здесь  $t_l$  - латентность (время необходимое для инициализации передачи), а  $t_{1b}$  - время, необходимое на передачу одного байта информации.

Для перехода к следующему шагу по времени для прямой задачи затрачивается время  $((7 \cdot N \cdot M + 7 \cdot M \cdot N)t_a)/p$  на арифметические операции и  $2(p \cdot t_l + N \cdot M \cdot (1 - 1/p) \cdot 8 \cdot t_{1b})$  на операции обмена, для обратной задачи время обмена такое же, а время выполнения арифметических операций составляет  $((23 \cdot N \cdot M + 23 \cdot M \cdot N)t_a)/p$ . После выполнения всех  $(K)$  шагов по времени, для каждой из задач, выполняется расчет невязки, требующий времени  $5 \cdot N \cdot M \cdot t_a$  для выполнения арифметических операций и  $t_l + p \cdot 8 \cdot t_{1b}$  на выполнения операций обмена.

## 4.3 Параллельная реализация для гибридных систем

Параллельная реализация для гибридных систем фактически совмещает подходы использованные в реализациях для систем с общей и распределенной памятью. А именно, данные распределяются между узлами вычислительной системы как для системы с распределенной памятью, имеют место те же самые обмены, как для системы с распределенной памятью. При этом на каждом узле, которой является системой с общей памятью, все выделенные ему локально-одномерные задачи решаются параллельно, как на системе с общей памятью.

Таким образом, используя полученные ранее оценки для времени параллельного выполнения на системах с общей и распределенной памятью, выражение для ускорения при выполнении на гибридной вычислительной системе может быть записано в следующем виде:

$$S_p = \frac{60 \cdot L \cdot t_a \cdot K + 5 \cdot L \cdot t_a}{5 \cdot L \cdot t_a + K \cdot (4 \cdot p \cdot t_l + L \cdot (1 - 1/p) \cdot 8 \cdot t_{1b} + 60 \cdot L \cdot t_a / (k \cdot p)) + t_l + p \cdot 8 \cdot t_{1b}},$$

где  $L = M \cdot N$  - характерный размер задачи.

Тогда эффективность параллельного выполнения на гибридной вычислительной системе:

$$E_p = \frac{S_p}{k \cdot p}$$

Масштабируемость предложенного параллельного алгоритма может выполняться до тех пор, пока  $\min(M, N) \geq k \cdot p$ .

Подставим в полученные оценки данные имеющейся в ЮФУ гибридной вычислительной системы. Вычислительная система ЮФУ обладает следующими характеристиками:

$$t_l = 1.82 \cdot 10^{-6} c, t_{lb} = 8.16 \cdot 10^{-13} c, t_a = 1.09 \cdot 10^{-10} c.$$

Подставляя эти данные, построим график для теоретической оценки ускорения (рис. 2 сплошная кривая), который достаточно хорошо согласуется с экспериментально полученными данными ускорения для гибридной супервычислительной системы ЮФУ (пунктирная кривая).

