

DOI: [10.7242/1999-6691/2023.16.1.2](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2023.16.1.2)

УДК 532.5

ПОСТРОЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В АЗОВСКОМ МОРЕ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИИ MPI+OPENMP

А.И. Сухинов¹, А.Е. Чистяков¹, А.В. Никитина^{1,2}, А.М. Атаян¹, В.Н. Литвинов¹, М.В. Поркшеян¹¹Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону, Российская Федерация²Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Российская Федерация

Предложена математическая модель расчёта трёхмерных полей вектора скорости движения водной среды, базирующаяся на уравнениях движения Навье–Стокса и уравнении неразрывности, регуляризованном по Б.Н. Четверушкину в случае переменной плотности. При решении трёхмерных задач диффузии–конвекции для областей, которые по своей протяжённости вдоль одного из направлений существенно меньше, чем по остальным двум пространственным направлениям (мелководные водоёмы), используются схемы последовательного разбиения на задачи – двумерную по горизонтали и одномерную по вертикали. Расчёт двумерной задачи осуществляется по явной схеме, одномерной – на основе схемы с весами. Применение схемы с весами позволяет отойти от главного недостатка явной схемы – жёсткого ограничения на величину временного шага. Заданная погрешность достигается при временных шагах, в 10–30 раз превосходящих шаги явной схемы. Описаны параллельные алгоритмы решения сеточных задач гидродинамики, возникающих при численной реализации в пространственно-трёхмерных областях с «вытянутой геометрией», попеременно-треугольным методом и путём расщепления на двумерную и одномерную задачи. Параллельные алгоритмы, использующие гибридную технологию, продемонстрировали своё преимущество по сравнению со стандартными алгоритмами, базирующимися на технологии MPI и ориентированными на супервычислительные системы. Результаты, полученные при запусках созданного программного обеспечения, показали высокую эффективность алгоритмов разработанных для исследования гидрофизических процессов в Азовском море методами и средствами математического моделирования.

Ключевые слова: гидродинамика, сеточные уравнения, попеременно-треугольный итерационный метод, схема расщепления, параллельный алгоритм, гибридная технология

CONSTRUCTION OF PARALLEL ALGORITHMS FOR MODELING HYDRODYNAMIC PROCESSES IN THE AZOV SEA BASED ON HYBRID MPI+OPENMP TECHNOLOGY

A.I. Sukhinov¹, A.E. Chistyakov¹, A.V. Nikitina^{1,2}, A.M. Atayan¹, V.N. Litvinov¹ and M.V. Porksheyann¹¹Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation²South Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation

A mathematical model is proposed to calculate three-dimensional fields of the velocity vector of the aquatic variable-density environment using the equations of motion (Navier–Stokes) and the continuity equation, regularized according to B.N. Chetverushkin. When solving the three-dimensional problems of diffusion-convection for areas that are significantly less in extent along one of the directions than in the other two spatial directions (shallow water bodies), the schemes of sequential splitting of the problems into a two-dimensional problem along the horizontal and a one-dimensional problem along the vertical are used. The calculation of the two-dimensional problem is carried out according to an explicit scheme, while the one-dimensional problem is calculated on the basis of a weights scheme. The use of this scheme makes it possible to eliminate the main drawback of the explicit scheme – a strict constraint on the time step. The specified accuracy is achieved at time steps that are 10–30 times greater than those of the explicit scheme. Parallel algorithms are constructed to solve the hydrodynamic grid problems arising from their numerical implementation in three-dimensional regions with a “prolate geometry” by the alternating-triangular method and by splitting into two-dimensional and one-dimensional problems. The parallel algorithms based on hybrid technology demonstrate their advantage over the standard algorithms developed using MPI technology and oriented to supercomputing systems. The results obtained when launching the created software show the high efficiency of the algorithms developed to study the hydrophysical processes in the Sea of Azov using the methods and tools of mathematical modeling.

Key words: hydrodynamics, grid equations, alternating-triangular iterative method, splitting scheme, parallel algorithm, hybrid technology

1. Введение

В связи с ростом промышленной активности человека берега и прибрежная зона водоёмов подвергаются неблагоприятным воздействиям. Кроме того, ускорившиеся изменения климата также ведут к их деградации. Устойчивое развитие прибрежной зоны возможно только при комплексном подходе к факторам, влияющим на состояние линии берега и прибрежного шельфа. С 2012 года заметно выросло число чрезвычайных ситуаций и стихийных бедствий, которые повлияли на морские и речные экосистемы планеты. Например, сильнейшие за 115 лет наводнения случились в июне 2013 года на Дальнем Востоке России и в Китае. Наводнение, произошедшее с мая по июнь того же года, нанесло ущерб более чем 10 миллиардов евро центру и югу Европы. В этот же период зафиксированы многочисленные очаги наводнений в самых разных уголках земного шара: в Индии, Афганистане, Пакистане и США. Годом ранее тяжелейшие последствия наводнения, в том числе и человеческие жертвы, имели место в Краснодарском крае. В 2014 году в результате шторма произошёл

катастрофический подъём уровня воды в Таганрогском заливе Азовского моря; в 2019 году наблюдалось понижение уровня воды в акватории и довольно продолжительное обнажение дна в результате штормового сгона, который привёл к возникновению пыльных бурь. Кроме того, со сточными водами в мелководные водоёмы поступают биогенные вещества, вызывающие эвтрофикацию, и, как следствие, всплеск роста водорослей (цветение), негативно влияющих на качество воды.

Для прогнозирования рисков и возможности их снижения необходимо разработать относительно недорогие и стабильно функционирующие инструменты, которые позволят получить результат с заданной точностью за оптимальный период времени при учёте данных различных систем мониторинга. Таким инструментарием, в отличие от натуральных исследований, обладает математическое моделирование гидродинамических процессов.

Разрабатываемые математические модели гидрофизики и гидробиологии прибрежных систем являются трёхмерными, нестационарными и существенно нелинейными. Для их численной реализации на трёхмерных расчётных сетках, согласующихся с нетривиальной геометрией береговой линии, возникает необходимость применения характерных значений шага в горизонтальном направлении в диапазоне $50 \div 100$ м, а по вертикали $0,2 \div 1,0$ м. При таких входных данных расчёты с целью прогноза требуют использования сеток, состоящих из $100 \div 1000$ узлов по каждой пространственной координате; число временных слоев при этом может достигать 100, если отталкиваться от ограничений вычислительной устойчивости и точности дискретных моделей. Это значит, что потребуются вычислительные мощности более 50 Тфлопс, а объем требуемой оперативной памяти может достигать 20 Тбайт. Следовательно, необходимы высокоэффективные алгоритмы, ориентированные на выполнение с помощью суперкомпьютера.

Среди результатов соотечественников в области математического моделирования гидродинамических и аэродинамических процессов стоит выделить работы ученых ИПМ им. Келдыша РАН. Так, в работе Б.Н. Четверушкина [1] предложен новаторский подход к решению задач механики сплошной среды, в котором в уравнение неразрывности добавляются дополнительные члены, необходимые для регуляризации, сглаживания решения на пространственно-временных масштабах. В работе [2] результаты вычислений на основе подхода из [1] сопоставлены с данными, полученными в ходе экспериментов.

Весомый вклад в разработку современных алгоритмов и методов построения адаптивных сеток, декомпозиции расчетной области, параллельных вычислений внес М.В. Якобовский [3, 4]. Моделированием распространения ударного фронта с использованием разрывного метода Галеркина в задачах газо- и гидродинамики занимается В.Ф. Тишкин [5]. Большую работу в области изучения гидродинамических и экологических аспектов слияния рек и водоёмов с разными плотностями вод, распространения загрязнений в крупных водных объектах проводят учёные Перми [6–8].

К зарубежным исследованиям динамики сложных систем с применением математического моделирования, относятся работы Stephens P.A., Liu Y.-F., Wang G., Petzold T., Cheriton O.M., Richards Sh.A., Taylor G.I., Fischer. H.B., Thomas Jr. H.A., Phelps E.B., Wrobel L.C., Brebbia C.A., Qinggai W., Li S., Huang L.B., Odum, H.T., Sutherland W.J. и других. Для изучения процессов гидродинамики и биологический кинетики создано множество пакетов прикладных программ, базирующихся на математических моделях, в том числе ориентированных на многопроцессорные вычислительные системы: FlowVision, Ansys Fluent, GAS DYNAMICS TOOL, PHOENICS, Star-CD, ADAM, CAL3 QHC, Chensi, TASCflow, ISC-3, Panache, REMSAD, UAM-IV, ЭКОЛОГ, ПРИЗМА, VITECON и другие. Особо перспективными представляются программные системы с открытым исходным кодом, поддерживающие стандартные форматы при формировании сеток и полей: CalculiX, HeeksCAD, OpenFOAM, Onshape, Code Aster, Code Saturne.

В работе [9] рассматривается решение проблемы изменения климата, которое включает извлечение CO_2 из атмосферы и воды с накоплением его в живых средах обитания, осадочных породах или почве. Авторы проводят национальную и общую инвентаризацию данных на сегодняшний день по «голубому углероду» (углекислому газу), накопленному в мангровых зарослях и морских водорослях.

Статья [10] посвящена разработке метода гидродинамики сглаженных несжимаемых частиц (SPH) с моделированием крупных вихрей (LES), который используется для представления прибрежной механики уединенных волн. Уравнения движения несжимаемой жидкости Навье–Стокса в лагранжевой форме решаются двухшаговым дробным методом. В [11] описана численная модель наката волн на неровные наклонные поверхности. Обсуждается гидродинамика несжимаемых сглаженных частиц (ISPH) с эффективным отслеживанием деформации свободной поверхности в лагранжевой системе координат.

Следует заметить, что применяемые для изучения процессов гидрофизики модели зачастую идеализируются. В них либо не принимаются во внимание многие важные параметры (неоднородность водной толщи, водные потоки, режимы циркуляции микроорганизмов, температура, содержание кислорода, уровень солености и гравитационное оседание примесей), либо используется неподходящий математический аппарат. Однако системы с нарушенной пространственной однородностью не могут быть описаны при помощи точечных вычислений, что отмечено в работе Д.О. Логофета [12]. Помимо перечисленных параметров, существующие модели никак не учитывают геометрию дна и береговой линии, изменение уровня воды у берегов водоёма под воздействием ветра, донное трение, ветровое напряжение, турбулентный обмен, силу Кориолиса, стоки рек, испарение и другое.

Robertson R. и Dong C. [13] выполнили сравнение ряда алгоритмов параметризации вертикального перемешивания воды в океане: Mellor-Yamada 2.5 (MY); Large-McWilliams-Doney's Kpp (LMD); модификация Nakanishi-Niino алгоритма Mellor-Yamada (NN); четыре версии Generic Length Scale (GLS). Вертикальное перемешивание вод мелководных водоёмов также оказывает значительное влияние на характер протекания процессов гидродинамики и биологической кинетики.

Довольно редко встречаются исследования, посвященные реализации решения задач гидродинамики и гидробиологии с использованием технологии параллельных вычислений [14–16].

Прогнозирование чрезвычайных ситуаций на мелководных водоёмах и в прибрежных зонах, независимо от их природы, а также принятие решений по их предотвращению должны осуществляться в кратчайшие сроки, продиктованные в том числе и нормативной документацией. Все это предполагает рассмотрение процессов на супервычислительных системах с помощью математических моделей. Для этого необходимы параллельные алгоритмы, ориентированные на системы с распределённой памятью, позволяющие решать поставленные вычислительно-трудоемкие задачи в заданное время.

