

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

«СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ  
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ,  
ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ И  
ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ 2017»  
(СПММОИиПВ-2017)

Труды  
Международной научной конференции

Том I

(пос. Дивноморское, г. Геленджик, Краснодарский край  
4 – 11 сентября 2017 г.)

Ростов-на-Дону  
ДГТУ  
2017

УДК [004.75+004.93+519.6]

«Современные проблемы математического моделирования, обработки изображений и параллельных вычислений 2017» (СПММОИиПВ-2017): труды Междунар. науч. конф. (пос. Дивноморское, 4–11 сентября 2017 г.) Том I; Донской гос. техн. ун-т. – Ростов-на-Дону: ООО «ДГТУ-Принт», 2017. – 320 с.

ISBN 978-5-905994-97-5

В сборник включены труды Международной научной конференции, посвященной анализу современных проблем математического моделирования, обработки изображений, развитию и применению параллельных вычислительных технологий. Главная цель конференции – предоставить возможность для обсуждения перспектив развития методов математического моделирования, обработки изображений, а также новых параллельных вычислительных технологий и представления результатов, полученных ведущими научными группами в использовании суперкомпьютерных технологий для решения различных задач науки, техники и технологий.

Предназначен для научных работников, специалистов в области математического моделирования, обработки изображений, параллельных вычислительных технологий.

УДК [004.75+004.93+519.6]

Конференция проведена при поддержке:

1. Российского научного фонда
2. Российского фонда фундаментальных исследований

ISBN 978-5-905994-97-5

© ООО «ДГТУ-Принт», 2017

## Содержание

<b>Агошков В.И., Лёзина Н.Р.</b> НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ФОРМУЛИРОВКЕ МЕТОДА РАЗДЕЛЕНИЯ ОБЛАСТИ И АЛГОРИТМ КРУПНОБЛОЧНОГО РАСПАРалЛЕЛИВАНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ .....	6
<b>Агошков В.И., Шелопут Т.О.</b> ВАРИАЦИОННАЯ АССИМИЛЯЦИЯ ДАННЫХ О ТЕМПЕРАТУРЕ ДЛЯ МОДЕЛИ ГИДРОТЕРМОДИНАМИКИ БАЛТИЙСКОГО МОРЯ: РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ ОТКРЫТЫХ ГРАНИЦ .....	14
<b>Алеева В.Н., Валькевич Н.В., Лаптева Ю.С., Тарасов Д.Е.</b> РАСШИРЕННАЯ МОДЕЛЬ КОНЦЕПЦИИ Q-ДЕТЕРМИНАНТА И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ РЕСУРСА ПАРАЛЛЕЛИЗМА ЧИСЛЕННЫХ АЛГОРИТМОВ .....	23
<b>Алексеев М.В., Савенков Е.Б.</b> МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОЙ НЕПРОНИЦАЕМОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЕ .....	33
<b>Афендииков А.Л., Никитин В.С.</b> О ДЕКАРТОВЫХ СЕТКАХ В НЕКОТОРЫХ АДАПТИВНЫХ АЛГОРИТМАХ АЭРОДИНАМИКИ .....	41
<b>Ахметов И.В., Губайдуллин И.М., Шакирова З.Р.</b> ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА БЕНЗИЛИДЕНБЕНЗИЛАМИНА .....	47
<b>Баканов В.М.</b> ФОРМИРОВАНИЕ ПЛАНА ВЫПОЛНЕНИЯ ЧАСТЕЙ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ И ПРОГРАММНЫЙ СТЕНД ДЛЯ РАЗРАБОТКИ РАЦИОНАЛЬНЫХ СТРАТЕГИЙ ПЛАНИРОВАНИЯ .....	55
<b>Боголюбов Н.Н. (мл.), Солдатов А.В.</b> ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ МНОГОУРОВНЕВЫХ СИСТЕМ .....	64
<b>Быковских Д.А., Галкин В.А.</b> О ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ ТЕСТЕ ДЛЯ ОДНОЙ МОДЕЛИ БЕССТОЛКОВО-ВИТЕЛЬНОГО ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА .....	69
<b>Валиев Х.Х., Карнет Ю.Н., Юмашев О.Б.</b> ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВО – ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ВЫБОРЕ АКТИВНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ ДЛЯ ЭЛАСТОМЕРОВ .....	78
<b>Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А.</b> МАТРИЧНЫЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА, ГЕНЕРИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ МАТЕРИАЛЕ .....	85
<b>Глотов В.Ю., Головизнин В.М., Соловьев А.В.</b> О ГИПЕРБОЛИЗАЦИИ ЯВНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА .....	94

