

DOI: [10.7242/1999-6691/2019.12.4.37](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2019.12.4.37)

УДК: 517.95, 519.6

## ЭКОНОМИЧНЫЕ ЯВНО-НЕЯВНЫЕ СХЕМЫ РЕШЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ ЗАДАЧ ДИФФУЗИИ–КОНВЕКЦИИ

А.И. Сухинов<sup>1</sup>, А.Е. Чистяков<sup>1</sup>, В.В. Сидорякина<sup>2</sup>, Е.А. Проценко<sup>2</sup><sup>1</sup>Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Российская Федерация<sup>2</sup>Таганрогский институт им. А.П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета,  
Таганрог, Российская Федерация

Целью данной работы является построение эффективного параллельного численного решения нестационарной задачи диффузии–конвекции на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью. За основу берутся экономичные явно- неявные разностные схемы и метод расщепления по физическим процессам. При использовании указанных схем становится возможным переход к цепочке одномерных и двумерных разностных задач, аппроксимирующих исходную задачу в суммарном смысле. При решении явно- неявные разностные схемы предполагают явную аппроксимацию по горизонтальным направлениям и неявную аппроксимацию с весами по вертикальному направлению, что по сравнению с явными схемами требует меньших временных затрат на реализацию задачи диффузии–конвекции при сохранении допустимой точности решения. Авторами предлагается алгоритм нахождения оптимального значения веса, обеспечивающий минимальную погрешность аппроксимации решения задачи диффузии–конвекции по вертикальному направлению для заданных значений шагов временной сетки. Вычислительные эксперименты осуществлены на примере модельной трехмерной задачи транспорта взвесей в водной среде. Модель учитывает следующие процессы: адвективный перенос, обусловленный движением водной среды; микротурбулентную диффузию и гравитационное осаждение частиц взвеси; изменение геометрии дна, вызванное осаждением частиц взвеси или подъемом частиц донных отложений. Представленный параллельный подход численного моделирования процессов транспорта взвесей позволит многократно улучшить точность оперативного прогноза и обоснованность принимаемых инженерных решений при создании объектов прибрежной инфраструктуры.

*Ключевые слова:* математическая модель, транспорт взвеси, задача диффузии–конвекции, численное моделирование, разностная схема, явно- неявные схемы

## ECONOMIC EXPLICIT-IMPLICIT SCHEMES FOR SOLVING MULTIDIMENSIONAL DIFFUSION–CONVECTION PROBLEMS

A.I. Sukhinov<sup>1</sup>, A.E. Chistyakov<sup>1</sup>, V.V. Sidoryakina<sup>2</sup> and E.A. Protsenko<sup>2</sup><sup>1</sup>Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation<sup>2</sup>Taganrog University, named after A.P. Chekhov—Branch of Rostov State University of Economics,  
Taganrog, Russian Federation

This work concerns the development of an efficient parallel algorithm for numerical solution of nonstationary diffusion–convection problems by means of a multiprocessor computer system with distributed memory. Economically explicit-implicit difference schemes and the method of splitting into physical processes are used as a basis. The original problem is replaced by a sequence of one-dimensional and two-dimensional difference problems using complex schemes that approximate the original problem in the general sense. Explicit-implicit difference schemes involve explicit approximation in horizontal directions and implicit approximation with weights in a vertical direction and require less time for solving diffusion–convection problems compared to explicit schemes while maintaining acceptable accuracy of solutions. The algorithm is proposed to find the optimal weight value and it yields the lowest approximation error in the solution of the diffusion–convection problem in the vertical direction for given time grid steps. The three-dimensional model problem of transport of suspensions in the water environment is considered. The model takes into account the following processes: advective transport caused by the movement of the water medium, microturbulent diffusion and gravitational deposition of suspended particles, as well as changes in the geometry of the bottom caused by the deposition of suspended particles or the rise of sediment particles. Application of the parallel algorithm developed for numerical modeling of suspension transport makes it possible to significantly improve the real-time forecast accuracy and the validity of the accepted engineering decisions used in designing the objects of coastal infrastructure.

*Key words:* mathematical model, suspension transport, diffusion–convection problem, numerical simulation, difference scheme, explicit-implicit scheme

### 1. Введение

В статье рассматривается построение и исследование параллельных алгоритмов, предназначенных для решения задачи диффузии–конвекции. На примере трехмерной начально–краевой задачи транспорта взвесей в прибрежных системах авторами [1–4] показано, что найденные в результате решения изменения поля концентрации взвешенных частиц позволяют проводить исследования гидрофизических процессов в прибрежных водных системах, выполнять прогноз динамики изменения донной поверхности и береговой линии.

Динамические модели влечения и взвешивания наносов начали обосновываться теоретически в первой четверти XX столетия. Не претендуя на полноту, назовем имена создателей: В. Эри, Д. Стокс, Дж. Тейлор,

В. Шмидт, А. Хазен, Р. Ричардс, Б.В. Архангельский, В.В. Романовский, Ф. Экснер, Н. Крамер, В.Ф. Пушкарев, И.В. Егизаров, Г.В. Лопатин, Дж. Кеннеди, Н.А. Михайлов, К.И. Российский, Н.С. Знаменская, В.Г. Голушков и другие. В частности, В.Г. Голушковым показано, что поддержание тяжелых частиц в движущейся жидкости происходит за счет вертикальной компоненты пульсационной скорости. Разработка многих теоретических и практических методов расчета транспорта взвешенных частиц связана с работами российских ученых: Г.И. Марчука, В.П. Дымникова, А.С. Саркисяна, О.М. Белоцерковского, Р.А. Ибраева, В.Б. Залесного, В.П. Шутяева, В.М. Белолипецкого, В.К. Дебольского, Р.В. Озмидова, В.В. Жмура, О.К. Леонтьева, М.В. Флинта, П.О. Завьялова и других [5, 6].

Основная идея численного решения задачи диффузии–конвекции заключается в построении схем специального вида, а именно явно- неявных разностных схем, предполагающих представление исходной задачи в виде цепочки двумерных и одномерных задач. В данной работе приведено описание параллельного алгоритма, использующего для аппроксимации двумерной задачи по горизонтальным направлениям явную схему, содержащую разностную производную второго порядка по времени, а для аппроксимации одномерной задачи по вертикальному направлению — схему с весами. Предложен алгоритм нахождения оптимального значения веса, обеспечивающего минимальную погрешность аппроксимации на решении задачи диффузии–конвекции по вертикальному направлению для заданных значений шагов временной сетки. Для поиска значения оптимального параметра схемы с весами выполнено разложение по тригонометрическому базису функции решения и погрешности аппроксимации в зависимости от шага по времени. Проведено сравнение полученных результатов для явных и явно-неявных регуляризованных схем с оптимальным весом. Показано, что погрешность для явной схемы существенно больше, чем для предложенной явно-неявной регуляризованной схемы с оптимальным весом.