2. Математическая модель гидродинамики

Разрабатываемая модель расчёта трёхмерных полей вектора скорости движения водной среды базируется на математической модели гидродинамики мелководных водоёмов, включающей:

– уравнения движения (Навье–Стокса)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_h \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_h \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial u}{\partial z} \right) + 2\Omega (v \sin \vartheta - w \cos \vartheta), \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_h \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_h \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial v}{\partial z} \right) + 2\Omega u \sin \vartheta, \quad (2)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_h \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_h \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\Omega u \cos \vartheta + g; \quad (3)$$

– уравнение неразрывности, регуляризированное по Б.Н. Четверушкину в случае переменной плотности,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \tau^* \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0. \quad (4)$$

В уравнениях (1)–(4) приняты обозначения: $\mathbf{V} = \{u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)\}$ — компоненты вектора скорости водного потока; $P \equiv P(x, y, z, t)$ — полное гидродинамическое давление; $\rho \equiv \rho(x, y, z, t)$ — плотность водной среды; $\mu_h \equiv \mu_h(x, y, z, t)$, $\mu_v \equiv \mu_v(x, y, z, t)$ — горизонтальная и вертикальная составляющие коэффициента турбулентного обмена; $\Omega = \Omega (\cos \vartheta \cdot \mathbf{j} + \sin \vartheta \cdot \mathbf{k})$ — угловая скорость вращения Земли; ϑ — широта места; g — ускорение свободного падения; $\tau^* \sim h/c$ — параметр регуляризации (характерное время между столкновениями молекул водной среды); h — шаг расчётной сетки; c — скорость звука.

В жидкостях звук распространяется в виде объёмных волн растяжения–сжатия. При адиабатическом процессе скорость звука определяется исходя из выражения $c = \sqrt{(\partial P / \partial \rho)_S}$, где S — индекс, показывающий, что производная берётся при постоянной энтропии. Из полного гидродинамического давления условно выделены две составляющие: функция давления столба жидкости и гидродинамическая часть

$$P = p + \rho_0 g z,$$

где $p \equiv p(x, y, z, t)$ — превышение давления над гидростатическим, рассчитанным в случае невозмущённой жидкости, ρ_0 — плотность пресной воды при нормальных условиях.

Система уравнений (1)–(4) рассматривается при следующих краевых условиях:

– на входе (устье рек Дона и Кубани, а также озеро Сиваш) $\mathbf{V} = \mathbf{V}_0$, $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$;

– на боковой границе (берега и дно Азовского моря) $\rho \mu_h \frac{\partial \mathbf{V}_\tau}{\partial n} = -\boldsymbol{\tau}$, $\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial n} = 0$, $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$;

– на верхней границе (поверхность Азовского моря) $\rho \mu_n \frac{\partial \mathbf{V}_\tau}{\partial n} = -\boldsymbol{\tau}$, $w = -\bar{\gamma} - \frac{1}{\rho g} \frac{\partial P}{\partial t}$, $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$;

– на выходе (выход в Чёрное море) $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$, $\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial n} = 0$.

Здесь: $\bar{\gamma}$ — интенсивность испарения жидкости; \mathbf{V}_n , \mathbf{V}_τ — нормальная и тангенциальная составляющие вектора скорости; $\boldsymbol{\tau} = \{\tau_x(x, y, z, t), \tau_y(x, y, z, t), \tau_z(x, y, z, t)\}$ — вектор тангенциального напряжения, который в случае свободной поверхности рассчитывается по формуле: $\boldsymbol{\tau} = \rho_a C_d_s |\mathbf{w}| \mathbf{w}$, где \mathbf{w} — вектор скорости ветра относительно воды, ρ_a — плотность атмосферы, $C_d_s = 0,0026$ — безразмерный коэффициент поверхностного сопротивления, который зависит от скорости ветра и находится в диапазоне 0,0016–0,0032.

Вектор тангенциального напряжения для дна имеет вид: $\boldsymbol{\tau} = \rho_v C_d_d |\mathbf{V}| \mathbf{V}$, где ρ_v — плотность взвеси, $C_d_d = g k^2 / \xi^{1/3}$, k — групповой коэффициент шероховатости в формуле Мэннинга рассматривается в диапазоне 0,025–0,2 (в процессе моделирования использовалось значение 0,025, обусловленное преимущественным покрытием дна Азовского моря илстыми отложениями), $\xi = H + \eta$ — глубина акватории, H — глубина до невозмущённой поверхности, η — высота свободной поверхности относительно геоида (уровня моря).

Турбулентность рассчитывается непосредственно из уравнений Навье–Стокса и находится естественным путём при численном моделировании, если вертикальное разрешение сетки позволяет воспроизвести все механизмы до масштабов вязкой диссипации очень мелких вихрей. Таким образом, на больших вертикальных масштабах сеток при численном моделировании подавляются механизмы вертикального турбулентного обмена, что означает необходимость выбора достаточно малого шага в вертикальном направлении. Идея Д. Смагоринского состоит в добавлении турбулентной вязкости к молекулярной. Турбулентная вязкость, в свою очередь, определяется через длину смещения, которая соответствует размеру малых вихрей.

В результате вычислительных экспериментов изучены основные характеристики, которые описывают свойства турбулентности, проанализировано распределение вертикальных слоев в столбе жидкости с различным турбулентным обменом. Натурные данные получены в акватории Азовского моря в ходе экспедиций на научно-исследовательском судне «Денеб». Использовалась информация о распределении трёхмерного вектора мгновенной скорости водного потока, установленная при помощи зонда-профилографа ADCP WHS 600 WHS 600 Sentinel.

Турбулентная вязкость μ_h , μ_v вычисляется через среднее значение скорости диссипации энергии турбулентности ε , приходящейся на единицу объёма: $\mu \sim \varepsilon^{1/3} \Delta^{4/3}$, где Δ — характерный масштаб сетки. Скорость диссипации $\bar{\varepsilon}$ может быть выражена через среднюю скорость деформации ячеечного масштаба: $\bar{\varepsilon} = 2 \bar{s}_{ij} \cdot \bar{s}_{ij}$, где \bar{s}_{ij} — осреднённый тензор скоростей деформации, $\bar{\varepsilon} \sim \varepsilon^{2/3} \Delta^{4/3}$. Выражение для турбулентной вязкости имеет вид: $\mu = C_s^2 \Delta^2 \bar{\varepsilon}^{-1/2}$, где C_s — безразмерная эмпирическая константа, значение которой определяется из расчёта процесса затухания однородной изотропной турбулентности. Выбранное значение постоянной C_s должно обеспечивать соответствие экспериментальным измерениям.

Для восстановления функции рельефа дна акватории на основе имеющейся гидрографической информации (глубины водоёма в отдельных точках или изолиний уровня, обладающих достаточной степенью гладкости в точках задания значений глубин) использовано решение уравнения Лапласа, применяемого для получения схем повышенного порядка точности:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) H - \frac{h_g^2}{12} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 H = 0,$$

где h_g — характерное расстояние между задаваемыми значениями глубины H . В результате получена карта рельефа дна Азовского моря (Рис. 1).

Функция возвышения уровня η зависит от давления водного столба, и для её расчёта можно воспользоваться условием: $P = P_a$, где P_a — атмосферное давление на поверхности водоёма. Разрабатываемая модель не учитывает изменение атмосферного давления, и функция возвышения уровня η находится из условия: $P = 0$.

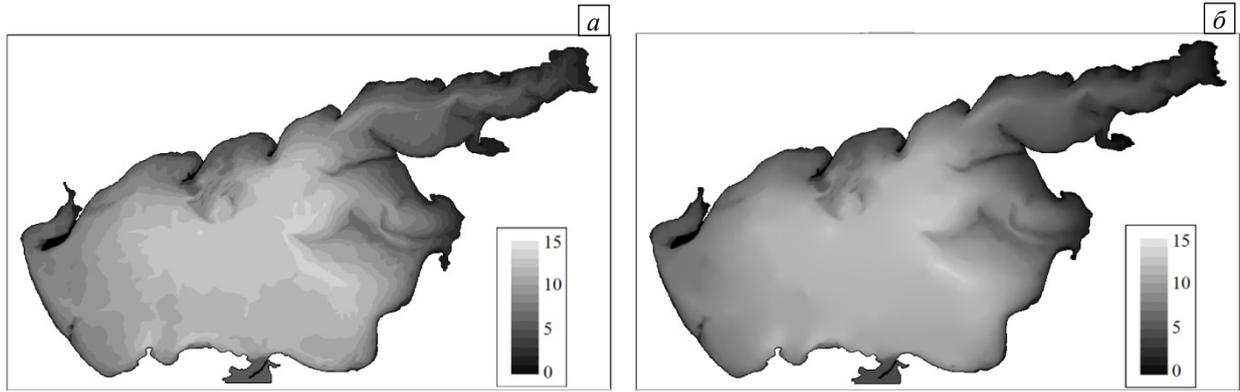


Рис. 1. Исходное изображение рельефа (а) и восстановленная поверхность (б) дна Азовского моря

3. Аппроксимация трёхмерной задачи гидродинамики

Согласно определению поправки к давлению, исходная модель гидродинамики делится на три подзадачи [17]. Подзадача 1 имеет в основе уравнение диффузии–конвекции, при помощи которого вычисляются компоненты поля скорости водного потока на промежуточном временном слое. Подзадача 2, базирующаяся на уравнении Пуассона, решается с целью нахождения распределения давления в узлах расчётной сетки. Подзадача 3 заключается в отыскании скоростей водного потока на следующем временном слое по явным формулам.

При решении трёхмерных задач диффузии–конвекции для областей, которые по своей протяжённости вдоль одного из пространственных направлений существенно меньше, чем по остальным двум (пример — мелководные водоёмы), используется приём последовательного разбиения на двумерную задачу по горизонтали и одномерную задачу по вертикали. При решении двумерной задачи применяется явная схема, одномерной — схема с весами. Разработанная гибридная разностная схема обладает некоторыми положительными свойствами явной схемы: для её реализации не требуется большой объём вычислений при переходах между временными слоями ($21N$ и $16N$ операций для предложенной и явной схем, соответственно, где N — число узлов расчётной сетки [18, 19]); системы с распределённой памятью не нуждаются в большом количестве обменов данными, поскольку последние выполняются между соседними потоками при геометрической декомпозиции трёхмерной сеточной области на последовательность расположенных по пространственной координате z горизонтальных плоскостей. Применение предложенной гибридной схемы позволяет отойти от основного недостатка явной схемы — жёсткого ограничения на размер временного шага. Заданная погрешность достигается при временных шагах, в 10–30 раз превосходящих шаг явной схемы.

Рассмотрим аппроксимацию трёхмерного уравнения диффузии–конвекции

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} + w \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + f. \quad (5)$$

Пусть расчётная область \bar{G} вписана в параллелепипед, на который накладывается равномерная сетка:

$$\bar{w}_h = \{t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z; n = \overline{0, N_t}, i = \overline{0, N_x - 1}, j = \overline{0, N_y - 1}, k = \overline{0, N_z - 1}; N_t\tau = T, N_x h_x = l_x, N_y h_y = l_y, N_z h_z = l_z\},$$

где τ — временной шаг, h_x, h_y, h_z — пространственные шаги, N_t — количество временных слоев, T — верхняя граница по времени, N_x, N_y, N_z — количество пространственных узлов, l_x, l_y, l_z — пространственные границы.