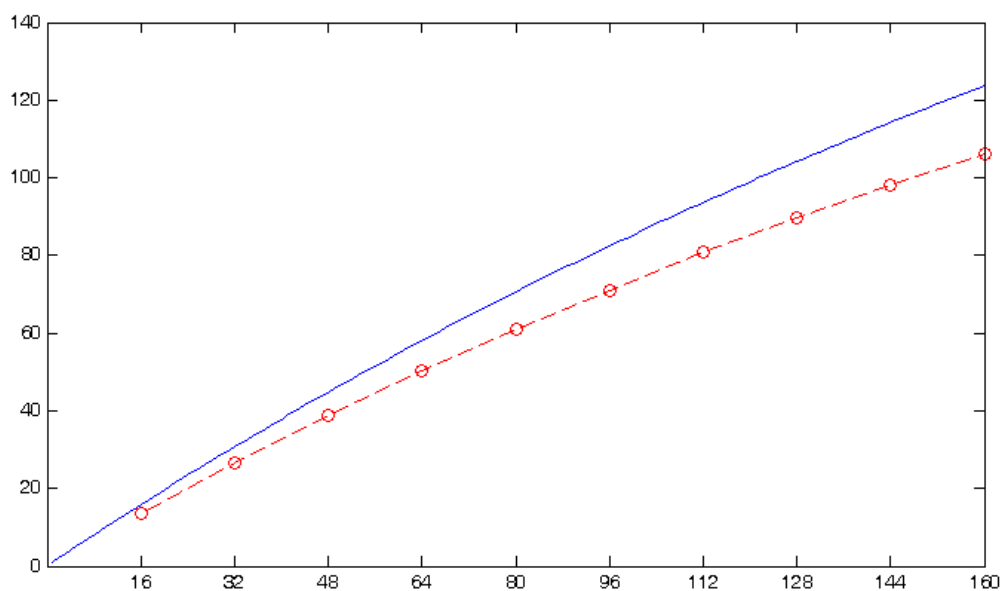
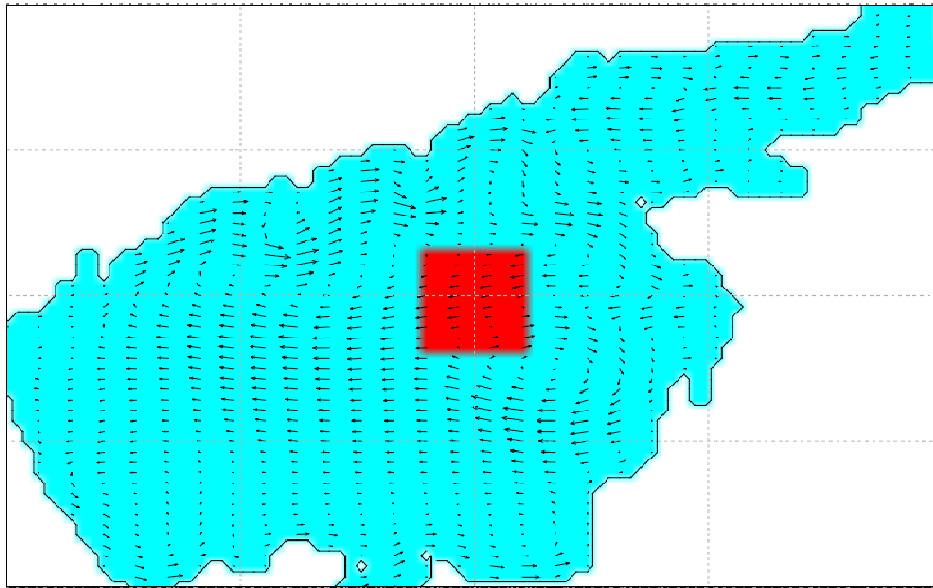


Рис. 2. Зависимости ускорения от числа процессоров. Гладкая кривая – теоретическая зависимость, ломаная – экспериментальная

## 5. Результаты численных экспериментов

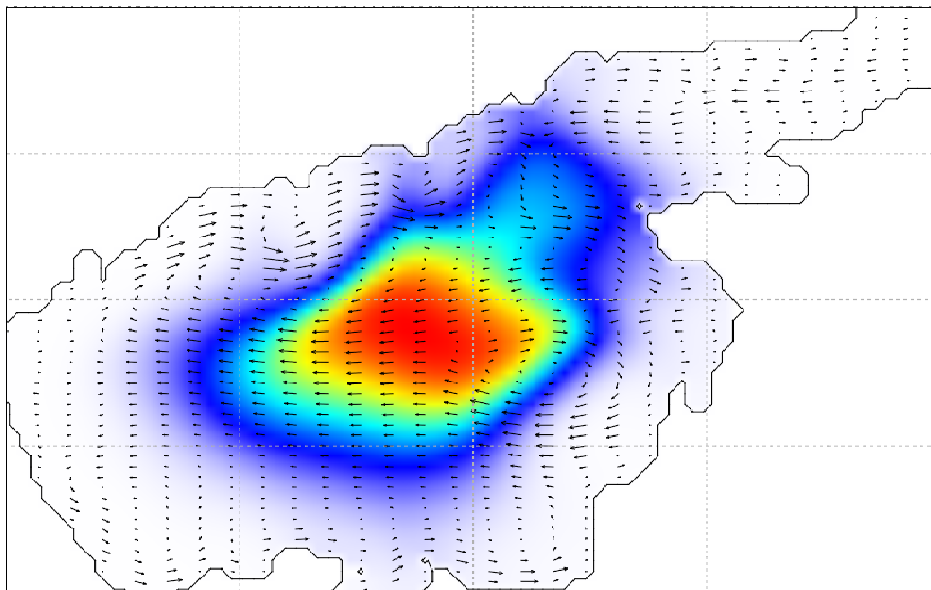
Численные эксперименты выполнялись на супервычислительной системе ЮФУ, представляющей собой гибридную вычислительную систему, состоящую из 128 узлов, объединенных сетью Infiniband 4x DDR ConnectX. Каждый вычислительный узел, в свою очередь, оборудован четырьмя 4-х ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и 32-мя гигабайтами оперативной памяти. Используемые в статье оценки производительности сетевой инфраструктуры вычислительной системы ЮФУ получены в результате выполнения тестирования в пакете Pallas MPI benchmark.

