

# **РЕАЛИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФИТО- И ЗООПЛАНКТОНА В АЗОВСКОМ МОРЕ**



**доктор физико-математических наук,  
профессор, зав. кафедрой математического  
обеспечения суперкомпьютеров ЮФУ**

**Сухинов Александр Иванович**

**кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры высшей математики  
ЮФУ**

**Никитина Алла Валерьевна**

**аспирант кафедры математического  
обеспечения суперкомпьютеров ЮФУ**

**Семенов Илья Сергеевич**

Ростов-на-Дону 2014

# Предметная область

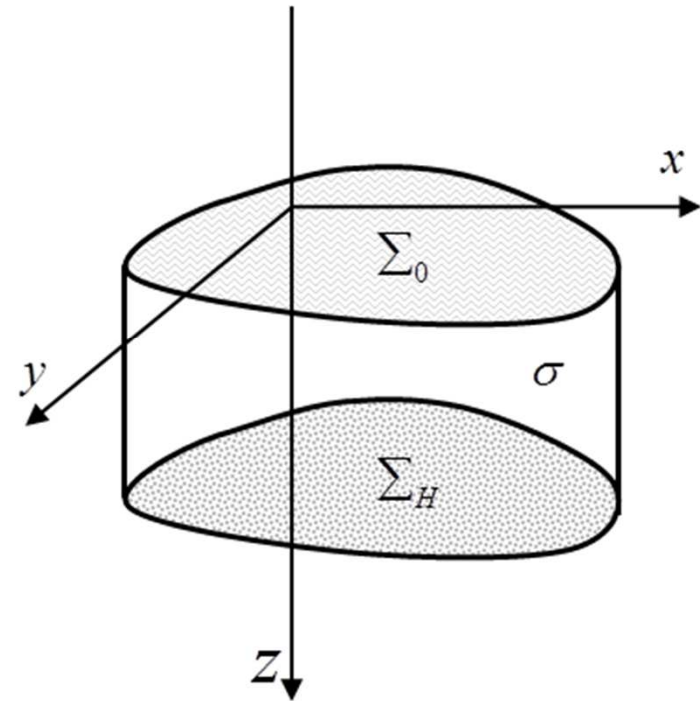
- Работа посвящена разработке параллельного алгоритма, учитывающего архитектуру суперЭВМ с общей и распределенной памятью. Параллельный алгоритм разрабатывается для численного решения задачи биологической кинетики на примере модели взаимодействия фито- и зоопланктона. Использование библиотеки MPI обеспечивает лучшее распределение ресурсов компьютера и прирост эффективности алгоритма на распределенных вычислительных системах. В тоже время для систем с общей памятью используется OpenMP, что обеспечивает универсальность алгоритма для суперЭВМ с различными операционными системами.
- Для проведения численных экспериментов в реальных областях сложной формы используются многопроцессорные вычислительные системы. Для повышения эффективности вычислительных алгоритмов в основном используются библиотеки MPI, OpenMP и API операционной системы. В данной работе реализован параллельный алгоритм для систем с распределенной памятью, в котором используются средства библиотеки MPI.

# Расчетная область

3

За основу был взят последовательный алгоритм, с помощью которого было получено численное решение задачи биологической кинетики на примере задачи взаимодействия фито- и зоопланктона, имеющих наибольшее значение в питании рыб Азовского моря.

Область решения задачи  $\bar{G}$  представляет собой замкнутый бассейн, ограниченный невозмущенной поверхностью моря  $\Sigma_0$ , дном  $\Sigma_H = \Sigma_H(x, y)$  и боковой поверхностью  $\sigma$  ( $\Sigma = \Sigma_H \cup \Sigma_0 \cup \sigma$ ). Рассмотрим модель, учитывающую не только пространственно-неоднородное распределение фито- и зоопланктона, биогенов, межвидовую конкуренцию, движение водного потока, но и температурный и кислородный режимы.



