КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2016 Т. 8 № 1 С. 151–168



АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ ЖИВЫХ СИСТЕМ

УДК: 519.8

Численное моделирование экологического состояния Азовского моря с применением схем повышенного порядка точности на многопроцессорной вычислительной системе

А. И. Сухинов^{1,а}, А. Е. Чистяков^{2,b}, А. А. Семенякина^{2,c}, А. В. Никитина^{2,d}

 ¹ Донской государственный технический университет, Россия, 344000, Ростовская область, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, д. 1
 ² Научно-исследовательский институт многопроцессорных вычислительных систем им. академика А. В. Каляева Южного федерального университета, Россия, 347922, Ростовская область, г. Таганрог, ул. Чехова, д. 2
 E-mail: ^a sukhinov@gmail.com, ^b cheese_05@mail.ru, ^c j.a.s.s.y@mail.ru, ^d nikitina.vm@gmail.com

> Получено 13 мая 2015 г., после доработки 25 ноября 2015 г.

В статье приводятся результаты трехмерного моделирования экологического состояния мелководного водоема на примере Азовского моря с использованием схем повышенного порядка точности на многопроцессорной вычислительной системе Южного федерального университета. Для решения поставленной задачи были построены и изучены дискретные аналоги операторов конвективного и диффузионного переносов четвертого порядка точности в случае частичной заполненности ячеек расчетной области. Разработанные схемы повышенного (четвертого) порядка точности были использованы при решении задач водной экологии для моделирования пространственного распределения загрязняющих биогенных веществ, вызывающих бурный рост фитопланктона, многие виды которого являются токсичными и вредоносными. Использование схем повышенного порядка точности позволило повысить качество входных данных, а также уменьшить значение погрешности при решении модельных задач водной экологии. Были проведены численные эксперименты для задачи транспорта веществ на основе схем второго и четвертого порядков точностей, которые показали, что для задачи диффузии-конвекции удалось повысить точность в 48,7 раз. Предложен и численно реализован математический алгоритм, предназначенный для восстановления рельефа дна мелководного водоема на основе гидрографической информации (глубины водоема в отдельных точках или изолиний уровня), с помощью которого была получена карта рельефа дна Азовского моря, используемая для построения полей течений, рассчитанных на основе гидродинамической модели. Поля течений водного потока используются в работе в качестве входной информации для моделей водной экологии. Была разработана библиотека двухслойных итерационных методов, предназначенная для решения девятидиагональных сеточных уравнений, возникающих при дискретизации модельных задач изменения концентраций загрязняющих веществ, планктона и рыб на многопроцессорной вычислительной системе, что позволило повысить точность расчетных данных и дало возможность получать оперативные прогнозы изменения экологического состояния мелководного водоема в кратчайшие временные промежутки.

Ключевые слова: математическая модель, схема повышенного порядка точности, рельеф дна, транспорт веществ, задачи водной экологии, Азовское море, многопроцессорная вычислительная система

Citation: Computer Research and Modeling, 2016, vol. 8, no. 1, pp. 151–168 (Russian).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке задания № 2014/174 в рамках базовой части государственного задания Минобрнауки России.

© 2016 Александр Иванович Сухинов, Александр Евгеньевич Чистяков, Алена Александровна Семенякина, Алла Валерьевна Никитина

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2016 Т. 8 № 1 С. 151–168

Ки&М

АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ ЖИВЫХ СИСТЕМ

Numerical modeling of ecologic situation of the Azov Sea with using schemes of increased order of accuracy on multiprocessor computer system

A. I. Sukhinov¹, A. E. Chistyakov², A. A. Semenyakina², A. V. Nikitina²

¹ Don state technical University, 1 Gagarin sq., Rostov-on-don, 344000, Russia

² Scientific Researches Institute of Multiprocessor Computer Systems of academician A. V. Kalyaev of South Federal University, 2 Chekhov st., Taganrog, Rostov region, 347922, Russia

Abstract. — The article covered results of three-dimensional modeling of ecologic situation of shallow water on the example of the Azov Sea with using schemes of increased order of accuracy on multiprocessor computer system of Southern Federal University. Discrete analogs of convective and diffusive transfer operators of the fourth order of accuracy in the case of partial occupancy of cells were constructed and studied. The developed scheme of the high (fourth) order of accuracy were used for solving problems of aquatic ecology and modeling spatial distribution of polluting nutrients, which caused growth of phytoplankton, many species of which are toxic and harmful. The use of schemes of the high order of accuracy are improved the quality of input data and decreased the error in solutions of model tasks of aquatic ecology. Numerical experiments were conducted for the problem of transportation of substances on the basis of the schemes of the second and fourth orders of accuracy. They're showed that the accuracy was increased in 48.7 times for diffusion-convection problem. The mathematical algorithm was proposed and numerically implemented, which designed to restore the bottom topography of shallow water on the basis of hydrographic data (water depth at individual points or contour level). The map of bottom relief of the Azov Sea was generated with using this algorithm. It's used to build fields of currents calculated on the basis of hydrodynamic model. The fields of water flow currents were used as input data of the aquatic ecology models. The library of double-layered iterative methods was developed for solving of nine-diagonal difference equations. It occurs in discretization of model tasks of challenges of pollutants concentration, plankton and fish on multiprocessor computer system. It improved the precision of the calculated data and gave the possibility to obtain operational forecasts of changes in ecologic situation of shallow water in short time intervals.

Keywords: mathematical model, scheme of high order of accuracy, bottom topography, transport of substances, aquatic ecology tasks, Azov Sea, multiprocessor computer system

Citation: Computer Research and Modeling, 2016, vol. 8, no. 1, pp. 151-168 (Russian).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Задания № 2014/174 в рамках базовой части государственного задания Минобрнауки России.

© 2016 Александр Иванович Сухинов, Александр Евгеньевич Чистяков, Алена Александровна Семенякина, Алла Валерьевна Никитина

Введение

В последние десятилетия наметилась негативная тенденция сокращения численностей популяций ценных и промысловых рыб, таких как осетр, стерлядь, белуга, судак, лещ, тарань, рыбец и др. Антропогенное воздействие и эволюция природно-климатических условий приводят к эвтрофикации вод Азовского моря, вызывающей бурный рост популяций фитопланктона, многие виды которого являются вредоносными и токсичными, вызывают онкологические заболевания у людей.

Создание математического и программно-алгоритмического инструментария позволяет осуществлять предсказательное моделирование значимых пространственных гидробиологических процессов распределения загрязняющих веществ, планктона и рыб с использованием данных относительно недорогих, не оказывающих негативного влияния на экосистему, экспериментов. Ввиду того, что гидробиологические процессы существенно влияют на качество вод, воспроизводство и сохранность промысловых рыбных запасов, построение их математических моделей, обладающих предсказательной ценностью, имеет не только научное, но и важное народнохозяйственное значение.