<b>Головизнин В.М., Глотов А.Ю., Соловьев А.В.</b> ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ ПРИ НЕПОЛНОМ РАЗРЕШЕНИИ СПЕКТРА ТУРБУЛЕНТНЫХ ПУЛЬСАЦИЙ БЕЗ НАСТРОЕЧНЫХ ПАРАМЕТРОВ .....	103
<b>Головизнин В.М.</b> СХЕМА КАБАРЕ – АЛГОРИТМ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИАМИКЕ .....	113
<b>Головизнин В.М., Залесный В.Б., Соловьев А.В.</b> НОВЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ НА СФЕРЕ НА ОСНОВЕ СХЕМЫ КАБАРЕ .....	121
<b>Голубев В.И., Петров И.Б.</b> ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ СЕЙСМИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ОТ КЛАСТЕРА ФЛЮИДОНАСЫЩЕННЫХ МАКРОТРЕЩИН ДЛЯ ЗАДАЧ УПРУГОЙ МИГРАЦИИ .....	131
<b>Еникеева Л.В., Губайдуллин И.М.</b> АЛГОРИТМЫ МИНИМИЗАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ .....	135
<b>Еникеев М.Р., Губайдуллин И.М., Еникеева Л.В., Малеева М.А.</b> ИДЕНТИФИКАЦИЯ КОРРОЗИИ, КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КОРРОЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЯ .....	141
<b>Ильин В.П., Гладких В.С.</b> БАЗОВАЯ СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ (БСМ): КОНЦЕПЦИЯ, АРХИТЕКТУРА И МЕТОДОЛОГИЯ .....	151
<b>Краснов М.М., Кучугов П.А., Ладонкина М.Е., Тишкин В.Ф.</b> ЭФФЕКТИВНЫЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА РАЗРЫВНЫМ МЕТОДОМ ГАЛЕРКИНА .....	159
<b>Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М.</b> РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПРИ ОПТИМИЗАЦИИ УСЛОВИЙ ПРОВЕДЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ .....	167
<b>Носова С.А., Турлапов В.Е.</b> КОМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД КЛАССИФИКАЦИИ СЛОЕВ И КЛЕТОК КОРТЕКСА МОЗГА МЫШИ, ОКРАШЕННЫХ ПО НИССЛЮ, НА ОСНОВЕ ПОСЛОЙНОЙ СТАТИСТИКИ ДЕСКРИПТОРОВ КЛЕТОК .....	174
<b>Павлова М.Н., Бедная Т.А., Назарова Е.В.</b> МАКРОЭКОНОМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, УЧИТЫВАЮЩАЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКТОР И ВЛОЖЕНИЕ ИНВЕСТИЦИЙ .....	183
<b>Переварюха А.Ю.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЛАПСА КАК СЦЕНАРИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНОЙ ДИНАМИКИ ПРОМЫСЛОВЫХ ПОПУЛЯЦИЙ .....	190
<b>Петров И.Б., Голубев В.И., Беклемышева К.А., Васюков А.В.</b> ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ КОМПОЗИТНОГО ТРУБОПРОВОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЕЙСМИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ .....	198
<b>Сальников А.Н., Бегаев А.А., Майсурадзе А.И.</b> КЛАСТЕРИЗАЦИЯ ЗАДЕРЖЕК МЕЖДУ УЗЛАМИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ .....	206

<b>Семенякина А.А.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРАСТРАНЕНИЯ НЕФТЯНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В ПРИБРЕЖНЫХ СИСТЕМАХ НА СУПЕР-ЭВМ .....	216
<b>Серегина Е.В., Поляков А.Н., Степович М.А.</b> О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА ГАЛЕРКИНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУМЕРНОЙ ДИФФУЗИИ ЭКСИТОНОВ, ГЕНЕРИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ МАТЕРИАЛЕ .....	224
<b>Сидорякина В.В.</b> О ПОСТРОЕНИИ КОНЕЧНО ЭЛЕМЕНТНОЙ АППРОКСИМАЦИИ УРАВНЕНИЯ ТРАНСПОРТА НАНОСОВ НА ОПТИМАЛЬНЫХ ГРАНИЧНО-АДАПТИВНЫХ СЕТКАХ .....	232
<b>Соколова А.А.</b> АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О СОЛИТОНЕ СТОКСА КАК ДОКАЗАТЕЛЬСТВО РАНЕЕ ПОЛУЧЕННЫХ ОЦЕНОК ПОГРЕШНОСТИ .....	253
<b>Стогний П.В., Петров Д.И.</b> МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ЗОНЕ АРКТИЧЕСКОГО ШЕЛЬФА В ПРИСУТСТВИИ ТОРОСОВ .....	261
<b>Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е.</b> ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОКАНАЛЬНЫХ КОСМИЧЕСКИХ СНИМКОВ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ «ЦВЕТЕНИЯ» ФИТОПЛАНКТОННЫХ ВОДОРОСЛЕЙ В МЕЛКОВОДНЫХ ВОДОЕМАХ НА СУПЕР-ЭВМ .....	264
<b>Сухинов А.И., Проценко С.В., Чистяков А.Е., Проценко Е.А.</b> РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В ОБЛАСТИ СО СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЕЙ .....	280
<b>Сухинов А.И., Чистяков А.Е.</b> АДАПТИВНЫЙ МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ПОПЕРЕМЕННО-ТРЕУГОЛЬНЫЙ МЕТОД .....	294
<b>Шутяев В.П., Пармузин Е.И.</b> ИССЛЕДОВАНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ОПТИМАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ МОРЯ .....	311

# НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ФОРМУЛИРОВКЕ МЕТОДА РАЗДЕЛЕНИЯ ОБЛАСТИ И АЛГОРИТМ КРУПНОБЛОЧНОГО РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ\*

В.И. Агошков<sup>1,2</sup>, Н.Р. Лёзина<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>ИВМ РАН, <sup>2</sup>МГУ,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** В данной работе представлен метод разделения области, основанный на теории сопряженных уравнений и теории обратных задач. Используется математическая модель циркуляции Балтийского моря, разработанная в ИВМ РАН. Для аппроксимации по времени применяется метод расщепления. Метод разделения области рассмотрен на примере задачи конвекции-диффузии. Использование данного метода разделения области на многопроцессорных вычислительных системах позволяет создавать параллельные алгоритмы.

**Ключевые слова:** Метод разделения области; обратные задачи; численные методы; сопряженные уравнения; параллельные алгоритмы

**Введение.** Для сложных задач математического моделирования таких как задачи гидротермодинамики океанов и морей, часто применяются методы, позволяющие упростить решение системы уравнений. При использовании метода расщепления можно свести решение системы уравнений к решению классических задач: конвекции-диффузии, мелкой воды и эллиптических задач. Достаточно часто такие задачи являются задачами с преобладающим несимметричным оператором и для них возникают трудности в использовании известных методов разделения области. Поэтому в этой работе предлагается новый подход к формулировке методов разделения области.

Кроме того, развитие современной вычислительной техники позволяет использовать эффективные по времени алгоритмы численных реализаций, что приводит к тому, что необходимо создание параллельных алгоритмов при решении задач численно. Одним из простых способов создания таких алгоритмов является применение метода разделения области.

---

\* Работа выполнена при поддержке РНФ (грант 14-11-00609, в рамках которого проведены численные эксперименты) и РФФИ (грант 16-01-00548, в рамках которого проведено исследование сформулированных задач).

**Описание новых подходов.** Одним из известных подходов к формулировке метода разделения области является теория специальных граничных операторов Пуанкаре-Стеклова, введенных в работе [1]. Эти операторы оказались плодотворными для конструирования самых различных алгоритмов разделения области, их анализа и оптимизации.

Другая методология построения алгоритмов разделения области, предлагаемая в [2], основывается на теории оптимального управления, результатах теории обратных и некорректных задач, применении сопряженных уравнений и современных итерационных процессов. Идея этой методологии состоит в следующем. После введения внутренней границы, разделяющей исходную область, на ней записываются условия шивки для решения подзадач в подобластях. Затем некоторые из условий шивки записываются через «граничные функции», которые объявляются «управлениями» и подлежат отысканию вместе с решениями в подобластях. В качестве «уравнения замыкания» принимается вторая часть условий шивки, которые записываются на внутренней границе «в смысле наименьших квадратов». Таким образом, получаем задачу оптимального управления, которая решается уже известными методами (см., например, [3–5]) и в результате получаем алгоритмы разделения области. В некотором смысле такой подход можно трактовать как применение «метода квазирешений В.К. Иванова» с введением регуляризации по Тихонову для отыскания «граничных функций». Стоит отметить, что данная методология применима к задачам с операторами различных типов, порядков и с различным числом независимых переменных.

**Рассмотрение представленного подхода на примере задачи конвекции-диффузии.** Одной из базовых задач гидротермодинамики океанов и морей является задача типа конвекции-диффузии. Применение метода разделения области на первых этапах решения позволяет сводить процесс решения задачи во всей области  $D$  к поочередному их решению в подобластях  $D_1, D_2$ , возможно имеющих уже более простую геометрическую форму, чем  $D$ .