**Модель взаимодействия токсичной синезеленой водоросли  
*Aphanizomenon flos-aquae*, зелёной водоросли *Chlorella Vulgaris* BIN и  
зоопланктона *Bosmina longirostris***

4

В модели значительную роль играет зоопланктон – *Bosmina longirostris*, способный употреблять в пищу как зеленые, так и синезеленые водоросли, тем самым снижая их концентрацию.

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}X_1) = \mu_1 \Delta X_1 + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_1 \frac{\partial X_1}{\partial z} \right) + \alpha_1 \psi_1(S) X_1 - g_1(X_1, Z) - \theta_1 X_1 X_2 - \varepsilon_1 X_1,$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}X_2) = \mu_2 \Delta X_2 + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_2 \frac{\partial X_2}{\partial z} \right) + \alpha_2 \psi_2(S) X_2 - g_2(X_2, Z) - \theta_2 X_1 X_2 - \varepsilon_2 X_2,$$

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}Z) = \mu_z \Delta Z + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_z \frac{\partial Z}{\partial z} \right) + \alpha_z \psi_z(X_1, X_2) Z - \lambda(M_2) Z,$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}S) = \mu_s \Delta S + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_s \frac{\partial S}{\partial z} \right) - \varphi_s(X_1, X_2) + \varepsilon_1 X_1 + \varepsilon_2 X_2 + \lambda(M_2) Z + B(S_p - S) + f,$$

$$\frac{\partial M_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}M_1) = \mu_3 \Delta M_1 + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_3 \frac{\partial M_1}{\partial z} \right) + k_1 X_1 - \varepsilon_3 M_1,$$

$$\frac{\partial M_2}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}M_2) = \mu_4 \Delta M_2 + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_4 \frac{\partial M_2}{\partial z} \right) + k_2 X_2 - \varepsilon_4 M_2.$$

# Обозначения

5

$X_i$  – концентрация зеленых (*Chlorella Vulgaris* BIN) и синезеленых водорослей (*Aphanizomenon*) соответственно,  $i = \overline{1,2}$ ;

$Z$  – концентрация зоопланктона (*Bosmina Longirostris*);  $S$  – концентрация биогенного вещества;

$M_i$  – концентрация метаболита  $i$ -го вида;  $\Delta$  – двумерный оператор Лапласа;  $\alpha_z$  – скорость роста зоопланктона;

$\mu_r, \mu_z, \mu_s, \nu_r, \nu_z, \nu_s$  – диффузионные коэффициенты в горизонтальном и вертикальном направлениях субстанций  $X_i, S, Z, M_i$   $r = \overline{1,4}$ ;

$\alpha_i = (\alpha_{0i} + \gamma_i M_i)$  – функция роста  $i$ -го вида;  $\gamma_i$  – параметр воздействия  $i$ -го вида;

$\alpha_{0i}$  – скорость роста в отсутствии метаболита  $i$ -го вида;  $g_i(X_i, Z)$  – функция поглощения зоопланктоном  $i$ -го вида фитопланктона;

$\psi_z(X_1, X_2)$  – функция, описывающая рост зоопланктона (*Bosmina Longirostris*) за счет потребления вида зеленых водорослей и угнетения синезеленых водорослей;

$\varphi_s(X_1, X_2)$  – функция потребления биогенного вещества водорослями;  $B$  – скорость поступления биогенного вещества;

$S_p$  – предельно возможная концентрация биогенного вещества;  $\varepsilon_i$  – коэффициенты смертности  $i$ -го вида;

$\mathbf{u}$  – поле скоростей водного потока;  $\mathbf{U} = \mathbf{u} + \mathbf{u}_{0i}$  – скорость конвективного переноса вещества;

$\mathbf{u}_{0i}$  – скорость осаждения  $i$ -й субстанции  $i \in \{X_1, X_2, Z, S, M_1, M_2\}$ ;  $\varepsilon_m$  – коэффициенты разложения метаболита,  $m \in \{3, 4\}$ ;

$\lambda$  – функция смертности зоопланктона, включающая в себя риск элиминации за счет метаболита синезеленой водоросли;

$k_i$  – коэффициенты экскреции  $i$ -го вида;  $f$  – функция источника биогенного вещества (загрязнения).