Согласно Федеральному закону от 10.01.2002 № 7-ФЗ «Об охране окружающей среды», Водному кодексу РФ, Постановлению Правительства РФ от 30.12.2003 № 794 «О единой государственной системе предупреждения ЧС», распоряжению Правительства РФ от 4.12.2014 № 2462-р, время принятия решения и устранения ЧС природного или техногенного характеров может составлять от нескольких часов до 2–3 суток. Например, время локализации нефтяного загрязнения в водоеме не может превышать 4 часов. Поэтому время, отведенное на построение прогнозов состояния экологической системы водоема при возникновении ЧС, является ограниченным. Для получения оперативных прогнозов изменения экологической обстановки мелководного водоема в кратчайшие временные промежутки использовалась многопроцессорная вычислительная система (MBC) Южного федерального университета (ЮФУ).

При моделировании гидробиологических процессов в областях сложной формы возникают СЛАУ большой размерности с несамосопряженными операторами. Проблема их решения является одной из важных задач вычислительной математики. Зачастую для нахождения приближенного решения СЛАУ используются прямые и итерационные методы. А. А. Самарским для решения СЛАУ был предложен попеременно-треугольный метод (ПТМ) [Петров и др., 2013; Самарский, Николаев, 1978]. А. Н. Коновалов разработал его адаптивный вариант [Гущин, Матюшин, 2007; Коновалов, 2004]. В работе [Самарский, Гулин, 1989] приведено описание модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода (МПТМ) решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона, так же приведено описание метода простой итерации в случае несамосопряженного оператора. В работе [Сухинов, Чистяков, 2012] продемонстрирована техника повышения скорости сходимости ПТМ с априорной информацией за счет уточнения спектральных оценок предобусловленного оператора. Часто в прикладных задачах, например, при математическом моделировании гидродинамических процессов [Белоцерковский, Гущин, Щенников, 1975; Григорян, Семенякина, 2014], тепломассопереноса [Сухинов, Чистяков, 2012], геофильтрации, динамики популяций [Сухинов, Никитина, Пескова, 2001; Сухинов, Никитина, Чистяков, 2013], сейсморазведки [Беклемешева, Петров, Фаворская, 2013; Ладонкина и др., 2009] и других процессов возникает необходимость решать уравнения типа конвекции-диффузии. В случае использования неявных схем и схем с весами такие задачи приводят к линейным алгебраическим уравнениям с несамосопряженным оператором. Зачастую при решении подобных задач используется метод симметризации по Гауссу [Самарский, Гулин, 1989]. Недостаток метода: увеличение в квадрат раз числа обусловленности оператора задачи, приводящее к уменьшению скорости сходимости итерационных методов решения сеточных уравнений, вызвало необходимость создания авторским коллективом варианта модифицированного итерационного попеременно-треугольного метода минимальных поправок для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором [Самарский, Николаев, 1978; Сухинов и др., 2013; Сухинов, Чистяков, Проценко, 2014].

Известно, что время работы алгоритма зависит от используемых итерационных методов. Увеличить быстродействие программных комплексов можно в том числе за счет использования

параллельных алгоритмов [Григорян, Семенякина, 2014; Сухинов, Чистяков, 2012]. Увеличение временного шага возможно за счет использования схем с оптимальным значением весового параметра [Сухинов и др., 2013]. Точность расчетов можно повысить за счет дробления расчетной сетки (в результате увеличится время счета), а также за счет применения схем повышенного порядка точности [Семенякина, 2013], учитывающих частичные заполненности расчетных ячеек [Сухинов и др., 2015; Сухинов и др., 2013].

В рамках выполнения работы была построена библиотека итерационных методов, предназначенная для решения сеточных уравнений с самосопряженным и несамосопряженным операторами, возникающими при решении прикладных задач водной экологии на основе схем повышенного порядка точности, учитывающими частичные заполненности ячеек, на суперЭВМ.

Постановка задачи

При решении разработанных задач водной экологии [Никитина и др., 2015] в качестве входных данных будем использовать поля течений водного потока, рассчитанные по модели гидродинамики мелководного водоема [Сухинов, Чистяков, 2012].

Для построения алгоритмов решения модельных экологических задач рассмотрим базовую задачу транспорта веществ (диффузии-конвекции) следующего вида:

$$c'_{t} + uc'_{x} + vc'_{y} = (\mu c'_{x})'_{x} + (\mu c'_{y})'_{y} + f$$
(1)

с начальными условиями $c(x, y, 0) = c_0(x, y)$ (2)

и граничными условиями
$$c'_n(x, y, t) = \alpha_n c + \beta_n$$
, (3)

где *с* — концентрация вещества; *u*, *v* — компоненты вектора скорости; *µ* — коэффициент турбулентного обмена; *f* — функция, описывающая интенсивность и распределение источников. Введем равномерную прямоугольную сетку:

$$w_{h} = \left\{ t^{n} = n\tau, x_{i} = ih_{x}, y_{j} = jh_{y}; n = 0..N_{t}, i = 0..N_{x}, j = 0..N_{y}; N_{t}\tau = T, N_{x}h_{x} = l_{x}, N_{y}h_{y} = l_{y} \right\},$$

где τ – шаг по времени; h_x , h_y — шаги по пространству; N_x , N_y — границы по пространству; N_t — верхняя граница времени.

Проведем дискретизацию операторов конвективного и диффузионного переносов второго порядка погрешности аппроксимации в случае частичной заполненности ячеек следующим образом:

$$(q_0)_{i,j} uc'_x \simeq (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x},$$
(4)

$$(q_{0})_{i,j}(\mu c'_{x})'_{x} \approx (q_{1})_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_{x}^{2}} - (q_{2})_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_{x}^{2}} - |(q_{1})_{i,j} - (q_{2})_{i,j}| \mu_{i,j} \frac{\alpha_{x} c_{i,j} + \beta_{x}}{h_{x}},$$
(5)

где q_i — коэффициенты, описывающие заполненность контрольных областей [Сухинов и др., 2011].

Схемы повышенного порядка точности для операторов конвективного и диффузионного переносов

Пусть в выражениях (1), (2) $(q_1)_{i,j} = (q_2)_{i,j} = 1$. Исследуем точность следующих разностных схем в случае отсутствия влияния границы области. Зададим

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

– дискретный аналог оператора конвективного переноса:

$$uc'_{x} \simeq u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_{x}} + u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_{x}};$$
(6)

– дискретный аналог оператора диффузионного переноса:

$$\left(\mu c'_{x}\right)'_{x} \simeq \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_{x}^{2}} - \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_{x}^{2}}.$$
(7)

Оценим погрешность аппроксимации выражения (6):

$$u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x} = u_{i,j} \left(c_{i,j}\right)' + \left(c_{i,j}\right)' \left(u_{i,j}\right)'' h_x^2 / 4 + u_{i,j} \left(c_{i,j}\right)''' h_x^2 / 6 + \left(u_{i,j}\right)' \left(c_{i,j}\right)'' h_x^2 / 4 + O\left(h_x^4\right)$$

Получили, что для аппроксимации оператора конвективного переноса разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, необходимо аппроксимировать оператор $uc' - c'u''h^2 / 4 - uc'''h^2 / 6 - u'c''h^2 / 4$ схемой, обладающей вторым порядком точности.