## 2. Постановка задачи

### 2.1. Физическая постановка задачи

На формирование береговой зоны любого водоема в значительной степени влияет перенос донного материала, находящегося во взвешенном состоянии. Взвеси включают в себя много различных компонентов: частицы глины, илистые вещества, песок, лёсс, карбонатные соединения, эмульсии минеральных масел, нефтепродуктов и другое. Поверхности частиц взвеси способны поглощать различные загрязняющие вещества, среди которых тяжелые металлы и пестициды, оказывающие негативное воздействие на экологическую ситуацию водного объекта. Протекающие на участках побережья и прилегающей к ним акватории процессы приводят в свою очередь к изменению формы донной поверхности, а также береговой линии.

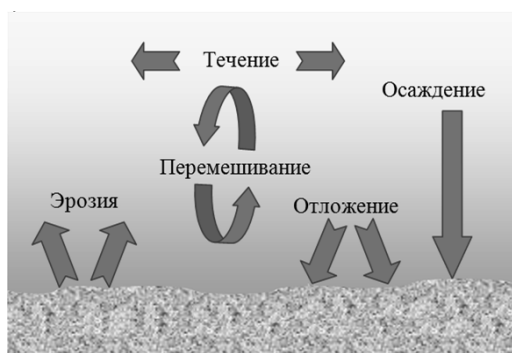


Рис. 1. Схема процесса подъема–осаждения донных частиц

Компоненты, образующие взвесь, попадают в водоемы вследствие размывания окружающих пород атмосферными осадками, с водами рек, в результате жизнедеятельности человека. Поля концентрации взвешенных частиц и переформирование донной поверхности применительно к мелководным акваториям определяется процессами диффузии–конвекции, движением водной среды, процессами подъема, переноса и осаждения донного материала, турбулентным обменом по вертикальному и горизонтальному направлениям (Рис. 1). Под действием силы тяжести частицы в водном потоке опускаются вниз. Вертикальное перемешивание происходит, соответственно, в восходящих и нисходящих направлениях. Взаимодействие между этими двумя процессами

обеспечивает концентрации вертикальный профиль. Пусть  $h = H + \eta$  — общая глубина водоема, [м],  $H$  — глубина при невозмущенной поверхности водоема, [м],  $\eta$  — возвышение свободной поверхности относительно геоида (уровня моря), [м].

Рассматривается водный объем  $V(x, y, z) = \{0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, -\eta_{\min} \leq z \leq H_{\max}\}$ , в котором в течение времени исследования  $(0 < t \leq T]$  происходят подъем, адвективный перенос и осаждение взвешенного вещества. Необходимо определить значение концентрации взвеси в различных точках рассматриваемой области  $V$  через фиксированные промежутки времени. Предполагается, что все необходимые параметры исследуемой модели известны.

**2.2. Математическая постановка задачи**

В качестве  $V$  возьмем «скошенный» к берегу «параллелепипед», верхняя грань которого лежит на свободной поверхности водоема, а нижним основанием является часть поверхности дна. Пусть  $\Gamma$  — граница области  $V$ ,  $S$  — боковая граничная поверхность  $\bar{V} = V \cup \Gamma$ ,  $S_{top}$ ,  $S_{bottom}$  — части свободной поверхности и поверхности дна соответственно, подчиняющиеся условиям:  $\{0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y\}$  (Рис. 2). Считаем, что в водном объеме  $V$  находятся частицы взвеси, которые в точке с координатами  $(x, y, z)$  и в момент времени  $t$ , [с] имеют концентрацию:  $c = c(x, y, z, t)$ , [мг/л].

Уравнение, описывающее поведение частиц, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(uc)}{\partial x} + \frac{\partial(vc)}{\partial y} + \frac{\partial((w+w_g)c)}{\partial z} = \mu \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu \frac{\partial c}{\partial z} \right) + F. \tag{1}$$

Здесь:  $u, v, w$  — компоненты вектора скорости движения жидкости  $\vec{U}$ , [м/с];  $w_g$  — гидравлическая

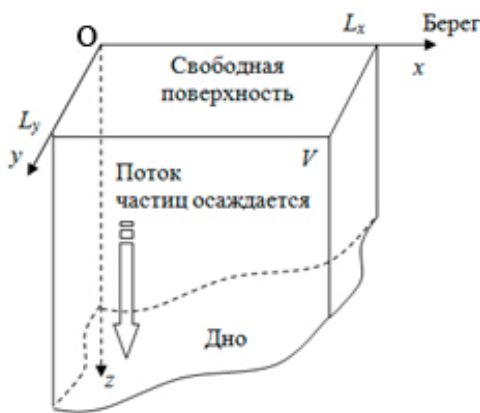


Рис. 2. Расчетная область задачи

крупность или скорость осаждения частиц, [м/с];  $\mu, \nu$  — коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии частиц соответственно, [м<sup>2</sup>/с];  $F$  — функция интенсивности распределения источников взвешенного вещества.

Решение системы (1) будем отыскивать в некоторой заданной области непрерывного изменения аргументов  $\Pi_T \equiv \Pi_T(x, y, z, t) = V(x, y, z) \times (0, T)$ , представляющей собой четырехмерный цилиндр высотой  $T$  с образующими, параллельными оси времени  $Ot$ . В совокупности с граничными условиями для функции концентрации частиц решение уравнения (1) позволяет определять потоки взвешенного вещества как по направлению к берегу, так и вдоль него.

В зависимости от величины  $(w + w_g)$  в уравнении (1) можно изучать динамически активную взвесь исходя из условий: при  $(w + w_g) > 0$  взвесь выпадает в осадок; при  $(w + w_g) < 0$  взвесь всплывает; при  $(w + w_g) = 0$  взвесь пассивна.