При решении уравнения (5) на больших временных отрезках и с относительно небольшими трудозатратами на переход между временными слоями воспользуемся приёмом расщепления на двумерную и одномерную задачи:

$$\frac{\varphi^{n+1/2} - \varphi^n}{\tau} + u \frac{\partial \varphi^n}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi^n}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi^n}{\partial y} \right) + f^n, \quad (6)$$

$$\frac{\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1/2}}{\tau} + w \frac{\partial \varphi^{n+(1/2)}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi^{n+(1/2)}}{\partial z} \right). \quad (7)$$

Здесь $\varphi^{n+(\sigma+1)/2} = \sigma\varphi^{n+1} + (1-\sigma)\varphi^{n+1/2}$, где σ — вес схемы.

Для увеличения точности моделирования донной поверхности водоёма использованы модификации разностных схем, позволяющие учитывать заполненность геометрических ячеек [18]. Ячейки представляются в виде параллелепипедов. Они могут быть заполненными, частично заполненными или пустыми. Узлы разнесены от центров ячеек на расстояния $h_x/2$, $h_y/2$ и $h_z/2$ по координатам x , y и z соответственно. Обозначим через $o_{i,j,k}$ заполненность ячейки с центром (i, j, k) . В окрестности узла (i, j, k) лежат узлы $(i+1, j, k)$, $(i, j+1, k)$, $(i+1, j+1, k)$, $(i, j, k+1)$, $(i+1, j, k+1)$, $(i, j+1, k+1)$, $(i+1, j+1, k+1)$. Вводятся коэффициенты $q_0, q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6$, описывающие заполненность контрольных областей, находящихся в окрестности ячейки. Так, значение q_0 характеризует заполненность области D_0 : $x \in (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, $y \in (y_{j-1/2}, y_{j+1/2})$, $z \in (z_{k-1/2}, z_{k+1/2})$, $q_1 - D_1: D_0 \cap \{x \geq x_i\}$, $q_2 - D_2: D_0 \cap \{x \leq x_i\}$, $q_3 - D_3: D_0 \cap \{y \geq y_j\}$, $q_4 - D_4: D_0 \cap \{y \leq y_j\}$, $q_5 - D_5: D_0 \cap \{z \geq z_k\}$, $q_6 - D_6: D_0 \cap \{z \leq z_k\}$. Заполненные части областей D_m будем называть Ω_m , где $m = \overline{0, \dots, 6}$. В соответствии с этим коэффициенты q_m можно вычислить по формулам:

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

Степень заполненности ячейки задается давлением водного столба на её дно. В общем случае степень заполненности ячеек рассчитывается исходя из выражения:

$$o_{i,j,k} = \frac{P_{i,j,k} + P_{i-1,j,k} + P_{i,j-1,k} + P_{i-1,j-1,k}}{4\rho gh_z}.$$

Дискретный аналог уравнения диффузии–конвекции–реакции с граничными условиями третьего рода ($\varphi'_n = \alpha_n \varphi + \beta_n$) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} (q_0)_{i,j,k} \frac{\varphi_{i,j,k}^{n+1} - \varphi_{i,j,k}^n}{\tau} &+ (q_1)_{i,j,k} u_{i+1/2,j,k} \frac{\varphi_{i+1,j,k}^n - \varphi_{i,j,k}^n}{2h_x} + (q_2)_{i,j,k} u_{i-1/2,j,k} \frac{\varphi_{i,j,k}^n - \varphi_{i-1,j,k}^n}{2h_x} + \\ &+ (q_3)_{i,j,k} v_{i,j+1/2,k} \frac{\varphi_{i,j+1,k}^n - \varphi_{i,j,k}^n}{2h_y} + (q_4)_{i,j,k} v_{i,j-1/2,k} \frac{\varphi_{i,j,k}^n - \varphi_{i,j-1,k}^n}{2h_y} + (q_5)_{i,j,k} w_{i,j+1/2,k} \frac{\varphi_{i,j+1,k}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j,k}^{n+\sigma}}{2h_z} + \\ &+ (q_6)_{i,j,k} w_{i,j-1/2,k} \frac{\varphi_{i,j,k}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j-1,k}^{n+\sigma}}{2h_z} = (q_1)_{i,j,k} \mu_{i+1/2,j,k} \frac{\varphi_{i+1,j,k}^n - \varphi_{i,j,k}^n}{h_x^2} - (q_2)_{i,j,k} \mu_{i-1/2,j,k} \frac{\varphi_{i,j,k}^n - \varphi_{i-1,j,k}^n}{h_x^2} - \\ &- \left[(q_1)_{i,j,k} - (q_2)_{i,j,k} \right] \mu_{i,j,k} \frac{\alpha_x \varphi_{i,j,k}^n + \beta_x}{h_x} + (q_3)_{i,j,k} \mu_{i,j+1/2,k} \frac{\varphi_{i,j+1,k}^n - \varphi_{i,j,k}^n}{h_y^2} - (q_4)_{i,j,k} \mu_{i,j-1/2,k} \frac{\varphi_{i,j,k}^n - \varphi_{i,j-1,k}^n}{h_y^2} - \\ &- \left[(q_3)_{i,j,k} - (q_4)_{i,j,k} \right] \mu_{i,j,k} \frac{\alpha_y \varphi_{i,j,k}^n + \beta_y}{h_y} + (q_5)_{i,j,k} \mu_{i,j,k+1/2} \frac{\varphi_{i,j,k+1}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j,k}^{n+\sigma}}{h_z^2} - \\ &- (q_6)_{i,j,k} \mu_{i,j-1/2,k} \frac{\varphi_{i,j,k}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j,k-1}^{n+\sigma}}{h_z^2} - \left[(q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k} \right] \mu_{i,j,k} \frac{\alpha_z \varphi_{i,j,k}^{n+\sigma} + \beta_z}{h_z} + (q_0)_{i,j,k} f_{i,j,k}. \end{aligned}$$

Таким образом, получены дискретные аналоги операторов конвективного и диффузионного переноса при учёте частичной заполненности ячеек. Дискретные аналоги операторов конвективного $u(\partial\varphi/\partial x)$ и диффузионного переноса $\partial(\mu(\partial\varphi/\partial x))/\partial x$ при частичной заполненности ячеек выглядят так:

$$q_0 u \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{x=x_i} \approx (q_1)_i u_{i+1/2} \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{2h_x} + (q_2)_i u_{i-1/2} \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{2h_x},$$

$$q_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_i} \approx (q_1)_i \mu_{i+1/2} \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{h_x^2} - (q_2)_i \mu_{i-1/2} \frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{h_x^2} - \left| (q_1)_i - (q_2)_i \right| \mu_i \frac{\alpha_x \varphi_i + \beta_x}{h_x}.$$

Погрешность аппроксимации с помощью такой схемы принимает значение $O(\tau + h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)$ для внутренних узлов сетки и $O(\tau + h_x + h_y + h_z)$ для граничных узлов. Достаточное условие устойчивости схемы в методе поправки к давлению определяется на основе принципа максимума при ограничениях на шаг по пространству: $h_x < |2\mu/u|$, $h_y < |2\mu/v|$, $h_z < |2\nu/w|$ или число Рейнольдса: $Re \leq 2N$, где $Re = ul/\mu$, при этом u — скорость движения водной среды, l — характерный размер области, μ, ν — коэффициенты турбулентного обмена по горизонтальным и вертикальному пространственным направлениям соответственно.

Дискретный аналог уравнения для расчета давления принимает вид:

$$\begin{aligned} & (q_0)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - 2P_{i,j,k}^n + P_{i,j,k}^{n-1}}{(\tau c)^2} - (q_1)_{i,j,k} \frac{P_{i+1,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{h_x^2} + (q_2)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i-1,j,k}^{n+1}}{h_x^2} - (q_3)_{i,j,k} \frac{P_{i,j+1,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{h_y^2} + \\ & + (q_4)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j-1,k}^{n+1}}{h_y^2} - (q_5)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k+1}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{h_z^2} + (q_6)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k-1}^{n+1}}{h_z^2} + \\ & + \left((q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k} \right) \theta \left((q_5)_{i,j,k} - (q_6)_{i,j,k} \right) \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^n}{\tau^2 h_z g} = - (q_0)_{i,j,k} \frac{\rho_{i,j,k}^{n+1} - \rho_{i,j,k}^n}{\tau^2} + \\ & + \frac{(q_1)_{i,j,k} (\rho^{n+1} \tilde{u})_{i+1/2,j,k} - (q_2)_{i,j,k} (\rho^{n+1} \tilde{u})_{i-1/2,j,k}}{\tau h_x} + \frac{(q_3)_{i,j,k} (\rho^{n+1} \tilde{v})_{i,j+1/2,k} - (q_4)_{i,j,k} (\rho^{n+1} \tilde{v})_{i,j-1/2,k}}{\tau h_y} + \\ & + \frac{(q_5)_{i,j,k} (\rho^{n+1} \tilde{w})_{i,j,k+1/2} - (q_6)_{i,j,k} (\rho^{n+1} \tilde{w})_{i,j,k-1/2}}{\tau h_z} + \left(\frac{(q_2)_{i,j,k} - (q_1)_{i,j,k}}{\tau h_x} (\rho^{n+1} \tilde{u})_{i,j,k} + \frac{(q_4)_{i,j,k} - (q_3)_{i,j,k}}{\tau h_y} (\rho^{n+1} \tilde{v})_{i,j,k} \right) m_{i,j,k}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}$ — функция Хэвисайда, $(\rho^{n+1} \tilde{u})_{i+1/2,j,k} = (\rho_{i+1,j,k}^{n+1} \tilde{u}_{i+1,j,k} + \rho_{i,j,k}^{n+1} \tilde{u}_{i,j,k})/2$, $m_{i,j,k}$ — маска граничного условия. Если узел (i, j, k) принадлежит боковой или верхней границе, то $m_{i,j,k} = 0$, в противном случае (на входе или на выходе) $m_{i,j,k} = 1$.

Дискретный аналог системы уравнений для уточнения поля скорости по давлению имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} (q_0)_{i,j,k} \frac{u_{i,j,k}^{n+1} - \tilde{u}_{i,j,k}}{\tau} &= - \left((q_1)_{i,j,k} \frac{P_{i+1,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{2h_x \rho_{i,j,k}^{n+1}} + (q_2)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i-1,j,k}^{n+1}}{2h_x \rho_{i,j,k}^{n+1}} \right), \\ (q_0)_{i,j,k} \frac{v_{i,j,k}^{n+1} - \tilde{v}_{i,j,k}}{\tau} &= - \left((q_3)_{i,j,k} \frac{P_{i,j+1,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{2h_y \rho_{i,j,k}^{n+1}} + (q_4)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j-1,k}^{n+1}}{2h_y \rho_{i,j,k}^{n+1}} \right), \\ (q_0)_{i,j,k} \frac{w_{i,j,k}^{n+1} - \tilde{w}_{i,j,k}}{\tau} &= - \left((q_5)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k+1}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{2h_z \rho_{i,j,k}^{n+1}} + (q_6)_{i,j,k} \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k-1}^{n+1}}{2h_z \rho_{i,j,k}^{n+1}} \right). \end{aligned}$$

4. Метод решения сеточных уравнений для областей, вытянутых вдоль горизонтальных направлений

Перепишем сеточное уравнение (8) в матричном виде:

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{f}, \quad (9)$$

где \mathbf{A} — линейный самосопряженный положительно определённый оператор ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^* > 0$). Представим его как

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_x + \mathbf{\Lambda}_y + \mathbf{\Lambda}_z, \quad (10)$$

где \mathbf{D} — диагональный оператор, $\Lambda_x = (1/h_x^2)\Lambda_{D,x} \otimes \mathbf{E}_y \otimes \mathbf{E}_z$, $\Lambda_y = (1/h_y^2)\mathbf{E}_x \otimes \Lambda_{D,y} \otimes \mathbf{E}_z$, $\Lambda_z = (1/h_z^2)\mathbf{E}_x \otimes \mathbf{E}_y \otimes \Lambda_{D,z}$. Здесь: \otimes — символ, обозначающий произведение Кронекера; $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z$ — единичные матрицы размерами $N_x \times N_x, N_y \times N_y, N_z \times N_z$ соответственно; Λ_D — квадратная трёхдиагональная матрица, содержащая коэффициенты сеточных уравнений для слагаемых в частных производных второго порядка, которые описываются конечными разностями по всем осям.