Аппроксимация оператора конвективного переноса *uc'* разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, в одномерном случае имеет следующий вид:

$$(q_{0})_{i} L(c) = -(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_{1})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} c_{i+2} - \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{1})_{i}}{(q_{0})_{i}} \right) + (q_{2})_{i} \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_{1})_{i}}{(q_{0})_{i}} + (q_{1})_{i} \left(-\frac{u_{i+1/2}}{2h} + k_{i}^{(1)} + k_{i}^{(2)} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) + (q_{1})_{i} \left(-\frac{u_{i+1/2}}{2h} + k_{i}^{(1)} + k_{i}^{(2)} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) + (q_{1})_{i} \left(-\frac{u_{i+1/2}}{2h} + k_{i}^{(1)} + k_{i}^{(2)} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) + (q_{1})_{i} \left(-\frac{u_{i+1/2}}{2h} + k_{i}^{(1)} + k_{i}^{(2)} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{1})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{1})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{1})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{1})_{i+1}}{(q_{0})_{i+1}} \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \right) c_{i+1} + \left(-(q_{1})_{i} \frac$$

$$+ (q_{2})_{i} \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{1})_{i-1}}{(q_{0})_{i-1}} \right) + (q_{2})_{i} \frac{u_{i-1/2}}{2h} - (q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{2h} - ((q_{2})_{i} - (q_{1})_{i})k_{i}^{(1)} + ((q_{2})_{i} + (q_{1})_{i})k_{i}^{(2)} \right) c_{i} + \\ + \left(-(q_{1})_{i} \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_{2})_{i}}{(q_{0})_{i}} + (q_{2})_{i} \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_{2})_{i}}{(q_{0})_{i}} \right) + (q_{2})_{i} \left(\frac{u_{i-1/2}}{2h} + k_{i}^{(2)} - k_{i}^{(1)} \right) \right) c_{i-1} - \\ - \left(-(q_{2})_{i} \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_{2})_{i-1}}{(q_{0})_{i-1}} \right) c_{i-2},$$

где
$$k_i^{(1)} = \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i}(u_{i+1} - u_{i}) - \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i}(u_i - u_{i-1})\right) / (8h), k_i^{(2)} = \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i}\frac{u_{i+1} - u_i}{8h} + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i}\frac{u_i - u_{i-1}}{8h}$$

Погрешность аппроксимации выражения (7) примет следующий вид:

$$\mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2} = \left(\mu_{i,j} \left(c_{i,j}\right)'\right)' + \mu_{i,j} \left(c_{i,j}\right)^{(IV)} \frac{h_x^2}{12} + \left(\mu_{i,j}\right)'' \left(c_{i,j}\right)'' \frac{h_x^2}{4} + \left(\mu_{i,j}\right)' \left(c_{i,j}\right)^{'''} \frac{h_x^2}{6} + \left(\mu_{i,j}\right)^{'''} \left(c_{i,j}\right)'' \frac{h_x^2}{6} + O\left(h_x^4\right).$$

Аппроксимация оператора диффузионного переноса (*µc'*)' разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, имеет следующий вид:

$$(q_0)_i L(c) = -A_i c_i + B_{1,i} c_{i+1} + B_{2,i} c_{i-1} + B_{3,i} c_{i+2} + B_{4,i} c_{i-2},$$
(9)

_ 2016, T. 8, № 1, C. 151–168____

$$\begin{split} B_{1,i} &= \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1/2}}{h^{2}} + \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{\left(q_{1}\right)_{i}}{\left(q_{0}\right)_{i}} + 2\right) + \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{1}}{q_{0}}\right)_{i}} - \left(q_{1}\right)_{i} k_{i}^{(3)} - \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}^{"} - \mu_{i}^{"}}{12} ,\\ B_{2,i} &= \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1/2}}{h^{2}} + \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{q_{0}}\right)_{i}} + \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{\left(q_{2}\right)_{i}}{\left(q_{0}\right)_{i}} + 2\right) - \left(q_{2}\right)_{i} k_{i}^{(3)} - \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i}^{"} - \mu_{i-1}^{"}}{12} ,\\ B_{3,i} &= -\left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{1}}{q_{0}}\right)_{i+1} , B_{4,i} = -\left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{q_{0}}\right)_{i-1} ,\\ A_{i} &= \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1/2}}{h^{2}} + \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1/2}}{h^{2}} - \left(\left(q_{1}\right)_{i} + \left(q_{2}\right)_{i}\right) k_{i}^{(3)} + \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{\left(q_{2}\right)_{i+1}}{\left(q_{0}\right)_{i+1}} + 2\right) + \\ &+ \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{\left(q_{1}\right)_{i-1}}{\left(q_{0}\right)_{i-1}} + 2\right) - \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i}^{"} - \mu_{i-1}^{"}}{12} - \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}^{"} - \mu_{i}^{"}}{12} + \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{1}}{q_{0}}\right)_{i} + \\ &+ \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} - \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{1}}{\left(q_{0}\right)_{i-1}} - \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} + \\ &+ \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} - \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{1}}{\left(q_{0}\right)_{i+1}} - \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} + \\ &+ \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} - \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i-1}} - \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i-1}} , \\ &+ \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} - \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i-1}} - \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i-1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i-1}} + \\ &+ \left(q_{1}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} + \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i+1}}{12h^{2}} \left(\frac{q_{2}}{\left(q_{0}\right)_{i}} + \left(q_{2}\right)_{i} \frac{\mu_{i+$$

Сопоставление результатов расчета задачи транспорта веществ на основе схем второго и четвертого порядков точностей

Погрешность вычислений, представленная на рис. 1, рассчитывалась как разность между аналитическим (точным) и численным (приближенным) решением задачи транспорта веществ, начальное распределение задавалось функцией:

$$c_0(x,y) = \begin{cases} \sin(\pi(x-10))\cos(\pi(y-10)), \ \{x,y\} \in D, \ D: \{x \in [10,20], y \in [10,20]\}; \\ 0, \ \{x,y\} \notin D. \end{cases}$$



Рис. 1. Погрешность расчетов концентрации веществ для задачи диффузии-конвекции (слева — для схемы второго порядка точности, справа — для четвертого)

При моделировании использовались последовательно сгущающиеся сетки. Для сетки размерами 100×100 расчетных узлов параметры для задачи транспорта веществ задавались следующим образом: lx = 100 м, ly = 100 м, ht = 0,001 с, временной интервал равен 100 с, u = 4 м/с, v = 3 м/с, $\mu = 2$ м²/с.