Добавим к уравнению (1) начальные и граничные условия (предполагая, что осаждение частиц на дно необратимо):

– начальные условия при  $t = 0$

$$c(x, y, z, 0) \equiv c_0(x, y, z); \tag{2}$$

– граничные условия на боковой границе  $S$  в любой момент времени  $S \times (0, T]$

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0, \quad \text{если } (\mathbf{U}_\Gamma, \mathbf{n}) \leq 0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial c}{\partial n} = -\frac{u_\Gamma}{\mu} c, \quad \text{если } (\mathbf{U}_\Gamma, \mathbf{n}) \geq 0, \tag{4}$$

где  $\mathbf{n}$  — внешняя нормаль к границе области  $S$ ,  $\mathbf{U}_\Gamma$  — вектор скорости движения жидкости на границе  $S$ ,  $u_\Gamma$  — проекция вектора скорости  $\mathbf{U}_\Gamma$  на направление нормали  $\mathbf{n}$  на границе области  $S$ ;

– граничные условия на поверхности воды  $S_{top} \times (0 < t \leq T]$

$$\frac{\partial c}{\partial z} = 0; \tag{5}$$

– граничные условия на дне  $S_{bottom} \times (0 < t \leq T]$

$$\frac{\partial c}{\partial n} = -\frac{w_g}{v} c. \quad (6)$$

### 3. Метод решения

#### 3.1. Построение явно-неявной схемы расщепления для задачи транспорта взвеси

Слагаемые в левой части уравнения (1), кроме производной по времени, описывают адвективный перенос взвешенных частиц течением жидкости при действии силы тяжести. Слагаемые в правой части воспроизводят диффузию взвесей. Характер изменения коэффициента вертикальной микротурбулентной диффузии существенно отличается от характера коэффициента диффузии по горизонтальному направлению, который для процессов диффузии–конвекции взвесей в прибрежных системах практически постоянен. «Вертикальный» же коэффициент микротурбулентной диффузии в зависимости от вертикальной координаты может иметь несколько экстремумов и меняется по величине в разы в силу физических причин. Дополнительным осложнением, вызывающим существенное изменение коэффициента перед второй разностной производной по вертикальной координате, является значительное изменение глубины для прибрежных систем, которое квадратичным образом влияет на значение данного коэффициента. Следовательно, одномерный дискретный оператор для диффузии–конвекции–осаждения взвесей по вертикальной координате в целом обладает плохой обусловленностью (большим разбросом собственных значений). Если строить явную схему, не проводя расщепления и привлекать явную схему, дополненную для повышения запаса устойчивости разностной производной второго порядка по времени с малым множителем, то допустимый шаг по времени будет определяться характерным временем распространения возмущений (концентраций взвешенного вещества) в пределах одной сеточной ячейки.

Для прибрежных систем время распространения возмущений составляет сотни–тысячи секунд физического времени в горизонтальных направлениях при используемых на практике сетках с размерами ячеек из многих десятков–сотен метров и длится несколько секунд–десятков секунд по вертикальному направлению, когда размеры ячеек по вертикали равны десяткам сантиметров. Именно физическое время и определяет допустимый шаг по времени в явной схеме без расщепления со второй производной по времени. Такая большая разница физических времен является основной причиной построения рассматриваемых ниже явно-неявных схем расщепления.

Итак, будем ориентироваться на использование явно-неявной схемы, которая позволяет строить параллельные алгоритмы, экономичные в отношении суммарных временных затрат на выполнение арифметических операций и операций обмена информацией между процессорами.

Уравнение (1) запишем в виде:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + Ac = f, \quad f = f(x, y, z, t), \quad (x, y, z) \in V, \quad t \in [0, T], \quad (7)$$

где  $f$  — функция–источник,  $Ac$  — дифференциальный эллиптический оператор по пространственным переменным с младшими производными, для которого справедливо следующее представление:

$$\begin{aligned} Ac &= \frac{\partial(uc)}{\partial x} + \frac{\partial(vc)}{\partial y} + \frac{\partial((w+w_g)c)}{\partial z} - \mu \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( v \frac{\partial c}{\partial z} \right) = (A_{12} + A_3)c, \\ A_{12}c &= \frac{\partial(uc)}{\partial x} + \frac{\partial(vc)}{\partial y} - \mu \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right), \\ A_3c &= \frac{\partial((w+w_g)c)}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( v \frac{\partial c}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Заметим, что в гильбертовом пространстве  $L_2$  выполнено условие  $(Ac, c) \geq 0$ , являющееся необходимым для построения устойчивых схем расщепления [7–9].

На временном отрезке  $0 \leq t \leq T$  построим равномерную сетку  $\omega_\tau$  с шагом  $\tau$ , то есть зададим множество точек

$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, N, N\tau = T\}.$$

Если решение  $c^{n-1}(x, y, z, t_{n-1})$  в некоторый момент времени  $t_{n-1}$  известно, то решение в момент

времени  $t_n$  можно выразить через это известное решение. Отыскивать решение уравнения (7) при граничных условиях (2)–(6) будем в виде:

$$\frac{c^{n+1} - c^n}{\tau} + A_{12}c^n + A_3c^{n+\sigma} = f, \quad n = 1, \dots, N, \tag{9}$$

где  $c^{n+\sigma} = \sigma c^{n+1} + (1-\sigma)c^n$ ,  $\sigma \in [0, 1]$  — вес схемы [10, 11].

Для увеличения допустимого шага по времени при аппроксимации двумерной задачи (7), (8) с помощью явной разностной схемы добавим в левую часть уравнения (9) производную по времени второго порядка с малым множителем–регуляризатором [12, 13], не превосходящим по величине характерное время распространения возмущений концентраций по горизонтальным направлениям:

$$\begin{aligned} \tau^* \frac{c^{n+1} - c^n}{\tau^2} + \frac{c^{n+1} - c^n}{\tau} + A_{12}c^n + A_3c^{n+\sigma} &= f, \quad n = 1, \\ \frac{\tau^*}{2} \frac{c^{n+1} - 2c^n + c^{n-1}}{\tau^2} + \frac{c^{n+1} - c^n}{\tau} + A_{12}c^n + A_3c^{n+\sigma} &= f, \quad n = 2, \dots, N, \end{aligned} \tag{10}$$

где коэффициент  $\tau^*$  связан с характерным шагом пространственной сетки  $\tau$  и характерной скоростью звука в водной среде  $\tilde{c}$ :  $\tau^* \sim \tau/\tilde{c}$ . В [14] показано, что при  $\tau^* \rightarrow 0$  решение задачи (10) стремится к решению задачи (9).