# Начальные и граничные условия непрерывной модели биологической кинетики

6

- Начальные условия:

$$X_i(x, y, z, 0) = X_{i0}(x, y, z), Z(x, y, z, 0) = Z_0(x, y, z), S(x, y, z, 0) = S_0(x, y, z),$$

$$M_i(x, y, z, 0) = M_{i0}(x, y, z), (x, y, z) \in \bar{G}, i \in \{1, 2\}, t = 0.$$

- Граничные условия:

$$X_i = Z = S = M_i = 0, i \in \{1, 2\} \text{ на } \sigma, \text{ если } u_n < 0; \frac{\partial X_i}{\partial n} = 0, \frac{\partial Z}{\partial n} = 0, \frac{\partial S}{\partial n} = 0, \frac{\partial M_i}{\partial n} = 0 \text{ на } \sigma, \text{ если } u_n \geq 0;$$

$$\frac{\partial X_i}{\partial z} = 0, \frac{\partial Z}{\partial z} = 0, \frac{\partial S}{\partial z} = 0, \frac{\partial M_i}{\partial z} = 0 \text{ на } \Sigma_0; \frac{\partial X_i}{\partial z} = -\xi_k X_i, \frac{\partial Z}{\partial z} = -\xi_Z Z, \frac{\partial S}{\partial z} = -\xi_S S, \frac{\partial M_i}{\partial z} = -\xi_k M_i \text{ на } \Sigma_H;$$

$\xi_k, \xi_Z, \xi_S, k = \overline{1, 4}$  – неотрицательные постоянные;

$\xi_Z$  – учитывает элиминацию зоопланктона и опускание его на дно;

$\xi_S, \xi_3, \xi_4$  – учитывает поглощение биогенного вещества и метаболитов зеленых и синезеленых водорослей донными отложениями.

$\xi_1, \xi_2$  – учитывает опускание водорослей на дно и их затопление;

## Расчетная сетка

7

$$\bar{\omega}_{h_x h_y h_z \tau} = \left\{ t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z; n = \overline{0..N_t}, i = \overline{0..N_x}, j = \overline{0..N_y}, k = \overline{0..N_z}; \right. \\ \left. N_t \tau = T, N_x h_x = l_x, N_y h_y = l_y, N_z h_z = l_z \right\} = \bar{\omega}_\tau \times \bar{\omega}_{h_x h_y h_z}$$

$\tau$  – шаг по времени;

$h_x, h_y, h_z$  – шаги по пространству;

$N_t$  – верхняя граница по времени,

$N_x, N_y, N_z$  – границы по пространству,

$l_x, l_y, l_z$  – характерные размеры модельной области  $G$ .

# Дискретная модель биологической кинетики

8

- Для дискретизации модели взаимодействия фито- и зоопланктона использовались схемы с центральными разностями следующего вида:

$$\tilde{X}_{(1)t}^{p+1} + U\tilde{X}_{(1)x}^{p+1} + V\tilde{X}_{(1)y}^{p+1} + W\tilde{X}_{(1)z}^{p+1} = \mu_1 \left( \tilde{X}_{(1)\bar{x}x}^{p+1} + \tilde{X}_{(1)\bar{y}y}^{p+1} \right) + \left( \nu_1 \tilde{X}_{(1)\bar{z}}^{p+1} \right)_z + \alpha_1 \tilde{S}^p \tilde{X}_{(1)}^{p+1} - \delta_1 \tilde{Z}^p \tilde{X}_{(1)}^{p+1} - \theta_1 \tilde{X}_{(2)}^p \tilde{X}_{(1)}^{p+1} - \varepsilon_1 \tilde{X}_{(1)}^{p+1},$$