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ___

Оценка погрешностей расчетов по модели транспорта веществ осуществлялась по формуле $\psi = \|c_a - c_m\|_C$, где c_a — точное (аналитическое) решение задачи диффузии-конвекции (1)–(3), c_m — рассчитанное по модели с использованием разработанных схем второго и четвертого порядков точности, $\|\cdot\|_C$ — норма в C, $\|x\|_C = \max_{i,j} |x_{i,j}|$.

Из сопоставления результатов численных экспериментов на основе схем второго и четвертого порядков точности (см. рис. 1) следует, что для задачи диффузии-конвекции удалось повысить точность в 48,7 раз.

Параллельная реализация задач водной экологии

На основе схем повышенного порядка точности для решения задачи водной экологии была построена библиотека программ, реализующая двухслойные итерационные методы для решения СЛАУ, такие как: Якоби, минимальных поправок, скорейшего спуска, Зейделя, верхней релаксации, адаптивный модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) вариационного типа на MBC.

В таблице 1 приведено сравнение скорости сходимости этих методов.

Таблица 1. Зависимость количества итераций решения СЛАУ итерационными методами от шага по временной переменной

. –	Количество итераций							
Шаг по временной переменной	Метод Якоби	Метод минималь- ных попра- вок	Метод скорейшего спуска	Метод Зейделя	Метод верхней релаксации	MIITM		
0,001	6	6	6	5	43	5		
0,005	8	8	8	8	43	6		
0,01	10	10	10	8	45	6		
0,05	23	23	23	15	56	10		
0,1	37	36	37	22	61	12		
0,5	138	134	138	70	60	27		
1	256	247	256	126	60	28		
5	1138	1077	1138	558	131	50		
10	2233	2110	2233	1073	246	72		
50	10160	9523	10160	4774	1074	158		
100	19966	18625	19966	9320	2096	218		
500	99651	92789	99651	46383	10399	1281		
1000	199295	185529	199295	92739	20781	4382		

Опишем параллельный алгоритм построения итерационных методов с предобуславливателями треугольного вида [Сухинов, Чистяков, 2012] (Зейделя, верхней релаксации, попеременно-треугольного метода) на системе с распределенной памятью.

- 1. Каждый процессор получает свою подобласть с помощью разбиения исходной области на части по одному или нескольким координатным направлениям с пересечением в двух узлах по каждому из направлений.
- Находятся решения СЛАУ с верхнетреугольным оператором, впоследствии чего рассчитывается вектор решений на следующей итерации. На рис. 2 стрелками показан порядок обхода узлов сетки при вычислениях и обменах данными в случае декомпозиции по одному пространственному направлению.

- Вычисляются вектор невязки и его равномерная норма (максимальный по модулю элемент). Каждый процессор определяет максимальный по модулю элемент вектора невязки и передает его значение всем остальным процессорам.
- Рассчитывается максимальный элемент после обмена данными, где в дальнейшем будет храниться норма вектора невязки. Если норма вектора невязки больше заданной погрешности, выполняется возврат к расчету невязки.

При расчете значения вектора решения только первый процессор не требует дополнительной информации и может обрабатывать свою часть расчетной области независимо от других вычислителей. Остальные процессоры ждут передачи данных от предыдущего.



Рис. 2. Схема для расчета значения вектора решения на последующем временном слое

Передача данных по одному элементу не оптимальна, так как появляются временные затраты, связанные с организацией передач. Возникает задача расчета (подбора) оптимального объема пакета передачи данных.

В таблице 2 показана зависимость ускорения и эффективности параллельной реализации программного комплекса на МВС ЮФУ, предназначенного для решения двумерной задачи диффузии-конвекции на основе схем повышенного порядка точности, от количества процессоров MBC. Сеточные уравнения были решены модифицированным попеременно-треугольным методом. Расчетная область составляла 2000×2000 узлов.

Количество	Время, с	Ускорение	Эффективность	
процессоров				
1	1447,415	1	1	
2	734,728	1,97	0,985	
4	387,009	3,74	0,935	
8	199,643	7,25	0,906	
16	109,653	13,2	0,825	
32	62,659	23,1	0,722	
64	36,643	39,5	0,617	

Таблица 2. Зависимость ускорения алгоритма от количества процессоров

Разработанные алгоритмы для решения задачи диффузии-конвекции были параллельно реализованы с использованием технологий Message Passing Interface (MPI). Пиковая производительность MBC ЮФУ составляет 18.8 TFlops. MBC включает в себя 8 компьютерных стоек, 128 вычислительных узлов, однотипных 16-ядерных серверов-лезвий HP ProLiant BL685c, каждый из которых оснащен четырьмя 4-ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3 GHz и оперативной памятью в объеме 32 ГБ. Общее количество вычислительных ядер в комплексе — 2048, суммарный объем оперативной памяти — 4 ТВ. Для параллельной версии использовались: OpenMP, WindowsThreads для систем с общей памятью, MPI для систем с распределенной памятью. Из таблицы 2 видно, что параллельный алгоритм модифицированного попеременно-треугольного метода может быть применен при решении реальных экологических задач, в том числе и задач биологической кинетики.

Применение схем повышенного порядка точности для восстановления донной поверхности мелководного водоема

Работа с картографическими данными, обработка гидрографической информации являются достаточно актуальными задачами, возникающими при математическом моделировании гидродинамики мелководных водоемов [Сухинов, Чистяков, 2012]. Как показано на рис. 3, глубина водоема задается в отдельных точках или изолиниями уровня.



Рис. 3. Исходное изображение рельефа дна Азовского моря

Использование подобных карт для построения расчетных сеток нежелательно, так как появляются погрешности вычислений, связанные с «грубым» заданием геометрии расчетной области. Для того чтобы повысить точность расчетов гидродинамических процессов, необходимо приблизить функцию двух переменных, описывающую рельеф дна водоема, более гладкими функциями.



Рис. 4. Восстановленная поверхность дна Азовского моря

Для восстановления рельефа дна акватории Азовского моря использовался алгоритм, описанный в работе [Chetverushkin et al., 2005]. На основе разработанного программного комплекса получена карта рельефа дна Азовского моря (см. рис. 4). Отметим, что предложенный алгоритм обладает достаточной степенью гладкости в точках склейки функций и обладает меньшими выбросами по сравнению с кубической функцией, использованной в расчетах.