В области  $\bar{V}$  построим сетку  $\bar{\omega}_h$ , которую назовем связанной. Множество узлов данной сетки состоит из внутренних и граничных узлов. Совокупность  $\omega_h$  внутренних узлов зададим множеством точек:

$$\omega_h = \{x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z; \quad i = 0, \dots, N_x, \quad j = 0, \dots, N_y, \quad k = 0, \dots, N_z; \quad N_x h_x = L_x, \quad N_y h_y = L_y, \quad N_z h_z = L_z\},$$

где  $h_x, h_y, h_z$  — шаги по пространству,  $N_x, N_y, N_z$  — количество узлов по соответствующим пространственным координатам. Через  $o_{i,j,k}$  обозначим «заполненность» ячейки  $(i, j, k)$ . В общем случае (при 3D геометрии) под заполненностью ячейки понимаем отношение той части объема ячейки, которая заполнена жидкостью, к общему объему ячейки. Степень заполненности ячейки определяется давлением столба жидкости внутри нее. Если среднее давление в узлах, которые относятся к вершинам рассматриваемой ячейки, больше давления столба жидкости внутри ячейки, то ячейка считается заполненной полностью ( $o_{i,j,k} = 1$ ).

Введем коэффициенты  $q_m$ ,  $m = \overline{0, 6}$ , описывающие заполненность областей, находящихся в окрестности ячейки  $(i, j, k)$ . Указанные области обозначим как  $D_m$ ,  $m = \overline{1, 6}$ , а их заполненные части как  $\Omega_m$ . Во введенных обозначениях формулы для вычисления коэффициентов  $q_m$  имеют вид:

$$\begin{aligned} (q_m)_{i,j,k} &= \frac{S_{\Omega_m}}{S_{D_m}}, \quad (q_0)_{i,j,k} = \frac{1}{2}((q_1)_{i,j,k} + (q_2)_{i,j,k}), \\ (q_1)_{i,j,k} &= \frac{o_{i+1,j,k} + o_{i+1,j+1,k} + o_{i+1,j,k+1} + o_{i+1,j+1,k+1}}{4}, \quad (q_2)_{i,j,k} = \frac{o_{i,j,k} + o_{i,j+1,k} + o_{i,j,k+1} + o_{i,j+1,k+1}}{4}, \\ (q_3)_{i,j,k} &= \frac{o_{i+1,j+1,k} + o_{i,j+1,k} + o_{i+1,j+1,k+1} + o_{i,j+1,k+1}}{4}, \quad (q_4)_{i,j,k} = \frac{o_{i,j,k} + o_{i+1,j,k} + o_{i,j,k+1} + o_{i+1,j,k+1}}{4}, \\ (q_5)_{i,j,k} &= \frac{o_{i,j,k+1} + o_{i+1,j,k+1} + o_{i+1,j+1,k+1} + o_{i,j+1,k+1}}{4}, \quad (q_6)_{i,j,k} = \frac{o_{i,j,k} + o_{i+1,j,k} + o_{i+1,j+1,k} + o_{i,j+1,k}}{4}. \end{aligned}$$

Далее, на основе метода баланса с учетом найденных коэффициентов заполненности контрольных областей можно аппроксимировать уравнения (10).

Дискретный аналог регуляризованного уравнения для расчета транспорта взвеси выглядит так [1]:

$$(q_0)_{i,j,k} \frac{\tau^*}{2} \frac{c_{i,j,k}^{n+1} - 2c_{i,j,k}^n + c_{i,j,k}^{n-1}}{\tau^2} + (q_0)_{i,j,k} \frac{c_{i,j,k}^{n+1} - c_{i,j,k}^n}{\tau} + (q_1)_{i,j,k} u_{i+1/2,j,k} \frac{c_{i+1,j,k}^n - c_{i,j,k}^n}{2h_x} +$$

$$\begin{aligned}
& + (q_2)_{i,j,k} u_{i-1/2,j,k} \frac{c_{i,j,k}^n - c_{i-1,j,k}^n}{2h_x} + (q_3)_{i,j,k} v_{i,j+1/2,k} \frac{c_{i,j+1,k}^n - c_{i,j,k}^n}{2h_y} + (q_4)_{i,j,k} v_{i,j-1/2,k} \frac{c_{i,j,k}^n - c_{i,j-1,k}^n}{2h_y} + \\
& + (q_5)_{i,j,k} (w_{i,j,k+1/2} + w_g) \frac{c_{i,j,k+1}^{n+\sigma} - c_{i,j,k}^{n+\sigma}}{2h_z} + (q_6)_{i,j,k} (w_{i,j,k-1/2} + w_g) \frac{c_{i,j,k}^{n+\sigma} - c_{i,j,k-1}^{n+\sigma}}{2h_z} = \\
& = (q_1)_{i,j,k} \mu \frac{c_{i+1,j,k}^n - c_{i,j,k}^n}{h_x^2} - (q_2)_{i,j,k} \mu \frac{c_{i,j,k}^n - c_{i-1,j,k}^n}{h_x^2} + (q_3)_{i,j,k} \mu \frac{c_{i,j+1,k}^n - c_{i,j,k}^n}{h_y^2} - \\
& - (q_4)_{i,j,k} \mu \frac{c_{i,j,k}^n - c_{i,j-1,k}^n}{h_y^2} + (q_5)_{i,j,k} v_{i,j,k+1/2} \frac{c_{i,j,k+1}^{n+\sigma} - c_{i,j,k}^{n+\sigma}}{h_z^2} - (q_6)_{i,j,k} v_{i,j,k-1/2} \frac{c_{i,j,k}^{n+\sigma} - c_{i,j,k-1}^{n+\sigma}}{h_z^2} + f_{i,j,k}^n. \quad (11)
\end{aligned}$$

Для расчета компонент вектора скорости движения водной среды использована трехмерная модель гидродинамического обтекания рельефа дна с учетом донного трения и подъема уровня дна.