Итак, пусть рассматривается задача вида:

$$\begin{cases}
T_i + (\bar{U}, \text{Grad})T - \text{Div}(v_T \text{Grad}T) = f_T \varepsilon D \times (t_0, t_1), \\
T = T(0) \text{input} = t_0 \varepsilon D \\
\bar{U}_n^{(-)}T - v_T \frac{\partial T}{\partial z} + \gamma_T (T - T_a) = Q_T + \bar{U}_n^{(-)} d_T \text{на} \Gamma_s \times (t_0, t_1), \\
\frac{\partial T}{\partial N_T} = 0 \text{на} \Gamma_{w,c} \times (t_0, t_1) \\
\bar{U}_n^{(-)}T + \frac{\partial T}{\partial N_T} = Q_T + \bar{U}_n^{(-)} d_T \text{на} \Gamma_{w,op} \times (t_0, t_1), \\
\frac{\partial T}{\partial N_T} = 0 \text{на} \Gamma_H \times (t_0, t_1)
\end{cases} \quad (1)$$

с заданными  $\bar{U}, f_T, K, d_T, Q_T$ .

Пусть область  $D$  разделена кусочно-гладкой липшицевой поверхностью  $\Gamma_{in}$  на две подобласти  $D_1$  и  $D_2$  так, что границы  $\partial D_1$  и  $\partial D_2$  будут также липшицевыми. Характеристические функции  $\Gamma_{in}$  обозначим  $m_{in}$ . Остановимся подробнее на условиях, которые надо задавать на «искусственно» введенной границе разделения областей  $\Gamma_{in}$ . Потребуем выполнение следующих условий:

$$T_1 = T_2, \quad \bar{U}_{n,1}^{(-)}T_1 + \frac{\partial T_1}{\partial N_{T,1}} = - \left( \bar{U}_{n,2}^{(-)}T_2 + \frac{\partial T_2}{\partial N_{T,2}} \right), \quad (2)$$

Где  $\bar{U}_{n,i}^{(-)} \equiv \bar{U}_n^{(-)}$  при подходе к  $\Gamma_{in}$  из  $D_i, i=1,2$ .

Таким образом, задача (1) может быть записана на каждом из множеств  $D_1 \times (t_0, t_1), D_2 \times (t_0, t_1)$  и условий сопряжения вида:

$$T_1 = T_2, \quad \bar{U}_{n,1}^{(-)}T_1 + \frac{\partial T_1}{\partial N_{T,1}} = - \left( \bar{U}_{n,2}^{(-)}T_2 + \frac{\partial T_2}{\partial N_{T,2}} \right) \text{на} \Gamma_{in} \times (t_0, t_1), \quad (3)$$

где  $N_{T,i}$  – внешняя к  $\Gamma_{in}$  конормаль к  $D_i (i=1,2)$ , а  $\Gamma_{in}$  – общая часть границ для  $\partial D_1$  и  $\partial D_2$ , разделяющая  $D$  на две подобласти.

Пусть вводится «дополнительная неизвестная»  $v$  («управление») на  $\Gamma_{in} \times (t_0, t_1)$  как:

$$v \equiv \bar{U}_{n,1}^{(-)}T_1 + \frac{\partial T_1}{\partial N_{T,1}} \text{на} \Gamma_{in} \times (t_0, t_1), \quad (4)$$

подлежащая определению вместе с  $T_1, T_2$ .

В качестве уравнения замыкания задачи будем рассматривать первое равенство из (3) и вводим следующий «функционал стоимости»:



$$\begin{aligned}
J_\alpha(v) &\equiv J_\alpha(T_1(v), T_2(v), v) \equiv \\
&\equiv \frac{\alpha}{2} \int_{\Gamma_{in} t_0}^{t_1} \int m_{in} (v - v^{(0)})^2 d\Gamma dt + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_{in} t_0}^{t_1} \int m_{in} (T_1 - T_2)^2 d\Gamma dt,
\end{aligned} \tag{5}$$

где  $\alpha = const \geq 0$  – «параметр регуляризации»,  $v^{(0)}$  – заданная функция.

Ставится следующая задача: найти функцию  $T_i$  в  $D_i \times (t_0, t_1)$ , удовлетворяющую (1)–(4) при  $D \equiv D_i, (i=1,2)$  и функцию  $v$ , такие что функционал (5) принимает наименьшее значение:

$$\inf_v J_\alpha(v).$$

Приближенное решение задачи (1) осуществляется при предварительной аппроксимации по времени, для перехода к полудискретному виду модели и последующего решения полученного стационарного уравнения. Решение задачи находится итерационным методом, который кратко изложим далее (более подробно данный метод описан в [2]). Пусть  $v^k$  уже определена. Тогда реализуются следующие шаги:

1) при  $v \equiv v^k$  решаем прямую задачу в  $D_i$  по отысканию  $T_i \equiv T_i^{(k)}, i=1,2$ :

$$\left\{ \begin{aligned}
&(\bar{U}, Grad) T_i - Div(v_T Grad T_i) + b T_i = F_T \text{ в } D_i \times (t_0, t_1), \\
&\bar{U}_n^{(-)} T_i - v_T \frac{\partial T_i}{\partial z} + \gamma_T (T_i - T_a) = Q_T + \bar{U}_n^{(-)} d_T \text{ на } \Gamma_s \times (t_0, t_1), \\
&\frac{\partial T_i}{\partial N_T} = 0 \text{ на } \Gamma_{w,c} \times (t_0, t_1), \\
&\bar{U}_n^{(-)} T_i + \frac{\partial T_i}{\partial N_{T,i}} = Q_T + \bar{U}_n^{(-)} d_T \text{ на } \Gamma_{w,op} \times (t_0, t_1), \\
&\frac{\partial T_i}{\partial N_T} = 0 \text{ на } \Gamma_H \times (t_0, t_1), \\
&\bar{U}_{n,1}^{(-)} T_1 + \frac{\partial T_1}{\partial N_{T,1}} = v, \bar{U}_{n,2}^{(-)} T_2 + \frac{\partial T_2}{\partial N_{T,2}} = -v \text{ на } \Gamma_{in} \times (t_0, t_1);
\end{aligned} \right.$$

2) решаем сопряженную задачу в  $D_i$  при  $T_i \equiv T_i^{(k)}, i=1,2$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\text{Div}(\bar{U}, T_i^*) - \text{Div}(v_T \text{Grad} T_i^*) = 0 \text{ в } D_i \times (t_0, t_1), \\ \bar{U}_n^{(+)} T_i^* - v_T \frac{\partial T_i^*}{\partial z} + \gamma_T T_i^* = 0 \text{ на } \Gamma_s \times (t_0, t_1), \\ \frac{\partial T_i^*}{\partial N_T} = 0 \text{ на } (\Gamma_{w,c} \cup \Gamma_H) \times (t_0, t_1), \\ \bar{U}_n^{(+)} T_i^* + \frac{\partial T_i^*}{\partial N_{T,i}} = 0 \text{ на } \Gamma_{w,op} \times (t_0, t_1), \\ \bar{U}_n^{(+)} T_1^* + \frac{\partial T_1^*}{\partial N_{T,1}} = m_{in} (T_1 - T_2) \text{ на } \Gamma_{in} \times (t_0, t_1), \\ \bar{U}_n^{(+)} T_2^* + \frac{\partial T_2^*}{\partial N_{T,2}} = -m_{in} (T_1 - T_2) \text{ на } \Gamma_{in} \times (t_0, t_1); \end{array} \right.$$

3) находим новое приближение  $v^{k+1}$  :

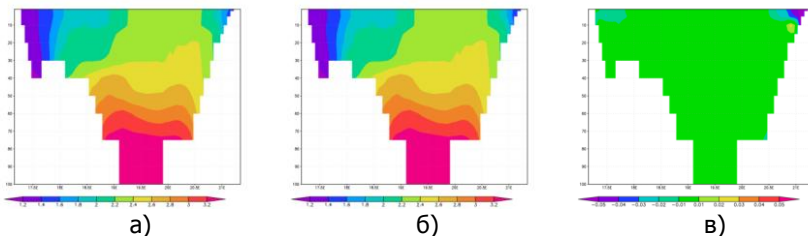
$$v^{k+1} = v^k - \tau_k \left( \alpha (v^k - v^{(0)}) + m_{in} (T_1^* - T_2^*) \right) \text{ на } \Gamma_{in},$$

где параметр  $\tau_k$  вычисляется по формуле:

$$\tau_k = \frac{1 \int_{\Gamma_{in}} (T_1 - T_2)^2 d\Gamma}{2 \int_{\Gamma_{in}} (T_1^* - T_2^*)^2 d\Gamma};$$

4) переходим к пункту 1, пока не выполнилось условие выхода из итерационного процесса.

Для проверки эффективности использования метода разделения области был проведен ряд численных экспериментов. Исследования были проведены для акватории Балтийского моря, разделенной на две части. Для численных экспериментов рассматривалась только задача о распространении тепла. Наиболее интересным представляется результат разницы температур, полученных с применением метода разделения области  $T^{(ddm)}$  и без его применения  $T^{(w)}$  на границе раздела двух областей (разрез по глубине). Результаты представлены на рис. 1.