$$\tilde{X}_{(2)t}^{p+1} + U\tilde{X}_{(2)x}^{p+1} + V\tilde{X}_{(2)y}^{p+1} + W\tilde{X}_{(2)z}^{p+1} = \mu_2 \left( \tilde{X}_{(2)\bar{x}x}^{p+1} + \tilde{X}_{(2)\bar{y}y}^{p+1} \right) + \left( \nu_2 \tilde{X}_{(2)\bar{z}}^{p+1} \right)_z + \alpha_2 \tilde{S}^p \tilde{X}_{(2)}^{p+1} - \delta_2 \tilde{Z}^p \tilde{X}_{(2)}^{p+1} - \theta_2 \tilde{X}_{(1)}^p \tilde{X}_{(2)}^{p+1} - \varepsilon_2 \tilde{X}_{(2)}^{p+1},$$

$$\tilde{Z}_t^{p+1} + U\tilde{Z}_x^{p+1} + V\tilde{Z}_y^{p+1} + W\tilde{Z}_z^{p+1} = \mu_z \left( \tilde{Z}_{\bar{x}x}^{p+1} + \tilde{Z}_{\bar{y}y}^{p+1} \right) + \left( \nu_z \tilde{Z}_{\bar{z}}^{p+1} \right)_z + p_1 \tilde{X}_{(1)}^p \tilde{Z}^{p+1} - p_2 \tilde{X}_{(2)}^p \tilde{Z}^{p+1} - \varepsilon_z \tilde{M}_{(2)}^p \tilde{Z}^{p+1},$$

$$\tilde{S}_t^{p+1} + U\tilde{S}_x^{p+1} + V\tilde{S}_y^{p+1} + W\tilde{S}_z^{p+1} = \mu_s \left( \tilde{S}_{\bar{x}x}^{p+1} + \tilde{S}_{\bar{y}y}^{p+1} \right) + \left( \nu_s \tilde{S}_{\bar{z}}^{p+1} \right)_z - \beta_1 \tilde{X}_{(1)}^p \tilde{S}^{p+1} - \beta_2 \tilde{X}_{(2)}^p \tilde{S}^{p+1} + \varepsilon_1 \tilde{X}_{(1)}^p + \varepsilon_2 \tilde{X}_{(2)}^p + \varepsilon_z \tilde{M}_{(1)}^p \tilde{Z}^{p+1} + B(S_p - \tilde{S}^{p+1}) + f,$$

$$\tilde{M}_{(m)t}^{p+1} + U\tilde{M}_{(m)x}^{p+1} + V\tilde{M}_{(m)y}^{p+1} + W\tilde{M}_{(m)z}^{p+1} = \mu_r \left( \tilde{M}_{(m)\bar{x}x}^{p+1} + \tilde{M}_{(m)\bar{y}y}^{p+1} \right) + \left( \nu_r \tilde{M}_{(m)\bar{z}}^{p+1} \right)_z + k_m \tilde{X}_{(m)}^{p+1} - \varepsilon_r \tilde{M}_{(m)}^{p+1}, \quad m \in \{1, 2\}, r \in \{3, 4\},$$

$\hat{X}_{(m)}, \hat{Z}, \hat{S}, \hat{M}_{(m)}, m \in \{1, 2\}$  – значения соответствующих функций в узлах сетки на  $n+1$ -м временном слое;

$\tilde{X} = \sigma \hat{X} + (1-\sigma) X, \sigma \in [0, 1]$  – вес схемы;

$p$  – номер итерации в итерационном процессе.



# Исследование дискретной модели биологической кинетики

9

- Погрешность аппроксимации

$O(\tau^2 + \|h\|^2)$  в случае  $\sigma = 1/2$ , где  $\|h\| = \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2}$ .

- Условие устойчивости и монотонности

$$\tau < \min\{\tau_1, \tau_2, \tau_3\},$$

$$\tau_i = \min \left[ (\sigma \|\varphi_i\|)^{-1}, \left( (1-\sigma) \left\| 2\mu / h_x^2 + 2\mu / h_y^2 + 2\nu / h_z^2 - \varphi_i \right\| \right)^{-1} \right], i = \overline{1, 3},$$

$$\|\varphi\| = \max |\varphi|, \varphi_1 = \alpha_1 S^n - \delta_1 Z^n - \theta_1 X_2^n - \varepsilon_1,$$

$$\varphi_2 = \alpha_2 S^n - \delta_2 Z^n - \theta_2 X_1^n - \varepsilon_2, \varphi_3 = p_1 X_1^n - p_2 X_2^n - \varepsilon_Z M_2^n.$$