Применение схем повышенного порядка точности для решения задач водной экологии

Методика восстановления донной поверхности и расчета полей течений водного потока в Азовском море [Сухинов и др., 2015] была использована при решении модельных задач водной экологии. Рассчитанные поля течений использовались в качестве входной информации для моделей водной экологии [Никитина, 2005] на примере задач биологической кинетики: взаимодействия фито- и зоопланктона; динамики промысловой рыбы пеленгас.

Многовидовая модель взаимодействия фито- и зоопланктона

Фитопланктон вырабатывает более 95 % первичной продукции. Без построения моделей низших уровней (уровня планктонных популяций) невозможно построение моделей всей трофической сети.

Показатели продуктивности планктона служат одновременно и показателями трофического статуса водоемов. Среди признаков нарушения стабильности водных биоценозов нарастающее преобладание в составе фитопланктона синезеленых водорослей является одним из наиболее заметных симптомов при деградации экосистемы в процессе эвтрофирования.

Модель динамики токсичной синезеленой водоросли *Aphanizomenon flos-aquae*, зеленой водоросли *Chlorella Vulgaris BIN* и зоопланктона *Bosmina Longirostris* [Сухинов и др., 2012] учитывает не только взаимодействие популяций фито- и зоопланктона, но и влияние метаболитов, выделяемых водорослями, и имеет вид:

$$X'_{1,t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}X_{1}) = \mu_{1}\Delta X_{1} + (\nu_{1}X'_{1,z})_{z}' + \alpha_{1}\psi_{1}(S)X_{1} - g_{1}(X_{1},Z) - \theta_{1}X_{1}X_{2} - \varepsilon_{1}X_{1},$$

$$X'_{2,t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}X_{2}) = \mu_{2}\Delta X_{2} + (\nu_{2}X'_{2,z})_{z}' + \alpha_{2}\psi_{2}(S)X_{2} - g_{2}(X_{2},Z) - \theta_{2}X_{1}X_{2} - \varepsilon_{2}X_{2},$$

$$Z'_{t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}Z) = \mu_{Z}\Delta Z + (\nu_{Z}Z'_{z})_{z}' + \psi_{z}(X_{1},X_{2})Z - \lambda(M_{2})Z,$$

$$S'_{t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}S) = \mu_{S}\Delta S + (\nu_{S}S'_{z})_{z}' - \psi_{S}(X_{1},X_{2})S + \varepsilon_{1}X_{1} + \varepsilon_{2}X_{2} + \lambda(M_{2})Z + B(S_{p} - S) + f,$$

$$M'_{i,t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}M_{i}) = \mu_{m}\Delta M_{i} + (\nu_{m}M'_{i,z})_{z}' + k_{i}X_{i} - \varepsilon_{m}M_{i},$$

$$(10)$$

где X_i — значения концентраций зеленых (*Chlorella Vulgaris BIN*) и синезеленых водорослей (*Aphanizomenon flos-aquae*) соответственно, $i \in \{1,2\}$; Z — концентрация зоопланктона (*Bosmina Longirostris*); S — концентрация биогенного вещества (азот или фосфор); M_i — концентрация метаболита i -го вида; $\mu_r, \mu_Z, \mu_S, \nu_r, \nu_Z, \nu_S$ — диффузионные коэффициенты в горизонтальном и вертикальном направлениях субстанций X_i , Z, S, $M_i, r \in \{1,2,3,4\}$; $\alpha_i = (\alpha_{0i} + \gamma_i M_i)$ — функция роста i -го вида за счет M_i ; α_{0i}, γ_i – скорость роста в отсутствие метаболита и параметр воздействия i -го вида; α_Z — скорость роста зоопланктона; $\psi_Z(X_1, X_2)$ — функция, описывающая рост Z за счет потребления вида X_1 и угнетения видом X_2 ; $g_i(X_i, Z)$ — функция потребления биогенного вещества водорослями; B — скорость поступления биогенного вещества; S_n —

предельно возможная концентрация биогенного вещества; ε_i — коэффициенты смертности *i*-го вида; $\lambda(M_2)$ — функция смертности зоопланктона, включающая в себя риск элиминации за счет метаболита синезеленой водоросли; ε_m — коэффициенты разложения метаболита, $m = \overline{3,4}$; k_i — коэффициенты экскреции *i*-го вида; f – функция источника биогенного вещества (за-грязнения); θ_i — коэффициент межвидовой конкуренции *i*-го вида; **u** — поле скоростей водного потока; \mathbf{u}_{0k} — скорость осаждения k -й субстанции; $\mathbf{U} = \mathbf{u} + \mathbf{u}_{0k}$ — скорость конвективного переноса вещества; $k \in \{X_1, X_2, S, Z, M_1, M_2\}$. При параметризации модели (4) использовались работы [Латун, 2005; Тютюнов и др., 2010].

Начальные условия для модели (10) задаются в виде

$$\varphi(x, y, z, 0) = \varphi_0(x, y, z), \quad \varphi \in \{X_i, Z, S, M_i\}, (x, y, z) \in \overline{G}, \ i = 1, 2, \ t = 0.$$
(11)

Граничные условия для модели (10) имеют вид

$$\varphi = 0$$
 на σ , если $u_n < 0$; $\varphi'_n = 0$ на σ , если $u_n \ge 0$; $\varphi'_z = 0$ на $\sum_0; \varphi'_z = -\xi_k \varphi$ на \sum_H , (12)

 $k \in \{1,2,3,4,S,Z\}, \varphi \in \{X_i,Z,S,M_i\}, \sigma$ — боковая поверхность; Σ_0 — невозмущенная поверхность; Σ_H — дно водоема; $i = \overline{1,2}, \xi_k$ — неотрицательные постоянные: ξ_1, ξ_2 — учитывают опускание водорослей на дно и их затопление; ξ_Z — учитывает элиминацию зоопланктона и опускание его на дно; ξ_S, ξ_3, ξ_4 — учитывают поглощение биогенного вещества и метаболитов зеленых и синезеленых водорослей донными отложениями.

Ихтиологическая модель «пеленгас–детрит»

Снижение биоразнообразия ихтиофауны и запасов большинства аборигенных ценных промысловых видов рыб — осетровых, судака, рыбца, леща, тарани и др. — привело к тому, что дальневосточный акклиматизант — пеленгас — за короткий период стал одним из доминирующих промысловых компонентов ихтиофауны Азовского моря, уступая по величине промыслового запаса лишь тюльке, хамсе и бычкам. Пеленгас способен расщеплять и перерабатывать токсические бактериальные организмы и водоросли, превращая их в легкоусвояемую органику, которая, в свою очередь, быстро минерализуется благодаря мелководности моря и хорошей прогреваемости его вод.