**Рис. 1.** Профиль температуры по глубине на границе  $\Gamma_{in}$ :  
 а) с применением метода разделения области;  
 б) без использования метода разделения области;  
 в) разница между полученными температурами  $T^{(ddm)} - T^{(w)}$

Проведенные численные эксперименты сравнения температур без и с использованием метода разделения области для задачи о распространении тепла в акватории Балтийского моря показывают хорошее соответствие результатов. Так, стоит отметить, что разница температур  $T^{(ddm)} - T^{(w)}$  на внутренней границе  $\Gamma_{in}$  почти равна 0. То есть температура совпадают.

**Алгоритм крупноблочного распараллеливания для задач математической физики на основе метода разделения области.** Использование метода разделения области для задач математической физики позволяет достаточно просто создавать параллельные алгоритмы на основе представленного метода, поскольку задачи в подобластях являются связанными лишь на границе и могут решаться одновременно.

Сформулируем параллельный алгоритм для задач, решаемых при помощи описанного выше метода разделения области:

1. Каждый процессор решает задачу в своей подобласти;
2. После решения задачи в подобласти происходит обмен данными на внутренней границе;
3. Каждый процессор решает сопряженную задачу в своей подобласти;
4. После завершения происходит обмен данными на внутренней границе;
5. Находим новое приближение;
6. Переходим к пункту 1, пока не выполнилось условие остановки итерационного процесса;

Ускорение для используемого алгоритма составило приблизительно 1,2. Небольшое ускорение, полученное при использовании алгоритма для информационно-вычислительной системы «ИВМ РАН – Балтийское море»([6]), может объясняться тем фактом, что

модель, используемая для тестовых проверок алгоритма, основана на методе расщепления, а метод расщепления (и, соответственно, алгоритм крупноблочного распараллеливания) применяется только для одного модуля программы расчета температуры в модели.

**Заключение.** Кроме описанного выше метода разделения области, представленного в данной работе, для задачи конвекции-диффузии, стоит отметить, что данный подход также может применяться и для других подзадач, возникающих при использовании метода расщепления в задачах гидротермодинамики океанов и морей. Для краткости описания в данной работе был представлен метод только для задачи конвекции-диффузии, однако описанный выше подход может применяться также и для уравнений мелкой воды, и для эллиптических уравнений 4-го порядка. Более подробно с данными методами можно ознакомиться в [2].

Сделаем также несколько замечаний о других подходах к построению методов разделения области, отличных от описанных выше. Рассмотрим задачу (1). При формулировке алгоритма разделения области мы вводили дополнительное неизвестное  $v$  согласно (4). Но можно было бы поступить и иначе: дополнительное неизвестное ввести как  $T_1 = T_2 = vna\Gamma_{in}$ , а в качестве «уравнения замыкания» принять второе условие из (2). Также важным является выбор подходящего пространства и «подходящей нормы» в нем. Более подробно предложения по развитию алгоритмов и подходов решения краевых задач методами разделения области можно найти в работе [2].

#### **Библиографический список**

1. Лебедев В.И. Обобщенный алгоритм Шварца с переменными параметрами / В.И. Лебедев, В.И. Агошков – М.: ОВМ АН СССР, 1981. – 50 с.
2. Агошков В.И. Методы разделения области в задачах гидротермодинамики океанов и морей / В.И. Агошков. – М.: ИВМ РАН, 2017. – 192 с.
3. Агошков В.И. Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики / В.И. Агошков. – М.: ИВМ РАН, 2016. – 244 с.
4. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики / Г.И. Марчук. – М.: Наука, 1989. – 608 с.
5. Тихонов А.Н. Методы решения некорректных задач. / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин – М.: Наука: Главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 288 с.

6. Агошков В.И. Информационно-вычислительная система «ИВМ РАН – Балтийское море». / В.И. Агошков, Н.А. Асеев, Н.Б. Захарова, Е.И. Пармузин, Т.О. Шелопут, В.П. Шутяев – М.: ИВМ РАН, 2016. – 139 с.

## **METADATA**

**Title:** New approaches to the formulation of domain decomposition and the coarse-grained parallelization algorithm for mathematical modeling problems.

**Authors:** V.I. Agoshkov, N.R.Lezina

**Abstract:** Domain decomposition method based on adjoint equation and inverse problem theory is discussed. The mathematical model of the Baltic Sea circulation, developed in INM RAS, is considered. The splitting method is used for time approximations. Domain decomposition method is studied to convection-diffusion problem. Also using domain decomposition method on multiprocessor computer system is possible to create algorithms for the parallel calculations.