# Метод решения сеточных уравнений

10

- Двухслойная итерационная схема:

$$B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, \dots,$$

- Алгоритм работы методов вариационного типа

1. Вычислить невязку  $r_k = Ay_k - f.$

2. Решить уравнение для поправки  $B\omega_k = r_k.$

3. Найти итерационный параметр

$$\tau_{k+1} = \frac{(D\omega_k, z_k)}{(D\omega_k, \omega_k)}, \quad k = 0, 1, \dots,$$

4. Вычисляем новое приближение

$$y_{k+1} = y_k - \tau_{k+1} \omega_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

# Метод решения сеточных уравнений

11

$$B \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau_{k+1}} + Ay_k = f, k = 0, 1, \dots, \quad \tau_{k+1} = \frac{(D\omega_k, z_k)}{(D\omega_k, \omega_k)}, k = 0, 1, \dots,$$

- Условия для применения метода минимальных поправок (ММП)

$A$  — положительно определенный оператор

$B$  — положительно определенный, самосопряженный оператор

$$D: D = A^* B^{-1} A; \quad \tau_{k+1} = \frac{(A\omega_k, \omega_k)}{(B^{-1} A\omega_k, A\omega_k)}, \quad k = 0, 1, \dots$$

# Методы декомпозиции. Метод k-means

12

- Метод k-means основан на минимизации функционала суммарной выборочной дисперсии разброса элементов относительно центра тяжести подобластей:

$$Q = Q^{(3)} = \sum_i \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} d^2(x, c_i) \rightarrow \min, i \in \{1, \dots, m\}$$

$X_i$  – множество расчетных узлов сетки, входящих в  $i$ -ю подобласть

$$c_i = \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} x \text{ – центр подобласти } X_i$$

$d(x, c_i)$  – расстояние между узлом сетки  $x$  и центром  $c_i$

# Алгоритм работы метода k-means

13

1. Выбираются начальные центры подобластей при помощи максиминного алгоритма. Все расчетные узлы разбиваются на  $m$  клеток Вороного по методу ближайшего соседа.

$$\|x - s_c\| = \min_{1 \leq i \leq m} \|x - s_i\|, x \in X_c;$$

$X_c$  – подобласть;  $s_c$  – центр подобласти  $X_c$

2. Рассчитываются новые центры по формуле  $s_c^{(k+1)} = \frac{1}{|X_i^{(k)}|} \sum_{x \in X_i^{(k)}} x$
3. Условие остановки:  $s_c^{(k+1)} = s_c^{(k)}$