Оператор Λ_D в случае граничных условий 2-го и 3-го рода ($\delta \geq 0$) запишется в виде:

$$(\Lambda_D)_{i,j} = \begin{cases} 1 + \delta, & \text{если } (i+j=2) \cup (i+j=2N), \\ 2, & \text{если } (i=j) \cap (2 < i+j < 2N), \\ -1, & \text{если } |i-j|=1, \\ 0, & \text{если } |i-j| > 1, \end{cases} \quad \Lambda_D = \begin{pmatrix} 1+\delta & -1 & 0 & \dots \\ -1 & 2 & -1 & \dots \\ 0 & -1 & 2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Для нахождения решения задачи (9) используем неявный итерационный процесс:

$$\mathbf{B} \frac{x^{n+1} - x^n}{\tau_{n+1}} + \mathbf{A}x^n = f. \quad (12)$$

В уравнении (12) обозначено: n — номер итерации; $\tau_{n+1} > 0$ — итерационный параметр; \mathbf{B} — оператор-предобуславливатель, обращение которого в (12) существенно проще, чем непосредственное обращение исходного оператора \mathbf{A} в (9).

В случае стационарного итерационного процесса уравнение (12) можно представить по-другому:

$$x^{n+1} = x^n - \tau \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{A}x^n - f). \quad (13)$$

При этом решение x^n будет отличаться от точного решения x на величину погрешности z^n : $x^n = x + z^n$. Тогда уравнение (13) относительно погрешности переписывается следующим образом ($\tau_{n+1} = \tau$):

$$z^{n+1} = z^n - \tau \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \cdot z^n.$$

Сделаем замену переменных: $z^n = \mathbf{B}^{-1/2} y^n$, и умножим обе части последнего выражения на $\mathbf{B}^{1/2}$:

$$y^{n+1} = y^n - \tau \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{B}^{-1/2} \cdot y^n.$$

Снова произведем замену: $\mathbf{C} = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{B}^{-1/2}$, $\mathbf{C} = \mathbf{C}^* > 0$. В результате приходим к уравнению:

$$y^{n+1} = (\mathbf{E} - \tau \mathbf{C}) y^n. \quad (14)$$

Согласно [10], итерационный процесс (14) сходится при выполнении условий:

$$-\rho \mathbf{E} \leq \mathbf{E} - \tau \mathbf{C} \leq \rho \mathbf{E}, \quad \rho < 1, \quad (15)$$

где ρ — параметр, описывающий скорость сходимости итерационного метода.

Неравенство (15) можно записать следующим образом:

$$\frac{1-\rho}{\tau} \mathbf{E} \leq \mathbf{C} \leq \frac{1+\rho}{\tau} \mathbf{E}.$$

Параметры ρ и τ находятся из условий $(1-\rho)/\tau = \lambda_{\min}$, $(1+\rho)/\tau = \lambda_{\max}$, следовательно:

$$\tau = \frac{2}{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}}, \quad \rho = \frac{\text{cond}(\mathbf{C}) - 1}{\text{cond}(\mathbf{C}) + 1}, \quad \text{cond}(\mathbf{C}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}. \quad (16)$$

Здесь λ_{\min} , λ_{\max} — минимальное и максимальное значения собственных чисел оператора \mathbf{C} , $\text{cond}(\mathbf{C})$ — число обусловленности оператора \mathbf{C} .

Оператор преобуславливания представляется формулой:

$$\mathbf{B} = \mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_z. \quad (17)$$

С учетом введенной выше замены $\mathbf{C} = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{B}^{-1/2}$, $\mathbf{B}^{-1/2} x = y$ можно оценить максимальное собственное число:

$$\lambda_{\max}(\mathbf{C}) = \max_{|x|>0} \frac{(\mathbf{C}x, x)}{(x, x)} = \max_{|y|>0} \frac{(\mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{A} y, \mathbf{B}^{1/2} y)}{(\mathbf{B}^{1/2} y, \mathbf{B}^{1/2} y)} = \max_{|y|>0} \frac{(\mathbf{A} y, y)}{(\mathbf{B} y, y)}.$$

С учётом выражений (16), (17) оценка максимального собственного числа будет иметь вид:

$$\lambda_{\max}(\mathbf{C}) = \max_{|y|>0} \frac{((\mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_x + \mathbf{\Lambda}_y + \mathbf{\Lambda}_z) y, y)}{((\mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_z) y, y)} = 1 + \max_{|y|>0} \left(\frac{((\mathbf{\Lambda}_x + \mathbf{\Lambda}_y) y, y)}{((\mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_z) y, y)} \right) \leq 1 + \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{\Lambda}_x + \mathbf{\Lambda}_y)}{\lambda_{\min}(\mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_z)}. \quad (18)$$

Выполним оценку минимального собственного числа:

$$\lambda_{\min}(\mathbf{C}) = \min_{|y|>0} \frac{(\mathbf{A} y, y)}{(\mathbf{B} y, y)} = \min_{|y|>0} \frac{((\mathbf{\Lambda}_x + \mathbf{\Lambda}_y + \mathbf{\Lambda}_z) y, y)}{((\mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_z) y, y)} = 1 + \min_{|y|>0} \left(\frac{((\mathbf{\Lambda}_x + \mathbf{\Lambda}_y) y, y)}{((\mathbf{D} + \mathbf{\Lambda}_z) y, y)} \right) \geq 1. \quad (19)$$

Для реализации стационарных итерационных методов требуется априорная информация о значениях максимального и минимального собственных чисел операторов. В случае выбора преобуславливателя в виде (17) для расчётной области произвольной формы сложность представляет оценка минимального собственного числа $\mathbf{\Lambda}_z$.

5. Модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод

В конечномерном гильбертовом пространстве H рассматривается задача поиска решения операторного уравнения:

$$\mathbf{A}x = f, \quad \mathbf{A} : H \rightarrow H, \quad (20)$$

где \mathbf{A} — линейный, положительно определённый оператор ($\mathbf{A} > 0$). Для нахождения решения задачи (20) прибегнем к неявному итерационному процессу:

$$\mathbf{B} \frac{x^{m+1} - x^m}{\tau} + \mathbf{A}x^m = f, \quad \mathbf{B} : H \rightarrow H. \quad (21)$$

В уравнении (21) приняты обозначения: m — номер итерации, $\tau > 0$ — итерационный параметр, а \mathbf{B} — некоторый обратимый оператор. Обращение оператора \mathbf{B} в (21) должно быть существенно проще, чем непосредственное обращение исходного оператора \mathbf{A} в (20). При построении \mathbf{B} будем исходить из аддитивного представления оператора \mathbf{A}_0 — симметричной части оператора \mathbf{A} .

$$\mathbf{A}_0 = \mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2, \quad \mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_2^*, \quad (22)$$

где $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ — ниже- и верхнетреугольные операторы. Также здесь и далее используем кососимметричную часть оператора \mathbf{A} : $\mathbf{A}_1 = (\mathbf{A} - \mathbf{A}^*)/2$.

В силу (22) $(\mathbf{A}y, y) = (\mathbf{A}_0y, y) = 2(\mathbf{R}_1y, y) = 2(\mathbf{R}_2y, y)$. Поэтому в (3) $\mathbf{R}_1 > 0$, $\mathbf{R}_2 > 0$. Пусть в (21)

$$\mathbf{B} = (\mathbf{D} + \omega \mathbf{R}_1) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \omega \mathbf{R}_2), \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}^* > 0, \quad \omega > 0, \quad y \in H, \quad (23)$$

где \mathbf{D} — некоторый оператор (например, диагональная часть оператора \mathbf{A}).

Поскольку $\mathbf{A}_0 = \mathbf{A}_0^* > 0$, то вместе с (22) это дает $\mathbf{B} = \mathbf{B}^* > 0$. Соотношения (21)–(23) задают модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) решения задачи (20) при условии, что определены операторы $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ и указаны способы нахождения параметров τ, ω и оператора \mathbf{D} .

Алгоритм расчёта сеточных уравнений посредством МПТМ можно записать в вариационном виде:

$$\begin{aligned} r^m &= \mathbf{A}x^m - f, \quad \mathbf{B}(\omega_m)w^m = r^m, \quad \tilde{\omega}_m = \sqrt{\frac{(\mathbf{D}w^m, w^m)}{(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{R}_2w^m, \mathbf{R}_2w^m)}}, \\ s_m^2 &= 1 - \frac{(\mathbf{A}_0w^m, w^m)^2}{(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}_0w^m, \mathbf{A}_0w^m)(\mathbf{B}w^m, w^m)}, \quad k_m^2 = \frac{(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}_1w^m, \mathbf{A}_1w^m)}{(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}_0w^m, \mathbf{A}_0w^m)}, \\ \theta_m &= \frac{1 - \sqrt{s_m^2 k_m^2 / (1 + k_m^2)}}{1 + k_m^2 (1 - s_m^2)}, \quad \tau_{m+1} = \theta_m \frac{(\mathbf{A}_0w^m, w^m)}{(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}_0w^m, \mathbf{A}_0w^m)}, \quad x^{m+1} = x^m - \tau_{m+1}w^m, \quad \omega_{m+1} = \tilde{\omega}_m, \end{aligned} \quad (24)$$

где r^m — вектор невязки, w^m — вектор поправки, s_m — параметр, описывающий скорость сходимости метода, k_m — отношение нормы кососимметричной части оператора к норме симметричной части.

Скорость сходимости метода оценивается по формуле:

$$\rho \leq (v^* - 1) / (v^* + 1), \quad (25)$$

где $v^* = \text{cond}(\mathbf{C}_0) \left(\sqrt{1 + k^2} + k \right)^2$, где $\text{cond}(\mathbf{C}_0)$ — число обусловленности матрицы \mathbf{C}_0 , $\mathbf{C}_0 = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{A}_0 \mathbf{B}^{-1/2}$.

Значение параметра ω является оптимальным, если $\omega = \sqrt{(\mathbf{D}w^m, w^m) / (\mathbf{D}^{-1}\mathbf{R}_2w^m, \mathbf{R}_2w^m)}$ и выполняется оценка числа обусловленности матрицы \mathbf{C}_0 :

$$\text{cond}(\mathbf{C}_0) = \max_{y \neq 0} \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{(\mathbf{D}y, y)(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{R}_2y, \mathbf{R}_2y)}}{(\mathbf{A}_0y, y)} \right) \leq \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{\Delta}{\delta}} \right) = \frac{1 + \sqrt{\xi}}{2\sqrt{\xi}},$$

где $\xi = (\delta/\Delta)$, $\mathbf{D} \leq (\mathbf{A}_0/\delta)$, $\mathbf{R}_1\mathbf{D}^{-1}\mathbf{R}_2 \leq (\Delta\mathbf{A}_0/4)$.