Разработанная пространственно-трехмерная модель динамики промысловой рыбы пеленгас [Никитина, Лозовская, 2011] базируется на моделях Тютюнова Ю. В., Латуна В. С., Пряхина Ю. В., Косьяна Р. Д. и др., учитывает пространственно неоднородные распределения диатомовой водоросли *Coscinodiscus* и зоопланктона *Copepoda*, биогенных веществ и детрита, движение водной среды, микротурбулентную диффузию, гравитационное оседание субстанций, температурный и кислородный режимы, соленость, таксис, вылов. Модель имеет вид

$$X'_{t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}X) = \mu_{X}\Delta X + (\nu_{X}X'_{z})'_{z} + g_{X}(X,S) - (\delta_{X}Z + \sigma_{X}P + \varepsilon_{X})X,$$

$$Z'_{t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}Z) = \mu_{Z}\Delta Z + (\nu_{Z}Z'_{z})'_{z} + g_{Z}(X,Z) - (\varepsilon_{Z} + \delta_{Z})Z,$$

$$S'_{t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}S) = \mu_{S}\Delta S + (\nu_{S}S'_{z})'_{z} + \gamma_{S}\varepsilon_{D}D - g_{S}(X,S) + B(S_{P} - S) + f,)$$

$$D'_{t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}D) = \mu_{D}\Delta D + (\nu_{D}D'_{z})'_{z} - g_{D}(D,P) + \varepsilon_{X}X + \varepsilon_{Z}Z - \varepsilon_{D}D,$$

$$P'_{t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}_{P}P) = \mu_{P}\Delta P + (\nu_{P}P'_{z})'_{z} + g_{P}(X,D,P) - (\varepsilon_{P} + \delta_{P})P,$$

$$\mathbf{u}'_{P,t} + \operatorname{div}(\mathbf{U}_{P}\mathbf{u}_{P}) = \mu_{u}\Delta\mathbf{u}_{P} + (\nu_{u}\mathbf{u}'_{P,z})'_{z} - \alpha_{u}\mathbf{u}_{P} + k_{D}\operatorname{grad} D + k_{X}\operatorname{grad} X,$$
(13)

где X, Z, S, D, P — концентрации фитопланктона (*Coscinodiscus*), зоопланктона (*Copepoda*), биогенного вещества, детрита, пеленгаса; g_{φ} — трофические функции для субстанций $\varphi \in \{D, X, Z, S, P\}$. γ_s — доля S, находящегося в биомассе X; $\varepsilon_Z, \varepsilon_P$ — коэффициенты элиминации (смертности) Z, P соответственно; ε_{X} — коэффициент, учитывающий смертность и метаболизм X; δ_X — убыль X за счет выедания Z; δ_Z — убыль Z за счет выедания рыбами; $\delta_{\scriptscriptstyle P}$ — убыль P за счет выедания рыбами и вылова; $S_{\scriptscriptstyle P}$ – предельно возможная концентрация биогенного вещества; f = f(t, x, y, z) — функция источника загрязнения; B — удельная скорость поступления загрязняющего вещества; ε_D — коэффициент разложения детрита; β_D скорость потребления органических остатков пеленгасом; $\mu_{\varphi}, \nu_{\varphi}$ — диффузионные коэффициенты в горизонтальном и вертикальном направлениях субстанций $\varphi \in \{D, X, Z, S, P\}$ соответственно; Δ — двумерный оператор Лапласа; **и** — поле скоростей водного потока; $\mathbf{U} = \mathbf{u} + \mathbf{u}_{0\alpha}, \mathbf{U}_{P} = \mathbf{u} + \mathbf{u}_{P}$ — скорости конвективного переноса вещества и P; \mathbf{u}_{P} — скорость движения рыбы относительно воды; k_D, k_X — коэффициенты таксиса; μ_u , ν_u — коэффициенты горизонтальной и вертикальной составляющей диффузии скорости таксиса; α_{μ} — коэффициент инерционного движения рыбы; $\mathbf{u}_{0\varphi}$ – скорость осаждения φ -й субстанции под действием силы тяжести, $\varphi \in \{X, Z, S, D\}$. К системе (13) добавляются соответствующие начальные и граничные условия.

При решении описанных задач биологической кинетики учитывались физические размеры расчетной области (Азовское море): площадь поверхности — 37605 км², длина — 343 км, ширина — 231 км. Для получения приближенного решения поставленных задач использовались неявные разностные схемы повышенного порядка точности. На рис. 5 представлена динамика изменения концентрации загрязняющего биогенного вещества с течением времени в Азовском море для начального распределения полей течений при северном ветре. Белым цветом выделены максимальные значения концентрации загрязняющего биогенного вещества.



Рис. 5. Распределение концентрации загрязняющего вещества *S* в различные моменты времени, T = 2, T = 22 дня. Значения параметров: $\mu_s = 5 \cdot 10^{-10}$; $v_s = 10^{-10}$; B = 0,001; $S_p = 1$; f = 3; $\tau_{\varphi} = 0,1$; $\varphi \in \{X, S, M\}$; $\varepsilon_2 = 0,8$

На рис. 6 представлены результаты численного эксперимента для задачи взаимодействия фито- и зоопланктона на основе полученных схем повышенного порядка точности для реальной расчетной области сложной формы — Азовское море.

Рис. 6 демонстрирует динамику изменения концентрации полезной зеленой водоросли *Chlorella vulgaris BIN* в мелководном водоеме.

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ _



Рис. 6. Динамика изменения концентрации зеленой водоросли для временных интервалов *T* = 2, 27, 39, 70, 85, 122 дня (после начала вегетационного периода фитопланктона (март–сентябрь))

С помощью численного эксперимента, реализованного на MBC, был разработан сценарий биологической очистки вод мелководного водоема, в рамках которого изучался процесс альголизации Азовского моря зеленой водорослью *Chlorella vulgaris BIN*, имеющей важное значение в питании рыб, с целью вытеснения токсичных синезеленых водорослей, таких как *Aphanizomenon flos-aquae*, *Microcystus* и др.

Согласно проведенным научно-исследовательским экспедиционным работам в акватории Азовского моря, эти синезеленые водоросли наиболее распространены в нем, в основной своей массе мало используются в питании рыб, оседая на дно водоема, способствуют возникновению в нем заморных зон.

В начальный момент времени в мелководный водоем вносится штамм хлореллы, до начала развития токсичных синезеленых водорослей она использует биогенные вещества, поступающие в Азовское море со стоком рек Дон, Кубань и др. Рис. 6 демонстрирует, что с течением времени внесенная в достаточной концентрации зеленая водоросль распространяется по всему водоему, вытесняя вредоносные водоросли, вызывающие «цветение» вод и ухудшающих экологическое состояние мелководного водоема.

На рис. 7 изображены результаты численного эксперимента на основе построенных схем повышенного порядка точности для задачи динамики промысловой рыбы пеленгас в Азовском море.