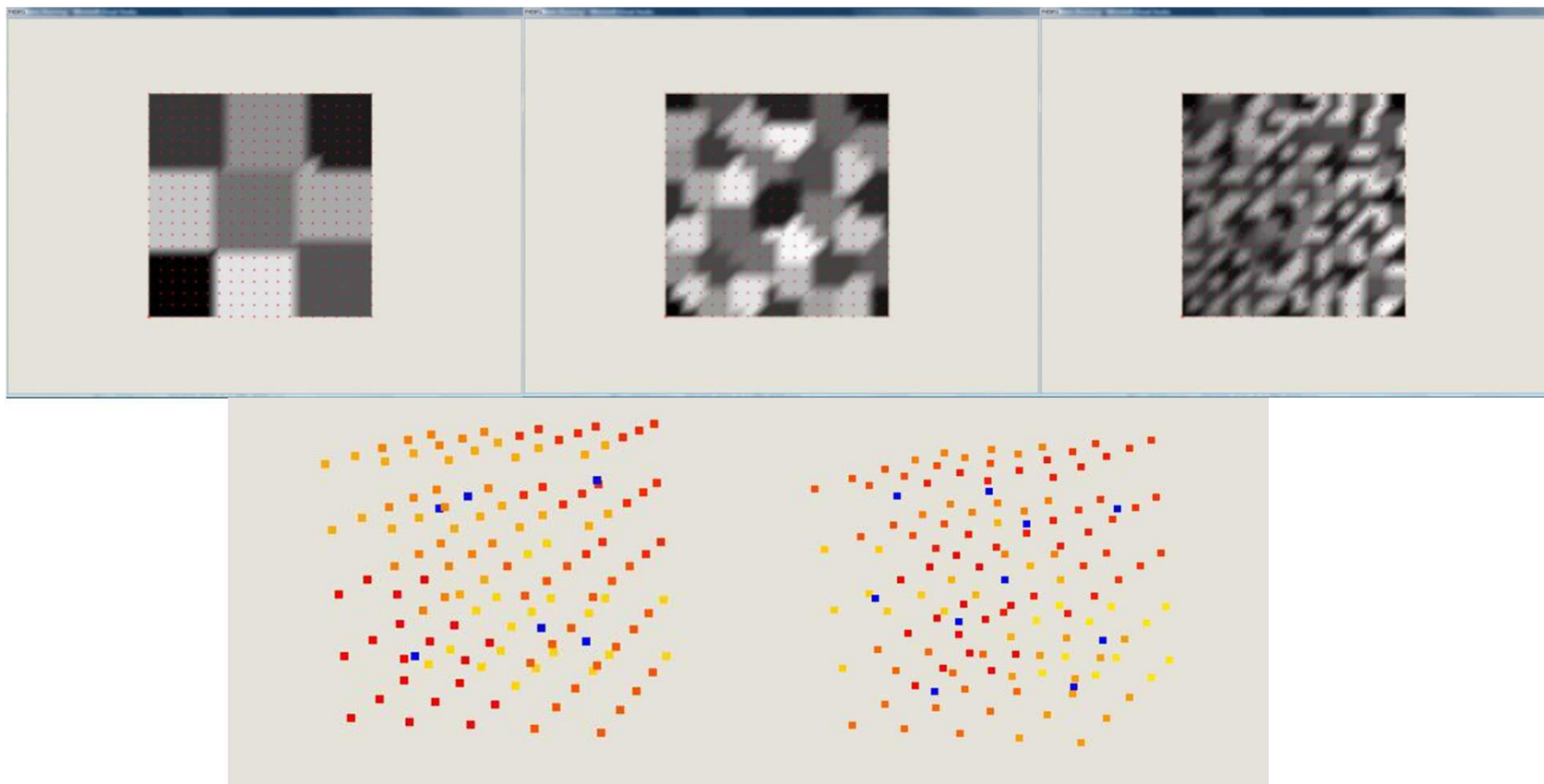
# Методы декомпозиции. Максимальный алгоритм

14

1. Первый центр – первый расчетный узел области.
2. Второй центр находится в расчетном узле сетки, расположенном на максимальном расстоянии от первого центра.
3. Если количество подобластей больше 3-х, то каждый следующий центр находится на максимальном удалении от ближайшего центра

# Результаты работы алгоритмов декомпозиции

15



Результат работы алгоритма k-means для разбиения модельной двумерной области на 9, 38, 150 подобластей; для трехмерной на 6 и 10

# Обмен данными

16



Расчет итерационного параметра

$$\tau_{k+1} = \frac{(A\omega_k, \omega_k)}{(B^{-1}A\omega_k, A\omega_k)}, k = 0, 1, \dots$$