Поля скоростей водного потока, рассчитанные на основе математической модели (12)–(14), относятся к входным данным для модели транспорта вещества (1)–(2). На основе разработанных алгоритмов был построен комплекс программ, предназначенный для моделирования возможных сценариев развития экосистемы Азовского моря. На основе разработанного комплекса программ был поставлен численный эксперимент, результаты которого приведены на **Рис. 3** – **Рис. 5**. При численном решении задачи в начальный момент времени поле концентрации загрязняющих веществ распределено равномерно в некоторой части водоема, данная область показана на **Рис. 3**. После чего была решена задача транспорта веществ, результаты расчетов приведены на **Рис. 4**. Палитрой показано значение концентрации вещества.



**Рис. 3.** Исходное распределение концентрации загрязняющих веществ (начальное распределения для прямой задачи)

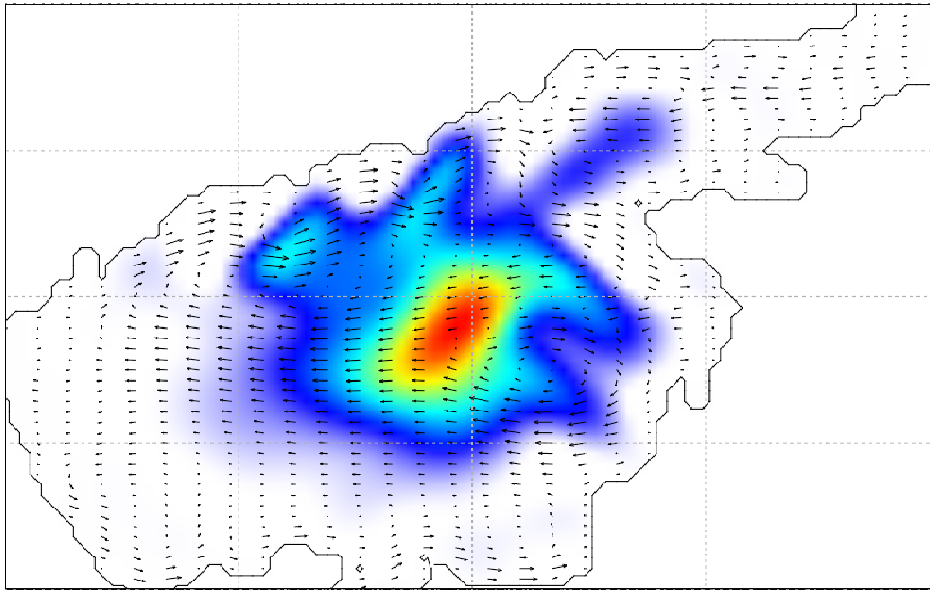
Максимальное значение концентрации загрязняющих веществ для решенной прямой задачи (**Рис. 5**) составляет 45% от исходного значения концентрации в точке выброса (**Рис. 4**). Максимальное значение концентрации загрязняющих веществ для обратной задачи (**Рис. 6**) составляет 65%.



**Рис. 4.** Распределение концентрации загрязняющих веществ через заданный интервал времени (решение прямой задачи)

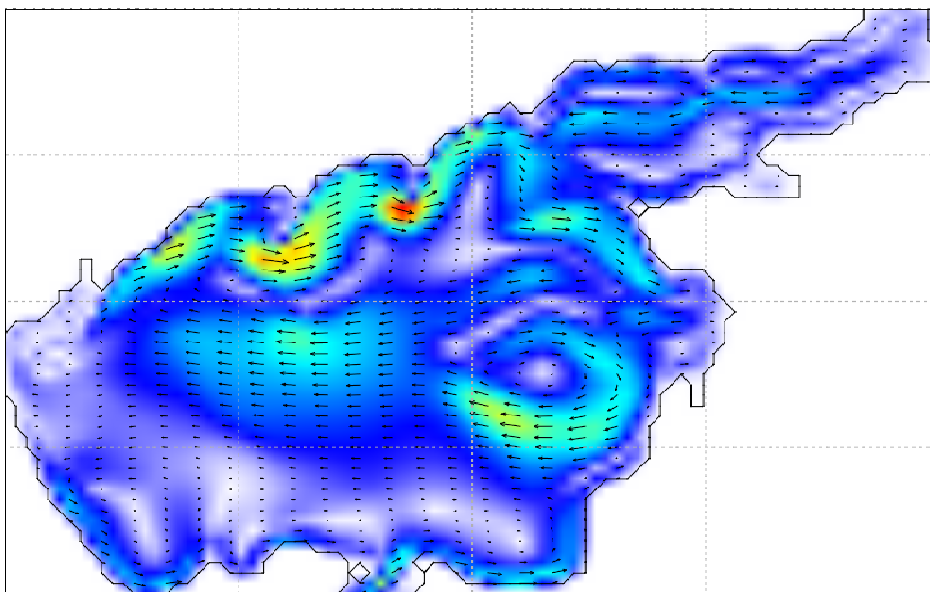
Поле концентрации загрязняющих веществ, приведенные на **Рис. 4**, относится к входным данным для обратной задачи транспорта вещества. Результаты расчета обратной задачи приведены на **Рис. 5**.