### 3.2. Сеточные уравнения

Запишем сеточные уравнения для задачи (11) в канонической форме [7]:

$$A_{i,j} c_{i,j,k}^{n+1} - B_{1,i,j} c_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{2,i,j} c_{i,j,k-1}^{n+1} = F_{i,j,k}^n, \quad (12)$$

где

$$B_{1,i,j,k} = (q_5)_{i,j,k} \left( -\frac{w_{i,j,k+1/2} + w_g}{2h_z} + \frac{v_{i,j,k+1/2}}{h_z^2} \right) \sigma, \quad B_{2,i,j,k} = (q_6)_{i,j,k} \left( \frac{w_{i,j,k-1/2} + w_g}{2h_z} + \frac{v_{i,j,k-1/2}}{h_z^2} \right) \sigma,$$

$$A_{i,j,k} = (q_0)_{i,j,k} \frac{\tau + \tau^*/2}{\tau^2} + B_{1,i,j} + B_{2,i,j},$$

$$F_{i,j,k}^n = D_{0,i,j,k} c_{i,j,k}^n + D_{1,i,j,k} c_{i+1,j,k}^n + D_{2,i,j,k} c_{i-1,j,k}^n + D_{3,i,j,k} c_{i,j+1,k}^n + D_{4,i,j,k} c_{i,j-1,k}^n + D_{5,i,j,k} c_{i,j+1,k}^n + D_{6,i,j,k} c_{i,j-1,k}^n - E_{i,j,k} c_{i,j,k}^{n-1} + f_{i,j,k}^n,$$

$$D_{1,i,j,k} = (q_1)_{i,j,k} \left( -\frac{u_{i+1/2,j,k}}{2h_x} + \frac{\mu}{h_x^2} \right), \quad D_{2,i,j,k} = (q_2)_{i,j,k} \left( \frac{u_{i-1/2,j,k}}{2h_x} + \frac{\mu}{h_x^2} \right),$$

$$D_{3,i,j,k} = (q_3)_{i,j,k} \left( -\frac{v_{i,j+1/2,k}}{2h_y} + \frac{\mu}{h_y^2} \right), \quad D_{4,i,j,k} = (q_4)_{i,j,k} \left( \frac{v_{i,j-1/2,k}}{2h_y} + \frac{\mu}{h_y^2} \right),$$

$$D_{5,i,j,k} = (q_5)_{i,j,k} \left( -\frac{w_{i,j,k+1/2} + w_g}{2h_z} + \frac{v_{i,j,k+1/2}}{h_z^2} \right) (1-\sigma), \quad D_{0,i,j,k} = (q_0)_{i,j,k} \frac{\tau + \tau^*}{\tau^2} - \sum_{p=1}^4 D_{p,i,j,k},$$

$$D_{6,i,j,k} = (q_6)_{i,j,k} \left( \frac{w_{i,j,k-1/2} + w_g}{2h_z} + \frac{v_{i,j,k-1/2}}{h_z^2} \right) (1-\sigma), \quad E_{i,j,k} = (q_0)_{i,j,k} \frac{\tau^*}{2\tau^2}.$$

При этом  $A$  — коэффициенты в центре шаблона,  $B_m$  (здесь  $m=1,2$ ) — коэффициенты в окрестности шаблона на слое  $(n+1)$ ,  $D$  и  $E$  — коэффициенты в окрестности шаблона на слое  $n$ ,  $F$  — члены правой части сеточного уравнения.

Для расчета правой части сеточного уравнения (12) требуется произвести  $16N$  арифметических операций. Для решения задачи (12) на первом временном слое необходимо выполнить  $8N$ , а для последующих слоев —  $5N$  арифметических операций. Таким образом, всего для перехода между слоями осуществляется  $21N$  операций.

Формула для расчета по явной схеме выглядит так:

$$c_{i,j,k}^{n+1} = (B_{1,i,j}/A_{i,j}) c_{i,j,k+1}^{n+1} + (B_{2,i,j}/A_{i,j}) c_{i,j,k-1}^{n+1} + (F_{i,j,k}^n/A_{i,j}),$$

что занимает  $16N$  арифметических операций.

### 3.3. Оптимальное значение весового параметра в схеме с весами для уравнения диффузии–конвекции

Для уравнения диффузии–конвекции предложен алгоритм нахождения оптимального параметра  $\sigma$  в схеме с весами, обеспечивающий минимальную погрешность аппроксимации для заданных значений

шагов временной сетки [15, 16]. Покажем последовательность его реализации на примере начально-краевой задачи для параболического уравнения

$$c'_t + uc'_x = \mu c''_{xx}, \quad u = \text{const}, \quad \mu = \text{const}, \quad 0 < x < L, t > 0, \quad (13)$$

с начальным условием

$$c(x, 0) = c_0(x) \quad (14)$$

и граничными условиями

$$c(0, t) = 0, \quad c(L, t) = 0, \quad t > 0. \quad (15)$$

Требуется найти решение  $c(x, t)$  задачи (13)–(15) класса  $C^2(0 < x < L) \cap C(0 \leq x \leq L) \cap C^1(0 < t < +\infty) \cap C(0 \leq t < +\infty)$ .

Опишем алгоритм нахождения оптимального параметра  $\sigma$ .

1. Задаются вид и значения всех входных функций и параметров модели.
2. Формулируются начальные и граничные условия начально-краевой задачи в соответствии с рассматриваемой моделью.
3. Составляется формальная запись ряда Фурье по ортогональному базису, порожденного функцией решения задачи согласно формуле:

$$c(x, 0) = \sum_{m=-N}^N C_m(0) \exp(j\omega mx), \quad j \text{ — мнимая единица.}$$

4. Вычисляются коэффициенты ряда Фурье с использованием выражения:

$$C_m(0) = \frac{2}{L} \int_0^L c(x, 0) \exp(j\omega mx) dx.$$

5. Определяются собственные значения  $\lambda_m$ :

$$\lambda_m = - \left( 2\mu \frac{1 - \cos\left(\frac{\pi m}{N}\right)}{h^2} + j\mu \frac{\sin\left(\frac{\pi m}{N}\right)}{h} \right)$$

и значение  $\lambda_{\max}$ :  $\lambda_{\max} = \max_m |\lambda_m|$ .