6. Программное обеспечение для расчёта трёхмерных полей вектора скорости движения водной среды

Одной из задач исследования являлась разработка экспериментального программного обеспечения, которое позволило бы моделировать с помощью вычислительной системы процессы, протекающие в водных экосистемах мелководных водоёмов, на примере Азовского моря.

Создана программа «Azov3d», предназначенная для исследования турбулентных потоков несжимаемого поля скоростей водной среды с помощью сеток высокой разрешающей способности. Блок-схема основного алгоритма программы «Azov3d» представлена на рисунке 2. Программа используется также для расчёта трёхмерного вектора скорости течения водной среды в акватории Азовского моря и учитывает такие физические параметры, как сила Кориолиса, турбулентный обмен, сложная геометрия дна и береговой линии, испарение, стоки рек, ветровые течения и донное трение.

Программное средство «Azov3d» содержит в своём составе:

1. Модуль управления, который представляет собой временной цикл, инициирующий вызовы функций для расчёта:

- поля скорости водного потока без учёта давления,
 - гидростатического давления,
 - гидродинамического давления,
 - трёхмерного поля скорости,
- а также вызовы функций ввода–вывода данных.

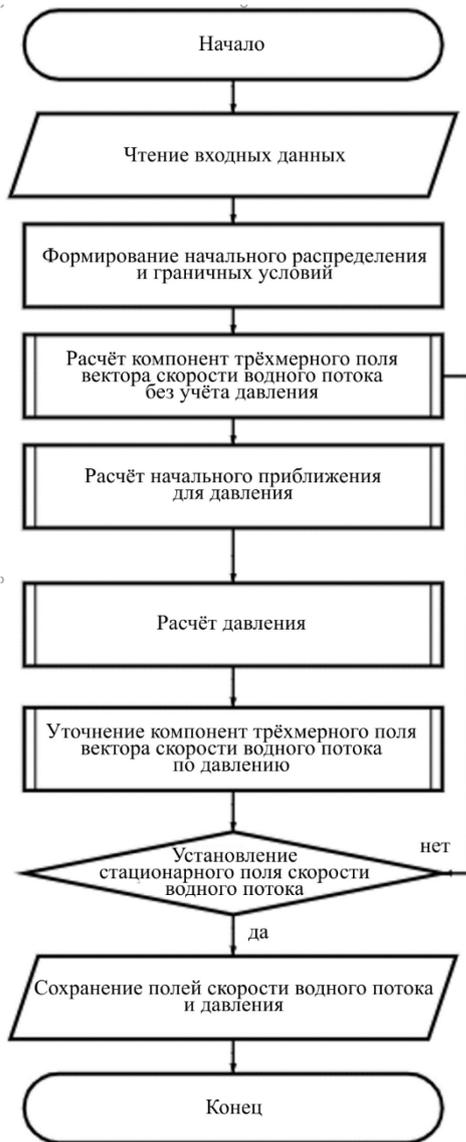


Рис. 2. Блок-схема алгоритма программы «Azov3d»

2. Модуль инициализации, осуществляющий задание входных данных для их дальнейшего использования при расчётах. Присваиваются значения таким параметрам, как – начальные распределения поля скорости водного потока и давления;

– координаты и значение водных потоков в устьях рек Дона, Кубани и в озере Сиваш в соответствии с данными водного баланса.

3. Модуль построения сеточных уравнений для поля скорости без учёта давления и согласно принятой конечно-разностной схеме. Модуль предназначен для последовательного расчёта и записи в массив коэффициентов соответствующего сеточного уравнения, представленного в канонической форме, а также его правой части.

4. Модуль построения сеточных уравнений для поля давления в гидростатическом приближении (значение поля гидростатического давления используется в качестве начального приближения при расчёте гидродинамического давления).

5. Модуль построения сеточных уравнений для поля гидродинамического давления.

6. Модуль расчёта поля скорости водного потока с учётом давления. Результатом работы данного модуля являются найденные значения поля трёхмерного вектора скоростей на следующем временном слое.

7. Модуль решения системы 7-диагональных сеточных уравнений адаптивным попеременно-треугольным методом скорейшего спуска.

8. Модуль решения системы 5-диагональных сеточных уравнений адаптивным попеременно-треугольным методом скорейшего спуска.

9. Модуль формирования отчёта, осуществляющий вывод в файлы на дисковое пространство полученных значений поля скоростей.

Применение программы «Azov3d» гарантирует расчёт следующих заявленных функций исследуемой системы:

- скорости водного потока без учёта давления;
- гидростатического давления;
- гидродинамического давления;
- трёхмерной скорости водного потока с учётом давления.

7. Декомпозиция расчётной области

За счёт того, что расчёты в области исследования могут производиться по двум пространственным направлениям, возможно использование параллельных вычислений, при этом эффективность применяемого алгоритма будет значительно выше. Область расчётов покрывается прямоугольниками числом p_1 и p_2 в двух направлениях соответственно [15, 16]. Такой способ удобен, так как позволяет снизить объёмы передаваемых данных. Так, при выполнении декомпозиции по одному направлению количество пересылок равно $2 \times p \times N_y \times N_z$, где p — число задействованных вычислителей. При декомпозиции по двум направлениям объём пересылок составляет $2 \times (p_1 \times N_y + p_2 \times N_x) \times N_z$, где N_x, N_y, N_z — количество узлов сетки по осям Ox , Oy и Oz соответственно.

8. Параллельный алгоритм решения трёхмерных сеточных задач посредством МПТМ

Опишем параллельный алгоритм расчёта посредством МПТМ — АЛГОРИТМ 1.

1. Вводятся значения p (количество процессоров) и m (порядковый номер текущего процессора в группе с одинаковой тактовой частотой).
2. Устанавливаются значения p_1 и p_2 — количество процессоров, требующихся для расчетов по направлениям Ox и Oy .

3. Вычисляются порядковые номера процессоров по двум направлениям (Ох и Оу) m_1 и m_2 соответственно: $m_1 = m \bmod p_1$, $m_1 = \lfloor m/p_1 \rfloor$.
4. Определяются N_{11} , N_{22} — порядковые номера стартовых элементов сетки, N_1 , N_2 — геометрия (число узлов сетки) фрагмента расчетной области по осям Ох и Оу: $N_{11} = \lfloor m_1(N_x - 2)/p_1 \rfloor$, $N_1 = \lfloor (m_1 + 1)(N_x - 2)/p_1 \rfloor - N_{11} + 2$, $N_{22} = \lfloor m_2(N_y - 2)/p_2 \rfloor$, $N_2 = \lfloor (m_2 + 1)(N_y - 2)/p_2 \rfloor - N_{22} + 2$.
5. Выполняется обнуление вспомогательных (для хранения промежуточной информации) массивов.
6. Начинается цикл по итерациям m .
7. Рассчитывается вектор невязки (при помощи технологии OpenMP) из уравнения: $r^m = Ax^m - f$.
8. Решается система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с нижнетреугольной матрицей.
 - 8.1. Принимаются данные от вычислителей с меньшими значениями индексов:
 - при $m_1 > 0$ считываются данные от процессора $p - 1$ только по индексу $i = 0$;
 - при $m_2 > 0$ считываются данные от процессора $p - p_1$ только по индексу $j = 0$.

П р и м е ч а н и е. На рисунке 3а приведена схема расчетов, выполненных на основе технологии MPI. Каждый вычислитель в фиксированный момент времени рассчитывает лишь один слой, который на рисунке заштрихован. После того как расчёт произведён, начинается процесс приёма–передачи данных между соседними вычислителями. Стрелки на рисунке показывают направления передачи между процессорами. На рисунке 3б стрелкой 1 изображено направление передачи элементов от соседних вычислителей. Стрелка 2 обозначает направление счёта в текущем процессоре. Стрелка 3 — это направление передачи рассчитанных параметров соседним вычислителям.

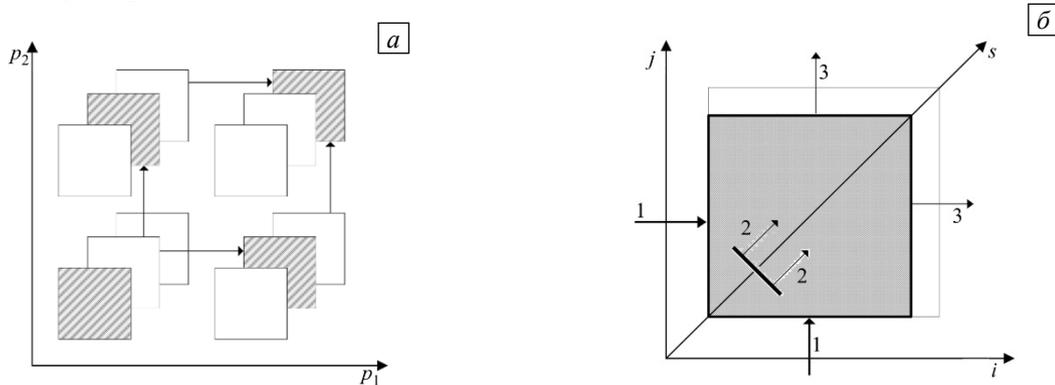


Рис. 3. Схема обмена данными между вычислителями при решении СЛАУ с нижнетреугольной матрицей (а) и обработка слоя данных на одном вычислителе (б)

- 8.2. Определяется вектор y^m из уравнения: $(D + \omega R_1)y^m = r^m$.
- 8.3. Производится передача данных вычислителям с большими значениями номеров:
 - при $m_1 < p_1 - 1$, отправляются данные (с записью только по индексу $i = N_1 - 2$) процессору $p + 1$;
 - при $m_2 < p_2 - 1$, отправляются данные (с записью только по индексу $j = N_2 - 2$) процессору $p + p_1$.
9. Решается СЛАУ с верхнетреугольной матрицей.
 - 9.1. Принимаются данные от вычислителей с большими значениями индексов:
 - при $m_1 < p_1 - 1$ считываются данные от процессора $p - 1$ только по индексу $i = N_1 - 1$;
 - при $m_2 < p_2 - 1$, считываются данные от процессора $p + p_1$ только по индексу $j = N_2 - 1$.
 - 9.2. Рассчитывается вектор поправки (при помощи технологии OpenMP).
 - 9.3. Производится передача данных процессорам с меньшими значениями номеров:
 - при $m_1 > 0$ отправляются данные (с записью только по индексу $i = 1$ процессору $p - 1$);
 - при $m_2 > 0$ отправляются данные (с записью только по индексу $j = 1$) процессору $p - p_1$.
10. Вычисляются итерационные параметры τ и ω (при помощи технологии OpenMP) и происходит переход к следующему пункту. Если норма вектора невязки меньше заданной погрешности, то цикл по итерациям заканчивается, иначе происходит возврат в пункт 6.
11. Рассчитываются значения вектора невязки для следующей итерации.
12. Формируется и отображается отчёт о проделанной работе; результаты сохраняются в файл.