**Рис. 5.** Восстановленное распределение концентрации загрязняющих веществ (решение обратной задачи)

Ниже приведены результаты численных экспериментов по моделированию течений в Азовском море (**Рис. 6**). Палитрой показана интенсивность течения.



**Рис. 6.** Поле вектора скорости движения водной среды при западном ветре 5 м/с (баротропные течения)

Из **Рис. 3- Рис. 5** видно, что при решении обратной задачи транспорта вещества (**Рис. 5**) исходное поле концентрации (**Рис. 3**) восстанавливается частично, однако, несмотря на это, предложенная математическая модель позволяет достаточно точно восстановить сценарий распространения загрязняющих веществ (экологической катастрофы). Из приведенных результатов расчетов также видно, что при решении обратной задачи происходит локализации области, где предположительно, изначально было распределено загрязняющее вещество (локализация предположительной области выброса загрязняющих веществ). Следует отметить, что точность восстановления исходной концентрации загрязняющих веществ зависит от структуры течения и расчетного временного интервала, а также значения регуляризирующего параметра.

## 6. Заключение

Отличительными особенностями разрабатываемых алгоритмов являются: высокая производительность, достоверность и приемлемая точность получаемых результатов. Высокая производительность достигается за счет использования эффективных численных методов решения сеточных уравнений, ориентированных для применения на параллельных вычислительных системах в реальном и ускоренном масштабах времени. Достоверность достигается за счет учета определяющих физических факторов, таких как: сила Кориолиса, турбулентный обмен, сложная геометрия дна и береговой линии, испарение, стоки рек, динамическое перестроение расчетной области, ветровые напряжения и трение о дно, а также за счет учета отклонения значения поля давления от гидростатического приближения. Точность достигается применением подробных расчетных сеток, учитывающих степень «заполненности» расчетных ячеек, а также отсутствием неконсервативных и диссипативных слагаемых и нефизичных источников (стоков), в дискретных аппроксимациях исходных задач.

## Литература

1. Самарский А. А., Вабищевич П. Н., Васильев В. И., “Итерационное решение ретроспективной обратной задачи теплопроводности”, Матем. моделирование, 9:5 (1997), 119–127
2. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я., Методы решения некорректных задач — М.: Наука, 1979.
3. Самарский А.А., Вабищевич П.Н., Численные методы решения обратных задач математической физики — М.: Эдиториал УРСС, 2004
4. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Тимофеева Е.Ф., Шишени А.В. Математическая модель расчета прибрежных волновых процессов// Математическое моделирование. – 2012. – Т.24, №8, – С. 32–44.
5. Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е. Моделирование сценария биологической реабилитации Азовского моря // Математическое моделирование. – 2012. – Т.24, №9, – С. 3–21.
6. Сухинов А.И., Чистяков А.Е. Параллельная реализация трехмерной модели гидродинамики мелководных водоемов на супервычислительной системе// Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии. – 2012. – Т.13. – С. 290–297.
7. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Алексеенко Е.В. Численная реализация трехмерной модели гидродинамики для мелководных водоемов на супервычислительной системе". Математическое моделирование. 2011. Т. 23, № 3. – С.3-21.
8. Белоцерковский О. М., Гущин В. А., Щенников В. В.. Метод расщепления в применении к решению задач динамики вязкой несжимаемой жидкости. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 15:1 (1975), 197–207.
9. Белоцерковский О. М. Турбулентность: новые подходы - М.: Наука, 2003
10. Самарский А.А. Теория разностных схем. М. Наука, 1989.
11. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М. Наука, 1978.
12. Коновалов А.Н. К теории попеременно - треугольного итерационного метода// Сибирский математический журнал, 2002, 43:3, с. 552-572.
13. Сухинов А.И., Чистяков А.Е. Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором// Математическое моделирование. – 2012. – Т.24, №1, – С. 3–21.
14. Воеводин В. В., Воеводин Вл. В., Параллельные вычисления — СПб.: БХВ-Петербург, 2004, сс. 134-154.