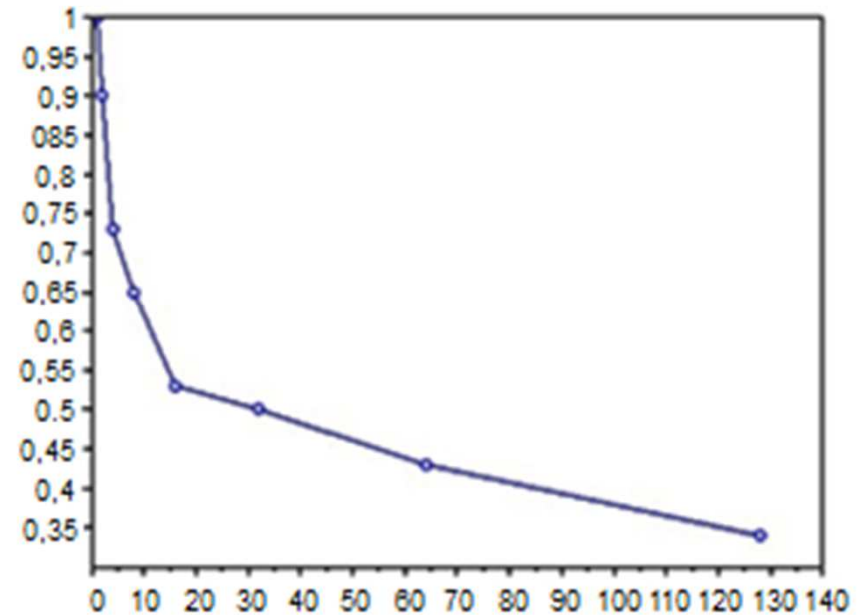
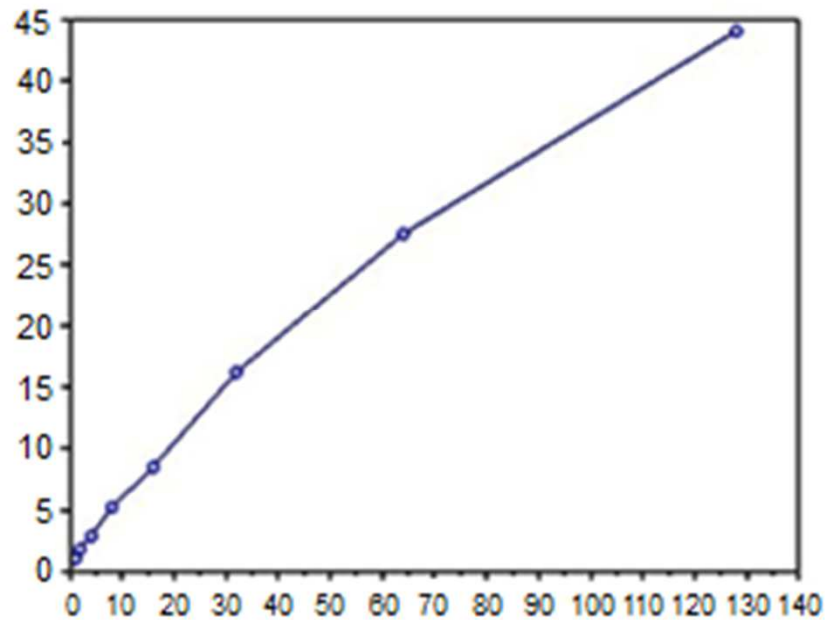
# Характеристики СуперЭВМ

17

- Многопроцессорная вычислительная система (МВС) ЮФУ, представляет собой распределенный аппаратно-программный комплекс коллективного доступа для высокопроизводительных научно-технических расчетов с применением приобретаемого и вновь создаваемого прикладного программного обеспечения.
- Пиковая производительность МВС составляет 18.8 TFlops. МВС включает в себя 8 компьютерных стоек. Вычислительное поле МВС построено на базе инфраструктуры HP Blade System c-class с интегрированными коммуникационными модулями, системами электропитания и охлаждения. В качестве вычислительных узлов используются 128 однотипных 16-ядерных серверов-лезвий HP ProLiant BL685c, каждый из которых оснащен четырьмя 4-ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и оперативной памятью в объеме 32ГБ.
- Общее количество вычислительных ядер в комплексе – 2048, суммарный объем оперативной памяти – 4 ТБ. Для управления МВС используется 3 управляющих сервера HP ProLiant DL385G5. Для задач резервного копирования используется библиотека MSL4048.