Для программной реализации параллельных алгоритмов используется технология MPI (Message Passing Interface) с программным интерфейсом передачи информации API (Application Programmer Interface), который позволяет обмениваться сообщениями между процессами, выполняющими одну задачу, и OpenMP — библиотекой для параллельного программирования на вычислительных системах с общей памятью. При этом обмен данными между узлами вычислительного кластера осуществляется с помощью

технологии MPI, а процесс параллельных вычислений внутри каждого отдельного узла кластера — с помощью OpenMP, что в некоторых случаях позволяет более рационально задействовать вычислительные ресурсы.

В таблице 1 приведены результаты сравнения работы параллельного алгоритма, построенного на основе гибридной технологии MPI+OpenMP, с тем, который для распараллеливания использует только технологию MPI (при расчёте посредством МПТМ). Численные эксперименты проводились на вычислительном кластере К-100 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, имеющем 768 процессорных ядер CPU Intel Xeon X5670 (по 12 на каждом узле) и 6144 Гбайт оперативной памяти (по 96 Гб на каждом узле).

Таблица 1. Результаты при распараллеливании с использованием технологий MPI и MPI+OpenMP (при расчёте МПТМ)

p	p_1	p_2	MPI		MPI+OpenMP	
			Время, с	Ускорение	Время, с	Ускорение
1	1	1	38,16	1,00	4,78487	7,98
2	2	1	19,6903	1,94	2,11663	18,03
3	3	1	13,5332	2,82	1,38468	27,56
4	2	2	10,001	3,82	1,34331	28,41
	4	1	10,2104	3,74	1,06213	35,93
8	4	2	5,2185	7,31	0,709067	53,82
	8	1	5,36947	7,11	0,674545	56,57
16	4	4	2,98691	12,78	0,696349	54,80
	8	2	3,00383	12,70	0,582296	65,53
	16	1	3,16188	12,07	0,574304	66,45
20	5	4	2,499	15,27	0,690245	55,28
	10	2	2,5475	14,98	0,650041	58,70
	20	1	2,68232	14,23	0,643656	59,29
24	6	4	2,24099	17,03	0,637363	59,87
	8	3	2,24239	17,02	0,613483	62,20
	12	2	2,24567	16,99	0,610038	62,55
	24	1	2,50914	15,21	0,589613	64,72

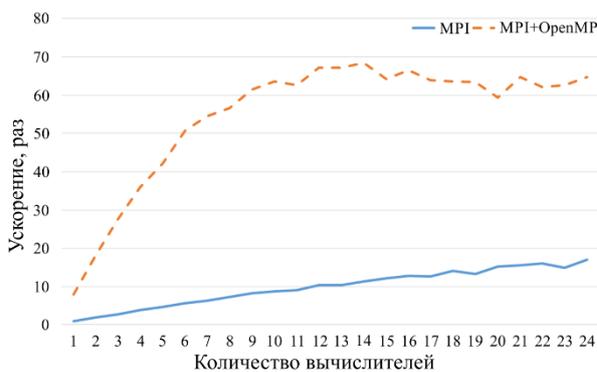


Рис. 4. Зависимость ускорения параллельных алгоритмов от числа вычислителей (МПТМ) для двух технологий

Сравнение алгоритмов приведено для различного числа процессоров при варьируемой декомпозиции расчётной области. На рисунке 4 демонстрируются графики ускорения параллельных алгоритмов на основе технологии MPI и гибридной технологии MPI+OpenMP в зависимости от числа задействованных вычислителей.

В проведённых экспериментах максимальное число использованных вычислителей составило 24, сетка содержала $1000 \times 1000 \times 60$ узлов.

9. Алгоритм распараллеливания решения сеточных задач на основе разбиения трёхмерной модели на двумерную и одномерную

Приведём последовательность распараллеливания решения трёхмерной задачи путём разделения на двумерную и одномерную — АЛГОРИТМ 2.

1. Вводятся значения p (количество процессоров) и m (порядковый номер текущего процессора в группе с одинаковой тактовой частотой).
2. Устанавливаются значения p_1 и p_2 — количество процессоров, требующихся для расчётов по направлениям Ox и Oy .

3. Вычисляются порядковые номера процессоров по двум направлениям (Ох и Оу) m_1 и m_2 соответственно: $m_1 = m \bmod p_1$, $m_1 = \lfloor m/p_1 \rfloor$.
4. Определяются N_{11} , N_{22} — порядковые номера стартовых элементов сетки, N_1 , N_2 — геометрия (число узлов сетки) фрагмента расчетной области по осям Ох и Оу: $N_{11} = \lfloor m_1(N_x - 2)/p_1 \rfloor$, $N_1 = \lfloor (m_1 + 1)(N_x - 2)/p_1 \rfloor - N_{11} + 2$, $N_{22} = \lfloor m_2(N_y - 2)/p_2 \rfloor$, $N_2 = \lfloor (m_2 + 1)(N_y - 2)/p_2 \rfloor - N_{22} + 2$.
5. Элементам вспомогательных (для хранения промежуточной информации) массивов присваиваются нулевые значения.
6. Расчётная область разбивается на элементы.
7. Производится поэлементное вычисление массива координат сеточных узлов.
8. Запускается временной цикл.
9. С использованием модификации схемы «кабаре» решается двумерная задача (по технологии OpenMP).
10. Методом прогонки решается одномерная задача (по технологии OpenMP).
11. Производится обмен данными по оси Ох.
 - 11.1. Отправляются/получаются данные в направлении понижения индекса процессора:
 - при $m_1 > 0$, отправляются данные (с записью только по индексу $i = 1$) процессору $p - 1$;
 - при $m_1 < p_1 - 1$ получаются данные (чтение только по индексу $i = N_1 - 1$) от процессора $p + 1$.
 - 11.2. Отправляются/получаются данные в направлении повышения индекса процессора:
 - при $m_1 < p_1 - 1$ отправляются данные (с записью только по индексу $i = N_1 - 2$) процессору $p + 1$;
 - при $m_1 > 0$ получаются данные (чтение только по индексу $i = 0$) от процессора $p - 1$.
12. Вычисляется объём пересылаемых данных по формуле $(N_2 - 2)(N_x - 2)$.
13. Производится обмен данными по оси Оу.
 - 13.1. Отправляются/получаются данные в направлении понижения индекса процессора:
 - при $m_2 > 0$ отправляются данные (с записью только по индексу $j = 1$) процессору $p - p_1$;
 - при $m_2 < p_2 - 1$ получаются данные (чтение только по индексу $j = N_2 - 1$) от процессора $p + p_1$.
 - 13.2. Отправляются/получаются данные в направлении повышения индекса процессора:
 - при $m_2 < p_2 - 1$ отправляются данные (с записью только по индексу $j = N_2 - 2$) процессору $p + p_1$;
 - при $m_2 > 0$ получаются данные (чтение только по индексу $j = 0$) от процессора $p - p_1$.
14. Вычисляется объём пересылаемых данных по формуле $(N_1 - 2)(N_y - 2)$.
15. Завершается временной цикл.
16. Формируется и отображается отчёт о проделанной работе; результаты сохраняются в файл.
В таблице 2 для сравнения представлены результаты при распараллеливании по двум технологиям.

Таблица 2. Результаты при распараллеливании с использованием технологий MPI и MPI+OpenMP

Количество процессоров	Количество процессоров по Ох	Количество процессоров по Оу	MPI		MPI+OpenMP	
			Время, с	Ускорение	Время, с	Ускорение
1	1	1	73,077	1,00	24,1868	3,02
2	2	1	43,6893	1,67	11,6729	6,26
3	3	1	24,5687	2,97	2,71909	26,88
4	2	2	15,1569	4,82	1,92719	37,92
	4	1	13,3333	5,48	1,91465	38,17
8	4	2	6,22311	11,74	1,56382	46,73
	8	1	6,24832	11,70	1,53041	47,75
16	4	4	3,0568	23,91	0,589407	123,98
	8	2	3,05297	23,94	0,752673	97,09
	16	1	3,42774	21,32	1,06295	68,75
24	6	4	2,5164	29,04	0,414936	176,12
	8	3	2,51238	29,09	0,736671	99,20
	12	2	1,54819	47,20	0,500002	146,15
	24	1	1,53307	47,67	0,457263	159,81

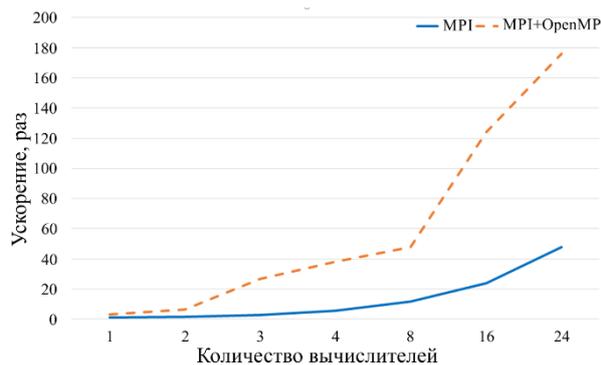


Рис. 5. Зависимость ускорения параллельных алгоритмов от числа вычислителей для двух технологий

Рисунок 5 демонстрирует графики ускорения счёта по параллельным алгоритмам в двух случаях: при использовании технологии MPI и гибридной технологии MPI+OpenMP.

Для моделирования была выбрана прямоугольная сетка с $1000 \times 1000 \times 60$ расчётными узлами; применялся приём последовательного разбиения на двумерную и одномерную задачи и их раздельного решения.

Гибридная технология MPI+OpenMP показывает лучший, по сравнению с технологией MPI, результат при распараллеливании решения трёхмерной задачи диффузии–конвекции. АЛГОРИТМ 2 на основе гибридной технологии MPI+OpenMP (также с разбиением исходной задачи на двумерную и одномерную и их

раздельном решении) при разделении объёма вычислительной работы между 24 процессорами (по 6 блоков вдоль оси Ox и по 4 блока вдоль оси Oy) даёт наибольшее ускорение в 176,12 раз.

10. Результаты численных экспериментов

Разработано тестовое программное обеспечение, которое позволяет строить математические модели гидрофизики и гидробиологии прибрежных зон мелководных водоёмов при возникновении в них природных и техногенных явлений. Программное средство написано на языке C++. Его экспериментальные запуски выполнены на вычислительном кластере К-100 при поддержке ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Область расчётов совпадала с реальной исследуемой акваторией, которая имеет размеры 355 км в длину и 233 км в ширину. Пространственный шаг по горизонтали равнялся 1000 м. Рассмотрен вычислительный период продолжительностью 30 суток. Скорость ветра задавалась в виде фиксированного значения 5 м/с, направление ветра было западным.

Трёхмерная расчетная сетка формировалась на основе спутниковых снимков, имеющих привязку к координатам GPS, и открытых данных о глубине Азовского моря. При этом по массиву данных отдельных известных значений глубин водоёма выполнялась операция восстановления донной поверхности в пространственной плоскости Oxy , позволившая однозначно сопоставить узлы расчётной сетки с GPS-координатами и значениями глубины.

Вычисления производились при учёте испарения водных масс ($606 \text{ м}^3/\text{с}$). В результате численного моделирования для каждого сеточного узла рассчитывались проекции векторов скоростей водного потока на пространственные координаты x , y , и z , а также значения возвышения уровня воды над геоидом. Начальные условия формировались исходя из данных о водном балансе, приведённых в таблице 3.