6. Вычисляется значение  $\chi_m$ , необходимое для определения погрешности на каждом временном слое:

$$\chi_m = \frac{\lambda_m}{\lambda_{\max}} \tau_0.$$

7. Находятся числа  $z_{1,m}$ ,  $z_{2,m}$  с использованием формул:

$$z_{1,m} = 1 - \exp(-\chi_m), \quad z_{2,m} = \frac{1 - \exp(-\chi_m) - \chi_m}{\chi_m}.$$

8. Рассчитывается весовой параметр  $\sigma$ , при котором относительная погрешность минимальна:

$$\sigma = - \frac{\sum_{m=1}^N \max_{k=0, n-1} |C_m(t^k)|^2 (\text{Re } z_{1,m} \text{ Re } z_{2,m} + \text{Im } z_{1,m} \text{ Im } z_{2,m})}{\sum_{m=1}^N \max_{k=0, n-1} |C_m(t^k)|^2 ((\text{Re } z_{1,m})^2 + (\text{Im } z_{1,m})^2)}.$$

9. На основе разностной схемы с весами устанавливается значение функции  $c(x, t)$  на текущем временном слое  $c^{n+1}$  через значения  $c^n$  на предыдущем слое:

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\tau} + u \frac{c_{i+1}^{n+\sigma} + c_{i-1}^{n+\sigma}}{2h} = \mu \frac{c_{i+1}^{n+\sigma} - 2c_i^{n+\sigma} + c_{i-1}^{n+\sigma}}{h^2}.$$

### 3.4. Описание параллельного алгоритма

При реализации параллельного счета с целью решения вычислительно трудоемких задач диффузии–конвекции применены методы декомпозиции сеточных областей, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы. Декомпозиция расчетной двумерной области выполнена по двум пространственным переменным  $x$ ,  $y$ .

Максимальная производительность многопроцессорной вычислительной системы составляет 18.8 терафлопс. В качестве вычислительных узлов используются 128 однотипных 16-ядерных Blade-серверов HP ProLiant BL685c, каждый из которых оснащен четырьмя 4-ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и оперативной памятью в объеме 32 ГБ (Табл.).

Таблица. Ускорение и эффективность работы параллельного варианта метода декомпозиции

Размеры сетки (узлы)	Ускорение			Эффективность		
	1000×1000	2000×2000	5000×5000	1000×1000	2000×2000	5000×5000
Количество вычислителей						
1	1	1	1	1	1	1
2	1,645	1,716	1,979	0,823	0,858	0,99
4	3,689	3,156	3,064	0,922	0,788	0,766
8	4,843	4,72	8,686	0,605	0,59	1,086
16	5,745	7,184	11,5	0,979	0,449	0,719
32	14,607	13,13	20,936	0,456	0,41	0,654
64	32,8	23,63	37,114	0,513	0,369	0,58
128	75,167	28,454	96,059	0,587	0,222	0,75
256	55,253	42,924	165,434	0,216	0,168	0,646
512	27,883	67,284	228,36	0,054	0,131	0,446

## 4. Результаты расчетов

Исходными данными являлись: глубина водоема  $H = 10$  м; объем загрузки  $741 \text{ м}^3$ ; скорость течения  $0,2 \text{ м/с}$ ; скорость осаждения  $w_g = 2,042 \text{ мм/с}$  (по Стоксу); плотность грунта  $1600 \text{ кг/м}^3$ ; процентное содержание пылеватых частиц (диаметр  $d$  меньше  $0,05 \text{ мм}$ ) в песчаных грунтах  $26,83\%$ . Параметры расчетной области составляли: длина  $L_x = 3 \text{ км}$ ; ширина  $L_y = 1,4 \text{ км}$ ; шаг по горизонтальной пространственной координате  $h_x = h_y = 20 \text{ м}$ ; шаг по вертикальной пространственной координате  $h_z = 1 \text{ м}$ ; расчетный интервал времени 2 часа.

На рисунке 3 показано изменение концентрации взвешенных частиц (в  $\text{мг/л}$ ) с течением времени. Приведены значения поля концентрации взвеси в сечении расчетной области плоскостью, образованной векторами, направленными вертикально и вдоль течения, и проходящей через точку выгрузки. Течение направлено слева направо.

Для получения оптимальных значений шагов по времени решен ряд задач переноса взвешенных частиц на основе явной схемы и явно-неявной схемы (11) с оптимальным весом. Функции погрешностей разностных схем приведены на рисунке 4 (1 — для явной схемы, 2 — для схемы (11)). На вертикальной оси обозначена относительная погрешность

$$\Psi = \sqrt{\frac{\sum_{i,j,k} (\tilde{c}_{i,j,k} - c_{i,j,k})^2}{\sum_{i,j,k} c_{i,j,k}^2}},$$



где  $c_{i,j,k}$  — точное значение решения задачи переноса взвешенных частиц в узле  $(i, j, k)$ ,  $\tilde{c}_{i,j,k}$  — численное решение, зависящее от величины шага по времени. Вдоль горизонтальной оси нанесен относительный шаг по времени  $\tau_0 = \tau/\tau_m$ , где  $\tau_m = \left(2\mu \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2}\right)\right)^{-1}$ . Из условия устойчивости явной схемы следует, что величина  $\tau_m$  является ограничением сверху на шаг по времени. Параметр  $\tau_0$  удобно использовать для описания погрешности  $\psi$ , поскольку при изменении размеров сетки по пространственным координатам функция  $\psi = \psi(\tau_0)$  практически остается неизменной.

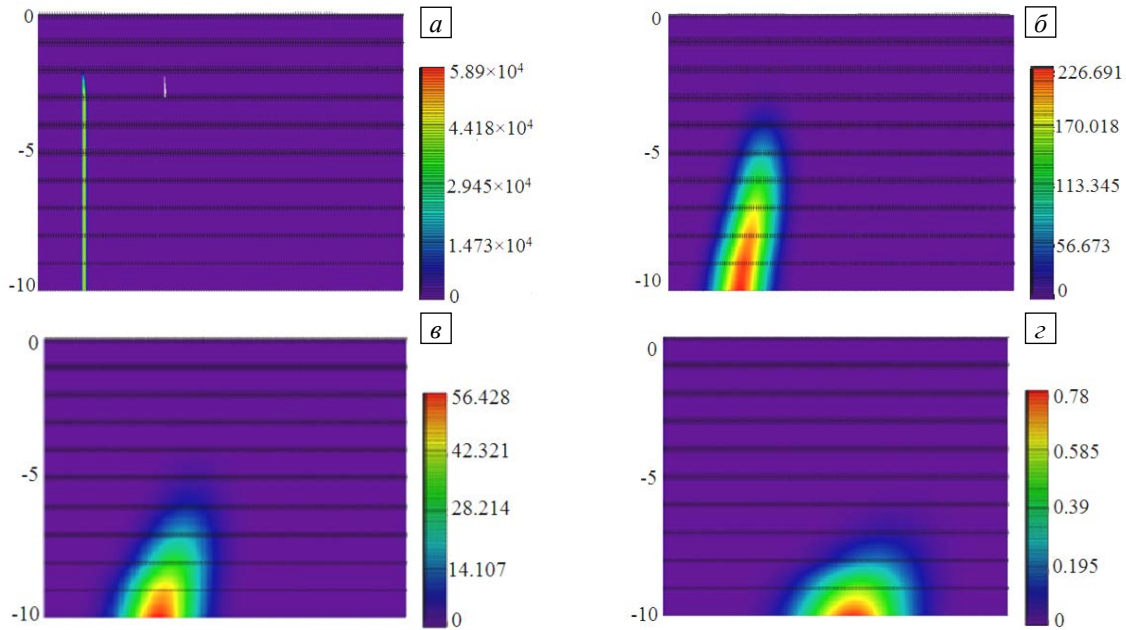


Рис. 3. Вид поля концентрации взвешенных частиц в разные моменты времени  $t$ : в начальный момент (а); через 30 мин (б), через 1 ч (в), через 2 ч (з) после момента выгрузки