**Key words:** domain decomposition method; inverse problems; numerical methods; adjoint equations; parallel algorithms.

## **ВАРИАЦИОННАЯ АССИМИЛЯЦИЯ ДАННЫХ О ТЕМПЕРАТУРЕ ДЛЯ МОДЕЛИ ГИДРОТЕРМОДИНАМИКИ БАЛТИЙСКОГО МОРЯ: РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ ОТКРЫТЫХ ГРАНИЦ†**

*В.И. Агошков<sup>1,2</sup>, Т.О. Шелопут<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт вычислительной математики РАН,

<sup>2</sup> Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** *В данной работе рассматривается задача моделирования акваторий с «жидкими» (открытыми) границами. Используется математическая модель циркуляции Балтийского моря, разработанная в ИВМ РАН. Модель основана на системе уравнений термогидродинамики в приближении Буссинеска и гидростатики. Для аппроксимации по времени используется метод расщепления. Для восстановления неизвестных функций в граничных условиях на открытых границах исследуется и решается задача ассимиляции температуры (солёности). Для ускорения процедуры ассимиляции используется метод разделения областей.*

**Ключевые слова:** *вариационная ассимиляция данных; обратные задачи; открытые границы; численные методы; сопряжённые уравнения.*

**Введение.** В задачах геофизической гидродинамики часто возникает проблема постановки граничных условий на «жидких» (открытых) границах. Особенно часто с данной проблемой сталкиваются разработчики региональных моделей и моделей окраинных морей. От способа задания граничных условий на открытых границах напрямую зависит полученный результат как при долгосрочных расчетах, так и в задачах оперативного прогноза, а при неудачном задании граничных условий поля гидрофизических параметров (температуры, уровня и т.д.), получаемые в результате расчета, могут искажаться или «загрязняться» осцилляциями, которых в природе не наблюдается.

Существуют различные приближения, которые можно применить для задания граничных условий на «жидких» границах. Иногда используется приближение «материальной» границы – «жидкая» граница считается подвижной, и на ней задается условие «непротекания». Еще одним распространенным приемом является использование осредненных данных о потоках через открытую границу (см., например, [17]). Однако

---

† Работа выполнена при частичной поддержке РФН (грант 14-11-00609, в рамках которого были проведены численные эксперименты) и РФФИ (грант 16-01-00548, в рамках которого проведено исследование сформулированных задач).

такой способ не учитывает изменчивости водообмена (связанной, например, с характером атмосферной циркуляции). Иногда возможно провести предварительный расчет по всей акватории Мирового океана на грубой сетке и использовать полученные данные в качестве граничных условий на «жидкой» границе. Несмотря на повсеместное использование этого подхода, такие данные являются приближенными и часто несовместимы с региональной моделью. Наиболее перспективным из существующих методов является использование ассимиляции данных наблюдений (если последние представлены в достаточном количестве).

Выбор формы записи граничных условий на «жидких» границах также является предметом дискуссий. В некоторых региональных моделях (в частности, в модели ROMS) на открытых границах ставятся условия излучения, которые реализуются в соответствии со схемой, предложенной в работе [5]. В отечественных работах ([7]) встречается следующая формулировка граничных условий на «жидких» границах: условия Дирихле в точках «входящих потоков», на «втоке», и условия излучения в остальных точках. Встречаются и другие формулировки (см., например, [8]). Постановка граничных условий во многом зависит от используемых упрощений. В частности, моделям, основанным на системе уравнений «мелкой воды», посвящено немало работ, в которых приведено исследование обратных задач [6, 12, 13]. Ситуация усложняется в случае моделей, основанных на трехмерных уравнениях Навье-Стокса. Однако, некоторые результаты получены и в этом направлении ([4]).

В работах [1, 2] был использован альтернативный подход к заданию граничных условий. Для аппроксимации модели по времени был использован метод расщепления ([15, 16]), что позволило рассматривать задачу ассимиляции данных для нелинейной модели гидротермодинамики на каждом интервале по времени, решая последовательно более простые задачи ассимиляции, привлекая соответствующие изменяющимся переменным данные наблюдений (см. [11]). В [1] был поставлен класс обратных задач о «граничных функциях», определяющих граничные условия на «жидких границах» и была исследована разрешимость ряда задач из этого класса, а также предложены алгоритмы их численного решения на основе вариационной ассимиляции данных наблюдений.

В настоящей работе рассмотрена одна из таких подзадач – задача ассимиляции данных о температуре, и приведены результаты численных экспериментов для акваторий Балтийского моря и Финского залива, проиллюстрировавшие эффективность предложенного в [1] метода.

**Математическая модель, метод расщепления и задача ассимиляции данных.** В работе рассматривается математическая модель гидротермодинамики Балтийского моря, разработанная в ИВМ РАН [9, 10, 14]. В основе модели лежит система уравнений гидротермодинамики в приближении Буссинеска и гидростатики [15]. Для аппроксимации модели по времени используется метод расщепления [11] (метод слабой аппроксимации). Полную систему рассматриваемых уравнений, граничных и начальных условий можно найти в [1].