На основе проведенных численных экспериментов с моделью динамики промысловой рыбы на MBC были разработаны различные сценарии зарыбления Азовского моря донным мелиоратором, детритофагом — пеленгасом. Рис. 7 описывает динамику изменения концентрации пеленгаса с течением времени при северном ветре. На основе разработанной библиотеки программ можно моделировать сценарии уменьшения площадей заморных зон в мелководном водоеме на основе его зарыбления пеленгасом.

Калибровка и верификация разработанных моделей биологической кинетики проводилась на основе данных экспедиционных работ, проводимых сотрудниками ЮФУ в акватории Азовского моря, начиная с 2000 г. [Лапин и др., 2009; Сухинов и др., 2011]. Групповой анализ данных экспериментов проводился с помощью приложения Hamster, использующего базы научных образов и позволяющего проводить верификацию математических моделей экспериментов.

На рис. 8 представлен пример сравнения моделируемых значений концентрации фитопланктона (модель (10)–(12)) с экспедиционными данными.

Критерием проверки адекватности построенных моделей гидробиологии мелководного водоема служила оценка относительной погрешности моделирования с одновременным учетом натурных данных по имеющимся *n* замерам, которая вычислялась по формуле

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (c_{\text{nat},i} - c_{m,i})^2} / \sqrt{\sum_{i=1}^{n} c_{\text{nat},i}^2} ,$$

где $c_{\text{nat},i}$ — значение концентрации вредоносной водоросли, полученное с помощью натурных измерений; $c_{m,i}$ — значение концентрации, рассчитанное с помощью моделей биологической кинетики, $i = \overline{1,n}$. Рассчитанные при различных ветровых ситуациях концентрации планктона и рыб принимались к рассмотрению, если относительная погрешность не превышала 30 %.



Рис. 7. Распределение концентраций пеленгаса, временной интервал T = 25, 61, 76, 195 дней



Рис. 8. График сравнения результатов моделирования изменения концентрации фитопланктона с имеющимися экспедиционными данными по Азовскому морю

Критерием качества калибровки и верификации служил коэффициент несовпадения Г. Тейла (критерий *E*):

$$E = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (c_{\text{nat},i} - c_{m,i})^2 / \left(\sum_{k=1}^{n} c_{\text{nat},i}^2 + \sum_{k=1}^{n} c_{m,i}^2\right)}$$

Пример оценок критерия *E* и относительной погрешности для моделей гидробиологии мелководного водоема по литературным и расчетным модельным данным приведен в табли-

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ __

це 3. Здесь δm , Em, δa , Ea — оценки относительной погрешности и значения критерия Г.Тейла для результатов моделирования неизвестной функции в рамках выполненной работы и результатов других авторов соответственно; $\varepsilon_1 = Ea - Em$, $\varepsilon_2 = \delta a - \delta m$.

Оцениваемая функция	<i>Em</i> , %	<i>Ea</i> , %	$\mathcal{E}_1, \%$	<i>δm</i> , %	δa, %	$\mathcal{E}_2, \ \%$
Х	23	37	14	29	44	15
S	15	27	12	23	33	10
М	35	50	15	28	42	14
X_1	15	29	14	25	36	11
X_2	17	28	11	26	38	12

Таблица 3. Проверка адекватности моделей

Анализируя данные NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration), представленные на рис. 9, a (видны пятна фитопланктона, выявляющие структуру течений), сравнивая с рис. 9, δ , на котором представлено совместное распределение концентраций синезеленой и зеленой водорослей для временного интервала 85 дней (после начала вегетационного периода фитопланктона), начальное распределение полей течений при северном ветре, замечаем качественное соответствие результатов моделирования динамики фитопланктона представленному спутниковому снимку.







(б)

Рис. 9. (а) спутниковая фотография Азовского моря, выполненная в ультрафиолетовом спектре. Взято с сайта NASA (http://veimages.gsfc.nasa.gov/1326/S1998282101838.jpg); (б) результат моделирования: совместное распределение концентраций синезеленой и зеленой водоросли для временного интервала 85 дней (после начала вегетационного периода фитопланктона)

Анализ подобных работ области математического моделирования экологических процессов, протекающих в мелководных водоемах, показал, что в результате разработки программного комплекса на MBC ЮФУ, использующего для дискретизации моделей гидробиологии схемы повышенного порядка точности, согласно данным таблицы 3, удалось повысить точность прогнозов изменения концентраций планктона и рыб на 10–15 % в зависимости от решаемой модельной задачи биологической кинетики.

Заключение

Построены схемы повышенного (четвертого) порядка точности для операторов конвективного и диффузионного переносов, учитывающие заполненность ячеек [Семенякина, 2013]. Выполнено сопоставление результатов расчета задачи транспорта веществ на основе схем второго и четвертого порядков точностей. Из сопоставления результатов численных экспериментов следует, что для задачи диффузии-конвекции удалось повысить точность в 48,7 раз. Разработанный алгоритм на основе схем повышенного порядка точности был применен для задач водной экологии. С целью построения оперативных прогнозов изменения экологической обстановки мелководного водоема была разработана библиотека двухслойных итерационных методов на MBC ЮФУ. Приведено описание параллельной реализации алгоритмов итерационных методов с предобуславливателями треугольного вида, рассчитаны значения ускорения и эффективности работы параллельного варианта алгоритма модифицированного попеременнотреугольного метода. Предложен математический алгоритм, предназначенный для восстановления рельефа дна акватории мелководного водоема на основе гидрографической информации (глубины водоема в отдельных точках или изолиний уровня). Было установлено, что разработанный алгоритм обладает достаточной степенью гладкости в точках склейки функций и обладает меньшими выбросами в одномерном случае по сравнению с кубической функцией, использованной в расчетах. На основе полученного метода решения задачи получена карта рельефа дна Азовского моря [Чистяков, Семенякина, 2013]. Предложенные алгоритмы были применены для моделирования трехмерных полей скоростей течений в мелководных водоемах [Сухинов, Чистяков, 2012; Сухинов и др., 2015], которые использовались в качестве входных данных для задач водной экологии [Сухинов и др., 2001; Сухинов и др., 2012], включая математическую модель транспорта донных материалов [Сухинов и др., 2013; Сухинов и др., 2014], что позволило значительно уменьшить погрешность расчетов при их численной реализации.