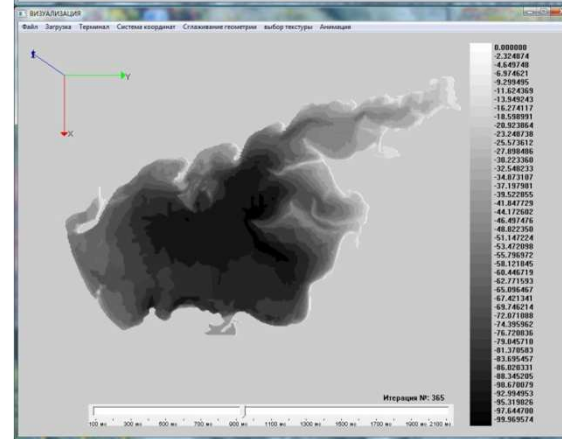
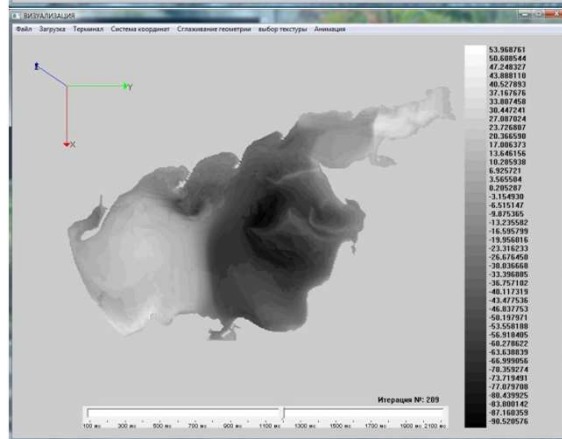
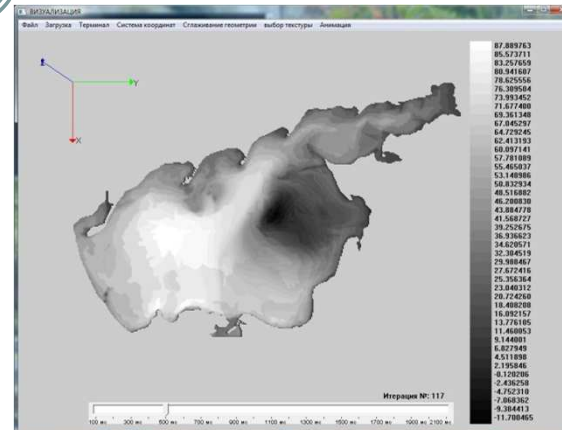
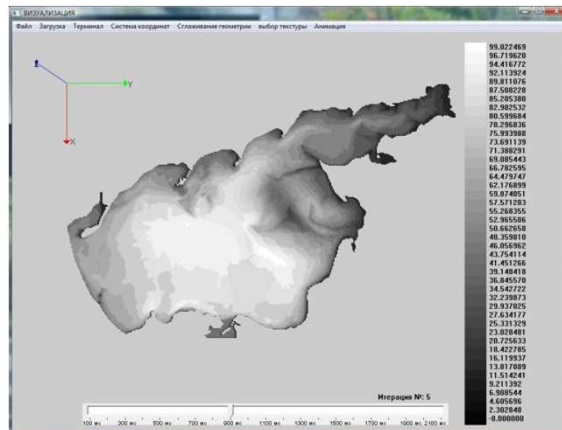
# Ускорение и эффективность задачи биологической кинетики

18



# Результаты численного моделирования

19



Совместное распределение концентраций синезеленой и зеленой водорослей для временных интервалов  $T=2, 39, 70, 122$  дня. Начальное распределение полей течений в Азовском море при северном ветре

# Заключение

- С помощью экспедиционных исследований проведена первичная верификация модели биологической кинетики на примере модели взаимодействия фито- и зоопланктона вида в Азовском море. В работе описан параллельный алгоритм численного решения задачи на основе ММП и алгоритма k-means.
- Предлагаемый алгоритм численного решения поставленной задачи на суперЭВМ позволяет существенно сократить время работы программного комплекса, численно реализующего описанную модельную задачу биологической кинетики в Азовском море.
- Математические модели биологической кинетики могут быть использованы для разработки возможных сценариев реабилитации мелководных водоемов с целью восстановления их экосистем до естественного уровня.

**Спасибо за внимание**