Таблица 3. Данные о водном балансе в Азовском море, применённые в качестве начальных условий

Водные источники в системе Азовского моря	Объём водных масс, $\text{м}^3/\text{с}$
Гирла Свиное, Кривое и Богдан	+82 (суммарно)
Песчаное	+199
Мериновое	+105
Мокрая Кутерьма	+185
Кутерьма	+424
Мертвый Донец и Средняя Кутерьма	+390 (суммарно)
Река Кубань	+928
Черное море	-1587
Озеро Сиваш	-115

В части входных данных модель дополнялась результатами экспедиционных исследований, проведённых в акватории Азовского моря на научно-исследовательском судне «Денеб» ЮИЦ РАН. Данные о пульсациях скоростей водного потока на его различных горизонтах, полученные с помощью акустического зонда ADCP, а также анализы батиметрических проб подвергались фильтрации с помощью программного модуля, построенного на основе двухэтапного алгоритма Калмана [17].

На рисунке *ба, в, д* представлено поле проекций векторов скоростей водного потока на плоскость Oxy , рассчитанное через 6, 12 и 24 часа от начала рассмотрения. Распределение скоростей водного потока представлено цветовой палитрой. В пределах мелководных зон водные потоки главным образом двигаются по направлению ветра. В пределах глубоководных зон потоки воды направлены против ветра, поскольку уровни воды в разных слоях водной толщи разнятся. При изучении полей течений в Азовском море использовалась интегральная характеристика $U = \int_{-\eta}^{\eta} u dz$. На рисунке 6 видно возникновение вихревых

структур в восточной части Азовского моря, которые ведут к формированию в данной области водоёма заморных явлений (гибель гидробионтов в результате значительного снижения концентрации растворенного в воде кислорода), что подтверждается экспериментальными данными. В период с июня по август в центрально-восточную часть Азовского моря поступает большое количество органических примесей из рек Дона и Кубани. Вихревые потоки осуществляют перенос большей части органических веществ, которые затем оседают на дно и создают благоприятную ситуацию для анаэробного заражения.

На рисунке *бб, г, е* визуализирована функция возвышения уровня в Азовском море через 6, 12 и 24 часа. Она имитирует сгонно-нагонные явления. Данные получены в ходе вычисления морских течений в рассматриваемой акватории в период полного штиля. При построении численной модели нагонных явлений воспроизведена ситуация, когда ветер дует в юго-восточном направлении и за 5 часов его скорость возрастает до 17 м/с. Расчеты выполнены на двух трёхмерных равномерных расчётных сетках, при этом шаги по горизонтальным направлениям были равными и составляли: у первой 1000 м, у второй 500 м. По вертикальному направлению в обоих случаях был установлен шаг в 0,1 м.

Проверка адекватности результатов моделирования выполнена путём сравнения с ранее полученными данными натурных исследований в районе порта города Таганрога в период с 23 по 25 сентября 2014 года во время штормового нагона (Табл. 4).

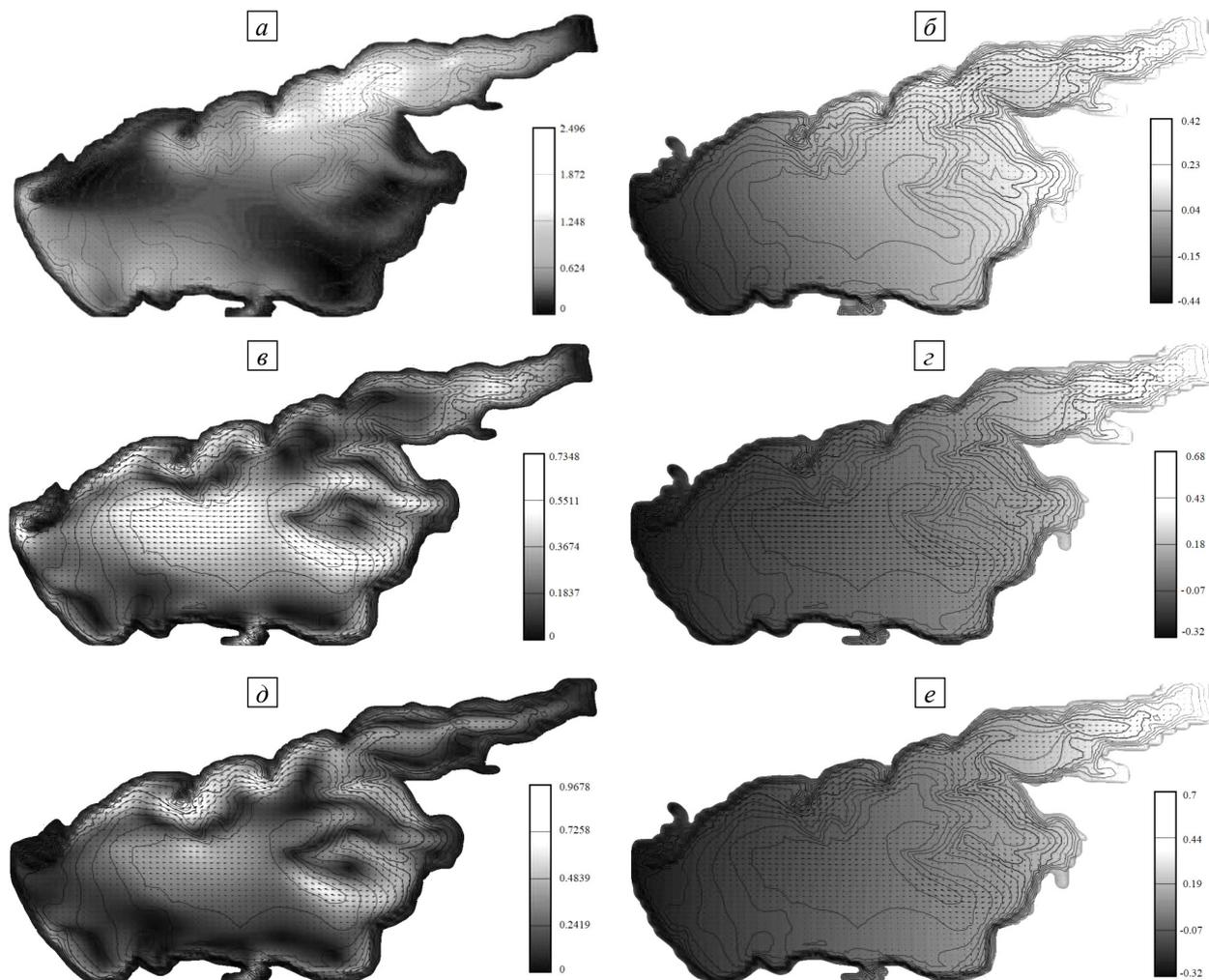


Рис. 6. Поле вектора скорости движения водной среды (*a*), (*в*), (*д*) и функция возвышения её уровня (*б*), (*г*), (*е*) через промежуток времени, [ч]: 6 (*a*), (*б*); 12 (*в*), (*г*); 24 (*д*), (*е*), после появления западного ветра интенсивностью 5 м/с (баротропные течения)

Таблица 4. Значения параметров во время штормового нагона в районе порта г. Таганрога 24–25 сентября 2014 года

Время суток	00:00 24.09	04:00 24.09	08:00 24.09	12:00 24.09	16:00 24.09	20:00 24.09	24:00 24.09	04:00 25.09
Направление ветра	юго-восток	юго-восток	юг	юго-юго-запад	юго-юго-запад	запад	юго-запад	юго-запад
Скорость ветра, м/с	17	18	27	33	37	33	28	22
Уровень воды (замер), см	12	24	66	160	380	420	390	320
Уровень воды (расчет), см	10	12	42	148	376	448	385	326

Результаты расчётов с использованием двух сеток с разной разрешающей способностью практически полностью повторяют друг друга и отличаются не более, чем на 5%. При этом отличие вычисляемого и наблюдаемого значений функции повышения уровня воды уменьшается на 15%.

Максимальное абсолютное отклонение уровня воды зафиксировано 24 сентября в 20 часов, и составляет 28 см (см. Табл. 4). В течение следующих 8 часов сначала имеет место запаздывание расчётных значений на величину, не превышающую 0,5 часа, а затем они опережают наблюдаемые значения приблизительно на 0,25 часа.

11. Заключение

Предложена модель расчёта трёхмерных полей вектора скорости движения водной среды, которая опирается на математический аппарат гидродинамики мелководных водоёмов. Помимо сложной формы береговой линии, силы Кориолиса, ветрового напряжения и трения о дно с нетривиальным рельефом, модель берёт в рассмотрение испарение и выпадение осадков, что отражается в записи как уравнения неразрывности, так и уравнений движения.

Исходная модель гидродинамики делится на три подзадачи: 1-я имеет в основе уравнение диффузии–конвекции, при помощи которого вычисляются компоненты поля скорости водного потока на промежуточном временном слое; подзадача 2 базируется на уравнении Пуассона (она решается с целью нахождения распределения давления в узлах расчётной сетки); 3-я состоит в отыскании скоростей водного потока на следующем временном слое по явным формулам.

Дискретные модели сохраняют устойчивость, в отличие от известных моделей, при перепадах глубин в 40–50 раз, что является важным для прибрежных систем. Приводится решение трёхмерной задачи гидродинамики для областей, которые по своей протяжённости вдоль одного из направлений существенно меньше, чем по остальным двум (мелководные водоёмы). Разработанная разностная схема обладает некоторыми свойствами явной схемы: для её реализации не требуется большой объём вычислений при переходах между временными слоями.

Моделирование донной поверхности водоёма проводится с использованием модификаций разностных схем, учитывающих заполненность геометрических ячеек. Для областей, вытянутых вдоль горизонтальных направлений, даётся описание метода решения системы сеточных уравнений — модифицированного попеременно-треугольного метода (МПТМ). Разработано программное обеспечение, позволяющее производить вычисление трёхмерных полей вектора скорости движения водной среды на суперкомпьютере, а также создан и описан параллельный алгоритм решения сеточных задач посредством МПТМ. АЛГОРИТМЫ 1 и 2 и реализующие их программы протестированы на многопроцессорном вычислительном кластере с применением гибридной технологии MPI+OpenMP. Результаты показывают преимущества гибридной технологии распараллеливания: счёт по АЛГОРИТМУ 1 (посредством МПТМ) ускоряется в 64,72 раз при разбиении расчётной области на 24 части вдоль оси Ox . АЛГОРИТМ 2 на основе гибридной технологии MPI+OpenMP (также с разбиением исходной задачи на двумерную и одномерную и их раздельном решении) при разделении вычислительной работы между 24 процессорами (по 6 блоков вдоль оси Ox и по 4 блока вдоль оси Oy) дал наибольшее ускорение в 176,12 раз.

При реконструкции опасных гидрофизических явлений мелководных водоёмов (областей с «вытянутой геометрией»), когда время построения прогноза ограничено, предпочтительнее прибегать к программе, реализующей АЛГОРИТМ 2 с гибридной технологией.

С помощью разработанных моделей гидродинамики воспроизведён экстремальный штормовой нагон, который происходил с 23 по 25 сентября 2014 г. в заливе недалеко от г. Таганрога. При средней глубине водного резервуара не более 2 м был зафиксирован уровень воды, превышающий 4 м. Результаты, полученные в данной работе при параллельном вычислении на базе явных регуляризованных схем, позволили с погрешностью 3–5% оценить подъём уровня воды мелководного водоёма — Таганрогского залива. Анализ полученных результатов численных экспериментов подтвердил высокую эффективность разработанных алгоритмов численной реализации математических моделей гидрофизики Азовского моря.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №21-71-20050).