Из рисунка 4 видно, что погрешность явной схемы существенно больше, чем погрешность предложенной явно- неявной схемы (11) с оптимальными весами. Для того чтобы относительная погрешность явной схемы составила 1%, величину  $\tau_0$  необходимо брать равной 0,01348; в случае использования предложенной явно- неявной схемы (11) параметр  $\tau_0 = 0,10087$ . Таким образом, для получения решения с точностью до 1% при явно- неявной схеме (11) необходимо сделать в 7,483 раза меньше шагов по сравнению с явной схемой.

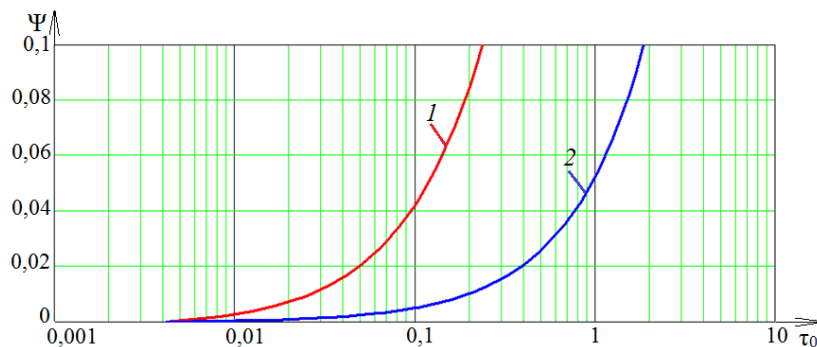


Рис. 4. Зависимость относительной погрешности аппроксимации от шага по времени  $\tau$

### 5. Заключение

Построен и исследован алгоритм расщепления специального вида — на основе явно- неявных схем с весами для многомерных задач диффузии- конвекции. На примере численной реализации 3D модели транспорта взвесей в прибрежных водных системах показано его применение. Данная схема расщепления позволяет минимизировать количество обменов информацией, которые осуществляются между соседними

процессорами при переходе с одного слоя на другой параллельным способом в приграничных узлах подобластей при геометрической декомпозиции трехмерной сеточной области вертикальными плоскостями.

Представлены результаты сравнения вычислительных эффективностей явных и явно-неявных регуляризованных схем с оптимальным весом, демонстрирующие преимущество последних.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-01-00701\_a).

## Литература

1. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Шишениа А.В., Тимофеева Е.Ф. Предсказательное моделирование прибрежных гидрофизических процессов на многопроцессорной системе с использованием явных схем // Матем. моделирование. 2018. Т. 30, № 3. С. 83-100. (English version <https://doi.org/10.1134/S2070048218050125>)
2. Alekseenko E., Roux B., Sukhinov A., Kotarba R., Fougere D. Coastal hydrodynamics in a windy lagoon // *Nonlinear Processes in Geophysics*. 2013. Vol. 20, No. 2. P. 189-198. <https://doi.org/10.5194/npg-20-189-2013>
3. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежной зоне мелководных водоемов // Матем. моделирование. 2013. Т. 25, № 12. С. 65-82. (English version <https://doi.org/10.1134/S2070048214040097>)
4. Sukhinov A.I., Sukhinov A.A. Chapter 29 – Reconstruction of 2001 ecological disaster in the Azov sea on the basis of precise hydrophysics models // *Parallel computational fluid dynamics. Multidisciplinary applications* / Ed. G. Winter, A. Ecer, P. Fox, J. Periaux, N. Satofuka. Elsevier, 2005, 416 p. P. 231-238. <https://doi.org/10.1016/B978-044452024-1/50030-0>
5. Sukhinov A.A., Sukhinov A.I. Chapter 28 – 3D Model of Diffusion-Advection-Aggregation Suspensions in Water Basins and Its Parallel Realization // *Parallel computational fluid dynamics. Multidisciplinary applications* / Ed. G. Winter, A. Ecer, P. Fox, J. Periaux, N. Satofuka. Elsevier, 2005, 416 p. P. 223-230. <https://doi.org/10.1016/B978-044452024-1/50029-4>
6. Любимова Т.П., Лепихин А.П., Паршакова Я.Н., Циберкин К.Б. Численное моделирование инфильтрации жидких отходов из хранилища в прилегающие грунтовые воды и поверхностные водоёмы // *Вычисл. мех. сплош. сред*. 2015. Т. 8, № 3. С. 310-318. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2015.8.3.26>
7. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. М.: Научный мир, 2000. 358 с.
8. Afanas'eva N.M., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Unconditionally monotone schemes for unsteady convection-diffusion problems // *Comput. Meth. Appl. Math*. 2013. Vol. 13. P. 185-205. <https://doi.org/10.1515/cmam-2013-0002>
9. Liu X., Qi S., Huang Y., Chen Y., Du P. Predictive modeling in sediment transportation across multiple spatial scales in the Jialing River Basin of China // *International Journal of Sediment Research*. 2015. Vol. 30. P. 250-255. <https://doi.org/10.1016/j.ijsrc.2015.03.013>
10. Sutton T.M., Aviles B.N. Diffusion theory methods for spatial kinetics calculations // *Progr. Nucl. Energ*. 1996. Vol. 30. P. 119-182. [https://doi.org/10.1016/0149-1970\(95\)00082-U](https://doi.org/10.1016/0149-1970(95)00082-U)
11. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М.: Эдиториал УРСС, 1999. 248 с.
12. Четверушкин Б.Н. Пределы детализации и формулировка моделей уравнений сплошных сред // Матем. моделирование. 2012. Т. 24, № 11. С. 33-52. (English version <https://doi.org/10.1134/S2070048213030034>)
13. Д'Асчензо Н., Савельев В.И., Четверушкин Б.Н. Об одном алгоритме решения параболических и эллиптических уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2015. Т. 55, № 8. С. 1320-1328. <https://doi.org/10.7868/S0044466915080037>
14. Четверушкин Б.Н., Д'Асчензо Н., Савельев А.В., Савельев В.И. Кинетическая модель для магнитной газовой динамики // Матем. моделирование. 2017. Т.29, № 3. С. 3-15. (English version <https://doi.org/10.1134/S2070048217050039>)
15. Hirt C.W., Nichols B.D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // *J. Comput. Phys*. 1981. Vol. 39. P. 201-225. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5)
16. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Сидорякина В.В., Проценко С.В. Разностная схема с оптимальным весом для уравнения диффузии-конвекции // *Вычислительные методы и программирование*. 2019. Т. 20, № 3. С. 283-292. <https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r325>