Список литературы

- Антонов А. С., Артемьева И. Л., Бухановский А. В., Воеводин В. В., Гергель В. П., Демкин В. П., Коньков К. А., Крукиер Л. А., Попова Н. Н., Соколинский Л. Б., Сухинов А. И. Проект «Суперкомпьютерное образование»: 2012 год // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. — 2013. — № 1-1. — С.12–16.
- Беклемышева К. А., Петров И. Б., Фаворская А. В. Численное моделирование процессов в твердых деформируемых средах при наличии динамических контактов с помощью сеточнохарактеристического метода // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 11. — С. 3–16.
- Белоцерковский О. М., Гущин В. А., Щенников В. В. Метод расщепления в применении к решению задач динамики вязкой несжимаемой жидкости // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1975. — Т. 15, № 1. — С. 197.
- Воеводин В. В., Гергель В. П. Суперкомпьютерное образование: третья составляющая суперкомпьютерных технологий // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. — 2010. — Т. 11, № 2. — С. 117–122.
- Григорян Л. А., Семенякина А. А. Параллельная реализация задачи транспорта веществ на основе схем повышенного порядка точности для уравнений диффузии-конвекции // Известия Южного федерального университета. Технические науки. 2014. № 12 (161). С. 183–192.
- *Гущин В. А., Матюшин П. В.* Математическое моделирование и визуализация трансформации вихревой структуры течения около сферы при увеличении степени стратификации жид-кости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2011. Т. 51, № 2. С. 268–281.
- Гущин В. А., Миткин В. В., Рождественская Т. И., Чашечкин Ю. Д. Численное и экспериментальное исследование тонкой структуры течения стратифицированной жидкости вблизи

кругового цилиндра // Прикладная механика и техническая физика. — 2007. — Т. 48, № 1 (281). — С. 43–54.

- Коновалов А. Н. Метод скорейшего спуска с адаптивным попеременно-треугольным переобусловливателем // Дифференциальные уравнения. — 2004. — Т. 40, № 7. — С. 953.
- Коновалов А. Н. К теории попеременно-треугольного итерационного метода // Сибирский математический журнал. — 2002. — Т. 43, № 3. — С. 552.
- Ладонкина М. Е., Неклюдова О. А., Тишкин В. Ф., Чеванин В. С. Об одном варианте существенно неосциллирующих разностных схем высокого порядка точности для систем законов сохранения // Математическое моделирование. — 2009. — Т. 21, № 11. — С.19–32.
- Лапин Д. В., Черчаго А. А., Чистяков А. Е. Совместные экспедиционные исследования гидрофизических параметров Азовского моря на многоцелевой яхте «Буревестник» и НИС т/х «Платов» // Известия ЮФУ. Технические науки. — 2009. — № 8 (97). С 82–89.
- Латун В. С. Учет кормового таксиса хамсы в математической модели системы «фитопланктон– зоопланктон–рыба» // Морской экологический журнал. — 2005. — Т. 4, № 4. — С. 49–60.
- Муратов М. В., Петров И. Б. Расчет волновых откликов от систем субвертикальных макротрещин с использованием сеточно-характеристического метода // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 3. — С. 89–104.
- Никитина А. В. Исследование моделей биологической кинетики // Известия ТРТУ. 2005. № 9 (53). С. 213.
- Никитина А. В., Лозовская К. А. Численное моделирование процессов взаимодействия планктона и популяции промысловой рыбы пеленгас // Известия ЮФУ. Технические науки. — 2011. — № 8. — С. 98–103.
- Никитина А. В., Пучкин М. В., Семенов И. С., Сухинов А. И., Угольницкий Г. А., Усов А. Б., Чистяков А. Е. Дифференциально-игровая модель предотвращения заморов в мелководных водоемах // Управление большими системами. — 2015. — Вып. 55. — М.: ИПУ РАН. — С. 343–361.
- Петров И. Б., Фаворская А. В., Санников А. В., Квасов И. Е. Сеточно-характеристический метод с использованием интерполяции высоких порядков на тетраэдральных иерархических сетках с кратным шагом по времени // Математическое моделирование. 2013. Т. 25, № 2. С. 42–52.
- Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989.
- Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
- Семенякина А. А. Схемы повышенного порядка точности для задач диффузии-конвекции // Информатика, вычислительная техника и инженерное образование. — 2013. — № 4 (15). — С. 18–29.
- Сухинов А. И. Модифицированный попеременно-треугольный метод для задач тепловодности и фильтрации // Вычислительные системы и алгоритмы. 1984. С. 52–59.
- 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.
- Сухинов А. И., Никитина А. В., Пескова О. Ю. Математическое моделирование процессов распространения загрязнений и эволюции фитопланктона применительно к акватории Таганрогского залива // Известия ТРТУ. 2001. № 2 (20). С. 32–36.
- Сухинов А. И., Никитина А. В., Чистяков А. Е. Моделирование сценария биологической реабилитации Азовского моря // Математическое моделирование. — 2012. — Т. 24, № 9. — С. 3–21.
- Сухинов А. И., Никитина А. В., Чистяков А. Е., Семенов И. С. Математическое моделирование условий формирования заморов в мелководных водоемах на многопроцессорной вычислительной системе // Вычислительные методы и программирование. 2013. Т. 14. С. 103–112.
- 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.

- 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. 3–20.
- 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.
- Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Проценко Е. А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежной зоне мелководных водоемов // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 12. — С. 65–82.
- Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Проценко Е. А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежных водных системах на многопроцессорной вычислительной системе // Вычислительные методы и программирование. — 2014. Т. 15. — С. 610–620.
- Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Семенякина А. А., Никитина А. В. Параллельная реализация задач транспорта веществ и восстановления донной поверхности на основе схем повышенного порядка точности // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. — 2015. — Т. 16, № 2. — С. 256–267.
- Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Тимофеева Е. Ф., Шишеня А. В. Математическая модель расчета прибрежных волновых процессов // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 8. С. 32–44.
- Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Фоменко Н. А. Методика построения разностных схем для задачи диффузии-конвекции-реакции, учитывающих степень заполненности контрольных ячеек // Известия Южного федерального университета. Технические науки. — 2013. — № 4 (141). — С. 87–98.
- Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Шишеня А. В. Оценка погрешности решения уравнения диффузии на основе схем с весами // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 11. — С. 53–64.
- *Тютюнов Ю. В., Титова Л. И., Сурков Ф. А., Бакаева Е. Н.* Трофическая функция коловратокфитофагов (rotatoria). Эксперимент и моделирование // Общая биология. — 2010. — Т. 71, № 1. — С. 52–62.
- Чистяков А. Е., Семенякина А. А. Применение методов интерполяции для восстановления донной поверхности // Известия ЮФУ. Технические науки. — 2013. — № 4. — С. 21–28.
- Якобовский М. В. Инкрементный алгоритм декомпозиции графов // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. Сер.: Математическое моделирование и оптимальное управление. — 2005. — № 1. — С. 243.
- Chetverushkin B., Gasilov V., Iakobovski M., Polyakov S., Kartasheva E., Boldarev A., Abalakin I., Minkin A. Unstructured mesh processing in parallel CFD project GIMM // Parallel Computational Fluid Dynamics. — 2005. — P. 501–508.