Литература

1. Четверушкин Б.Н. Кинетические модели для решения задач механики сплошной среды на суперкомпьютерах // Матем. моделирование. 2015. Т. 27, № 5. С. 65-79. (English version <https://doi.org/10.1134/S2070048215060034>)
2. Четверушкин Б.Н., Знаменская И.А., Луцкий А.Е., Ханхасаева Я.В. Численное моделирование взаимодействия и эволюции разрывов в канале на основе компактной формы квазигазодинамических уравнений // Матем. моделирование. 2020. Т. 32, № 5. С. 44-58. <https://doi.org/10.20948/mm-2020-05-03>
3. Якобовский М.В., Григорьев С.К. Алгоритм гарантированной генерации тетраэдральной сетки проекционным методом // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 109. 18 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-109>
4. Четверушкин Б.Н., Якобовский М.В. Вычислительные алгоритмы и архитектура систем высокой производительности // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 52. 12 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-52>
5. Брагин М.Д., Криксин Ю.А., Тишкин В.Ф. Энтропийно устойчивый разрывный метод Галеркина для двумерных уравнений Эйлера // Матем. моделирование. 2021. Т. 33, № 2. С. 125-140. <https://doi.org/10.20948/mm-2021-02-09>
6. Любимова Т.П., Лепихин А.П., Паршакова Я.Н., Колчанов В.Ю., Gualtieri C., Lane S.N., Roux B. Гидродинамические аспекты слияния рек с различными плотностями вод // Вычисл. мех. сплош. сред. 2020. Т. 13, № 4. С. 381-392. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2020.13.3.29>
7. Шарифулин В.А., Любимова Т.П. Надкритические конвективные течения талой воды в открытой горизонтальной прямоугольной области с заданным вертикальным тепловым потоком // Вычисл. мех. сплош. сред. 2021. Т. 14, № 4. С. 472-484. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2021.14.4.39>
8. Любимова Т.П., Паршакова Я.Н. Моделирование распространения тепловых загрязнений в крупных водных объектах // Вода и экология: проблемы и решения. 2019. Т. 78, № 2. С. 92-101. <https://doi.org/10.23968/2305-3488.2019.24.2.92-101>
9. Thorhauga A., Gallagher J., Kiswara W., Prathep A., Huang X., Yap T.-K., Dorward S., Berlyn G. Coastal and estuarine blue carbon stocks in the greater Southeast Asia region: Seagrasses and mangroves per nation and sum of total // Marine Pollution Bulletin. 2020. Vol. 160. 111168. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111168>
10. Lo E.Y.M., Shao S.B. Simulation of near-shore solitary wave mechanics by an incompressible SPH method // Appl. Ocean Res. 2002. Vol. 24. P. 275-286. [https://doi.org/10.1016/S0141-1187\(03\)00002-6](https://doi.org/10.1016/S0141-1187(03)00002-6)
11. Hejazi K., Ghavami A., Aslani A. Numerical modeling of breaking solitary wave run up in surf zone using incompressible smoothed particle hydrodynamics (ISPH) // Coastal Engineering Conference. 2017. Vol. 35. 31. <https://doi.org/10.9753/icce.v35.waves.31>
12. Logofet D.O., Lesnaya E.V. The mathematics of Markov models: what Markov chains can really predict in forest successions // Ecological Modelling. 2000. Vol. 126. P. 285-298. [https://doi.org/10.1016/S0304-3800\(00\)00269-6](https://doi.org/10.1016/S0304-3800(00)00269-6)
13. Robertson R., Dong C. An evaluation of the performance of vertical mixing parameterizations for tidal mixing in the Regional Ocean Modeling System (ROMS) // Geosci. Lett. 2019. Vol. 6. 15. <https://doi.org/10.1186/s40562-019-0146-y>
14. Воеводин В.В., Воеводин В.В. Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002. 608 с.
15. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления для многоядерных многопроцессорных систем. Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2010. 421 с.
16. Huang X., Huang X., Wang D., Wu Q., Li Y., Zhang S., Chen Y., Wang M., Gao Y., Tang Q., Chen Y., Fang Z., Song Z., Yang G. OpenArray v1.0: A simple operator library for the decoupling of ocean modeling and parallel computing // Geosci. Model Dev. 2019. Vol. 12. P. 4729-4749. <https://doi.org/10.5194/gmd-12-4729-2019>
17. Сухинов А.И., Атаян А.М., Белова Ю.В., Литвинов В.Н., Никитина А.В., Чистяков А.Е. Обработка данных природных измерений экспедиционных исследований для математического моделирования гидродинамических процессов Азовского моря // Вычисл. мех. сплош. сред. 2020. Т. 13, № 2. С. 161-174. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2020.13.2.13>
18. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А., Сидорякина В.В., Проценко С.В. Метод учета заполненности ячеек для решения задач гидродинамики со сложной геометрией расчетной области // Матем. моделирование. 2019. Т. 31, № 8. С. 79-100. <https://doi.org/10.1134/S0234087919080057>
19. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Сидорякина В.В., Проценко Е.А. Экономичные явно-неявные схемы решения многомерных задач диффузии-конвекции // Вычисл. мех. сплош. сред. 2019. Т. 12, № 4. С. 435-445. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2019.12.4.37>

References

1. Chetverushkin B.N. Kinetic models for solving continuum mechanics problems on supercomputers. *Math. Models Comput. Simul.*, 2015, vol. 7, pp. 531-539. <https://doi.org/10.1134/S2070048215060034>
2. Chetverushkin B.N., Znamenskaya I.A., Lutsky A.E., Khankhasaeva Ya.V. Numerical simulation of the interaction and evolution of discontinuities in a channel based on a compact form of quasi-gasdynamic equations. *Math. Models Comput. Simul.*, 2021, vol. 13, pp. 26-36. <https://doi.org/10.1134/S2070048221010075>
3. Yakobovskiy M.V., Grigorjev S.K. Projection-based guaranteed mesh generation algorithm. *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha – Keldysh Institute Preprints*, 2018, no. 109. 18 p. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-109>
4. Chetverushkin B.N., Yakobovskiy M.V. Numerical algorithms and architecture of HPC systems. *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha – Keldysh Institute Preprints*, 2018, no. 52. 12 p. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-52>
5. Bragin M.D., Kriksin Yu.A., Tishkin V.F. Entropy-stable discontinuous Galerkin method for two-dimensional Euler equations. *Math. Models Comput. Simul.*, 2021, vol. 13, pp. 897-906. <https://doi.org/10.1134/S2070048221050069>
6. Lyubimova T.P., Lepikhin A.P., Parshakova Ya.N., Kolshanov V.Yu., Gualtieri C., Lane S.N., Roux B. Hydrodynamic aspects of river confluence with different water densities. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2020, vol. 13, no. 4, pp. 381-392. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2020.13.3.29>

7. Sharifulin V.A., Liubimova T.P. Supercritical convective flows of melt water in an open horizontal rectangular cavity with a prescribed vertical heat flux. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2021, vol. 14, no. 4, pp. 472-484. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2021.14.4.39>
8. Lyubimova T.P., Parshakova Ya.N. Modeling propagation of thermal pollution in large water bodies. *Voda i ekologiya: problemy i resheniya – Water and ecology*, 2019, vol. 78, no. 2, pp. 92-101. <https://doi.org/10.23968/2305-3488.2019.24.2.92-101>
9. Thorhauga A., Gallagher J., Kiswara W., Prathep A., Huang X., Yap T.-K., Dorward S., Berlyn G. Coastal and estuarine blue carbon stocks in the greater Southeast Asia region: Seagrasses and mangroves per nation and sum of total. *Marine Pollution Bulletin*, 2020, vol. 160, 111168. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111168>
10. Lo E.Y.M., Shao S. Simulation of near-shore solitary wave mechanics by an incompressible SPH method. *Appl. Ocean Res.*, 2002, vol. 24, pp. 275-286. [https://doi.org/10.1016/S0141-1187\(03\)00002-6](https://doi.org/10.1016/S0141-1187(03)00002-6)
11. Hejazi K., Ghavami A., Aslani A. Numerical modeling of breaking solitary wave run up in surf zone using incompressible smoothed particle hydrodynamics (ISPH). *Coastal Engineering Conference*, 2017, vol. 35, 31. <https://doi.org/10.9753/icce.v35.waves.31>
12. Logofet D.O., Lesnaya E.V. The mathematics of Markov models: what Markov chains can really predict in forest successions. *Ecological Modelling*, 2000, vol. 126, pp. 285-298. [https://doi.org/10.1016/S0304-3800\(00\)00269-6](https://doi.org/10.1016/S0304-3800(00)00269-6)
13. Robertson R., Dong C. An evaluation of the performance of vertical mixing parameterizations for tidal mixing in the Regional Ocean Modeling System (ROMS). *Geosci. Lett.*, 2019, vol. 6, 15. <https://doi.org/10.1186/s40562-019-0146-y>
14. Voyevodin V.V., Voyevodin V.I. *Parallel'nyye vychisleniya* [Parallel computing]. St. Petersburg, BKhV-Peterburg, 2002. 608 p.
15. Gergel' V.P. *Vysokoproizvoditel'nyye vychisleniya dlya mnogoyadernykh mnogoprotsessornykh sistem* [High performance computing for multicore multiprocessor systems]. Nizhny Novgorod, Publishing House of the Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 2010. 421 p.
16. Huang X., Huang X., Wang D., Wu Q., Li Y., Zhang S., Chen Y., Wang M., Gao Y., Tang Q., Chen Y., Fang Z., Song Z., Yang G. OpenArray v1.0: A simple operator library for the decoupling of ocean modeling and parallel computing. *Geosci. Model Dev.*, 2019, vol. 12, pp. 4729-4749. <https://doi.org/10.5194/gmd-12-4729-2019>
17. Sukhinov A.I., Atayan A.M., Belova Yu.V., Litvinov V.N., Nikitina A.V., Chistyakov A.E. Data processing of field measurements of expedition research for mathematical modeling of hydrodynamic processes in the Azov Sea. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2020, vol. 13, no. 2, pp. 161-174. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2020.13.2.13>
18. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A., Sidoryakina V.V., Protsenko S.V. Accounting method of filling cells for the hydrodynamics problems solution with complex geometry of the computational domain. *Math. Models Comput. Simul.*, 2020, vol. 12, pp. 232-245. <https://doi.org/10.1134/S2070048220020155>
19. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Sidoryakina V.V., Protsenko E.A. Economical explicit-implicit schemes for solving multidimensional diffusion-convection problems. *J. Appl. Mech. Tech. Phy.*, 2020, vol. 61, pp. 1257-1267. <https://doi.org/10.1134/S0021894420070159>

Поступила в редакцию 02.11.2022; после доработки 14.11.2022; принята к опубликованию 14.11.2022

Сведения об авторах

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

Чистяков Александр Евгеньевич, дфмн, проф., ДГТУ; e-mail: cheese_05@mail.ru

Никитина Алла Валерьевна, дтн, проф., ДГТУ; e-mail: nikitina.vm@gmail.com

Атаян Ася Михайловна, б/с, асс., ДГТУ; e-mail: atayan24@mail.ru

Литвинов Владимир Николаевич, ктн, доц., ДГТУ; e-mail: litvinovvn@rambler.ru

Поркшеян Маркос Витальевич, б/с, программист, ДГТУ; e-mail: baron2012marcos@gmail.com