## References

1. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Shishenya A.V., Timofeeva E.F. Predictive modeling of coastal hydrophysical processes in multiple-processor systems based on explicit schemes. *Math. Models. Comput. Simul.*, 2018, vol. 10, pp. 648-658. <https://doi.org/10.1134/S2070048218050125>
2. Alekseenko E., Roux B., Sukhinov A., Kotarba R., Fougere D. Nonlinear hydrodynamics in a mediterranean lagoon. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 2013, vol. 20, pp. 189-198. <https://doi.org/10.5194/npg-20-189-2013>
3. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs. *Math. Models. Comput. Simul.*, 2014, vol. 6, pp. 351-363. <https://doi.org/10.1134/S2070048214040097>
4. Sukhinov A.I., Sukhinov A.A. Chapter 29 – Reconstruction of 2001 ecological disaster in the Azov sea on the basis of precise hydrophysics models. *Parallel computational fluid dynamics. Multidisciplinary applications*, ed. G. Winter, A. Ecer, P. Fox, J. Periaux, N. Satofuka. Elsevier, 2005, 416 p. P. 231-238. <https://doi.org/10.1016/B978-044452024-1/50030-0>

5. Sukhinov A.A., Sukhinov A.I. Chapter 28 – 3D Model of Diffusion-Advection-Aggregation Suspensions in Water Basins and Its Parallel Realization. *Parallel computational fluid dynamics. Multidisciplinary applications*, ed. G. Winter, A. Ecer, P. Fox, J. Periaux, N. Satofuka. Elsevier, 2005, 416 p. P. 223-230. <https://doi.org/10.1016/B978-044452024-1/50029-4>
6. Lyubimova T.P., Lepikhin A.P., Parshakova Ya.N., Tsiberkin K.B. Numerical modeling of liquid-waste infiltration from storage facilities into surrounding groundwater and surface-water bodies. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2015, vol. 8, no. 3, pp. 310-318. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2015.8.3.26>
7. Samarskiy A.A., Gulin, A.V. *Chislennyye metody matematicheskoy fiziki* [Numerical methods of mathematical physics]. Moscow, Nauchnyy mir, 2000. 358 p.
8. Afanas'eva N.M., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. unconditionally monotone schemes for unsteady convection-diffusion problems. *Comput. Meth. Appl. Math.*, 2013, vol. 13, pp. 185-205. <https://doi.org/10.1515/cmam-2013-0002>
9. Liu X., Qi S., Huang Y., Chen Y., Du P. Predictive modeling in sediment transportation across multiple spatial scales in the Jialing River Basin of China. *International Journal of Sediment Research*, 2015, vol. 30, pp. 250-255. <https://doi.org/10.1016/j.ijsrc.2015.03.013>
10. Sutton T.M., Aviles B.N. Diffusion theory methods for spatial kinetics calculations. *Progr. Nucl. Energ.*, 1996, vol. 30, pp. 119-182. [https://doi.org/10.1016/0149-1970\(95\)00082-U](https://doi.org/10.1016/0149-1970(95)00082-U)
11. Samarskiy A.A. Vabishchevich P.N. *Chislennyye metody resheniya zadach konveksii-diffuzii* [Numerical methods for solving convection-diffusion problems]. Moscow, Editorial URSS, 1999. 248 p.
12. Chetverushkin B.N. Resolution limits of continuous media models and their mathematical formulations. *Math. Models. Comput. Simul.*, 2013, vol. 5, pp. 266-279. <https://doi.org/10.1134/S2070048213030034>
13. D'Ascenzo N., Saveliev V.I., Chetverushkin B.N. On an algorithm for solving parabolic and elliptic equations. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2015, vol. 55, pp. 1290-1297. <https://doi.org/10.7868/S0044466915080037>
14. Chetverushkin B.N., D'Ascenzo N., Saveliev A.V., Saveliev V.I. A kinetic model for magnetogas dynamics. *Math. Models. Comput. Simul.*, 2017, vol. 9, pp. 544-553. <https://doi.org/10.1134/S2070048217050039>
15. Hirt C.W., Nichols B.D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 1981, vol. 39, pp. 201-225. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5)
16. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Sidoryakina V.V., Protsenko S.V. A difference scheme with the optimal weight for the diffusion-convection equation. *Vychislitel'nyye metody i programirovaniye – Numerical Methods and Programming*, 2019, vol. 20, no. 3, pp. 283-292. <https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r325>

Поступила в редакцию 27.11.2019; после доработки 23.12.2019; принята к опубликованию 23.12.2019

---

Сведения об авторах

Сухинов Александр Иванович, чл.-корр. РАН, дфмн, проф., Донской государственный технический университет (ДГТУ), 344000, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1; e-mail: [sukhinov@gmail.com](mailto:sukhinov@gmail.com)

Чистяков Александр Евгеньевич, дфмн, проф., ДГТУ; e-mail: [cheese\\_05@mail.ru](mailto:cheese_05@mail.ru)

Сидорякина Валентина Владимировна, кфмн, доц., Таганрогский институт им. А.П. Чехова (филиал Ростовского государственного экономического университета (РГЭУ РИНХ)), 347936, г. Таганрог, ул. Инициативная, д.48; e-mail: [cvv9@mail.ru](mailto:cvv9@mail.ru)

Проценко Елена Анатольевна, кфмн, доц., филиал РГЭУ РИНХ; e-mail: [eapros@rambler.ru](mailto:eapros@rambler.ru)