Пусть на  $[0, \bar{t}]$  введена сетка:  $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_j = \bar{t}$ . Решение полной задачи на  $j$ -ом шаге по времени аппроксимируется решением следующих подзадач (шагов метода расщепления). На Шаге 1 рассматриваются уравнения типа «мелкой воды» для интегральных скоростей и функции уровня, затем ищутся поправки к трехмерным величинам скоростей. На Шаге 2 рассматривается задача конвекции-диффузии для температуры, на Шаге 3 – для солёности. В конце каждого из этих шагов отыскиваются поправки к скоростям, связанные с изменениями полей температуры и солёности. На Шаге 4 решается задача для скоростей, в которой учитывается влияние операторов четвертого порядка, а на Шаге 5 – система для трехмерного поля скоростей с операторами не выше второго порядка. Формулировки этих подзадач можно найти в работах [1, 2]. После решения задач на всех шагах метода расщепления полученный вектор параметров – скоростей, температуры, солёности, уровня моря – принимается за приближенное решение задачи на  $j$ -ом интервале по времени. Заметим, что температура  $T$  при этом изменяется только на Шаге 2, а это означает, что задача ассимиляции данных о температуре должна решаться именно на данном шаге. Поле температуры при этом корректируется, приближаясь к данным наблюдений в смысле наименьших квадратов.

Таким образом, на каждом шаге по времени на Шаге 2 метода расщепления решается обратная задача для уравнений конвекции-диффузии тепла о восстановлении дополнительной неизвестной функции в граничных условиях на открытой границе. При этом предполагается, что данные наблюдений  $T_{obs}$  заданы на той части открытой границы, где вектор течения направлен внутрь моделируемой акватории. Обратная задача была исследована в работе [2], где она переформулируется как задача минимизации функционала:

$$J_{\alpha} \equiv \frac{\alpha}{2} \int_{t_{j-1}}^{t_j} \int_{\Gamma} m_{w,op} U_n^{(-)} (d_T - d_T^{(0)})^2 d\Gamma dt + \frac{1}{2} \int_{t_{j-1}}^{t_j} \int_{\Gamma} \chi_{obs} (T - T_{obs})^2 d\Gamma dt \rightarrow \inf_{d_T}$$



где  $\alpha > 0$  – малый параметр регуляризации,  $d_T$  – дополнительная неизвестная,  $\Gamma$  – граница трехмерной области (акватории),  $m_{w,op}$ ,  $\chi_{obs}$  – характеристические функции областей, где заданы дополнительные неизвестные и наблюдения, соответственно. Для решения минимизационной задачи в [2] был предложен итерационный алгоритм.

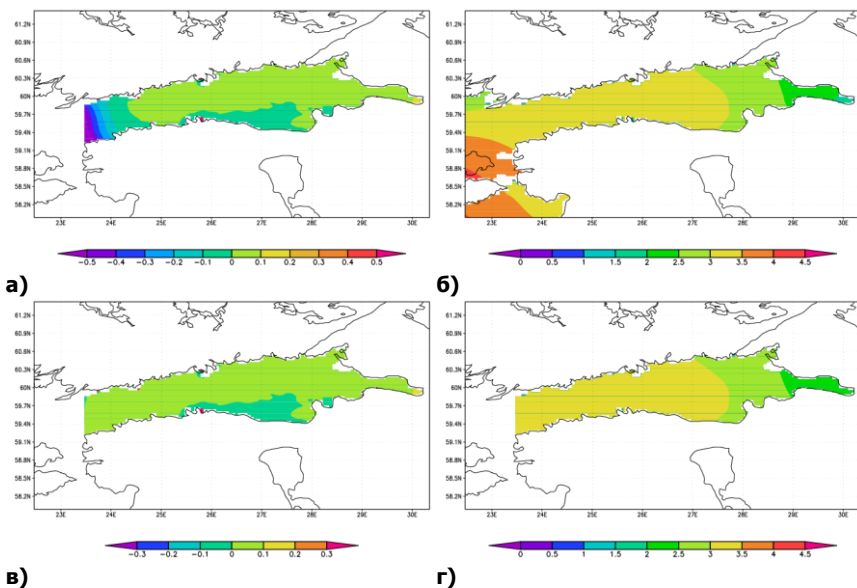
**Результаты численных экспериментов.** Для проверки эффективности предложенной методологии был проведен ряд численных экспериментов, результаты которых приведены и обсуждаются в данном параграфе.

Идея первой серии экспериментов была предложена для проверки эффективности работы программы на модельных данных. Результаты экспериментов приведены и обсуждаются ниже.

Изначально был проведен предварительный расчет прямой модели на 12 модельных часов во всей акватории Балтийского моря. В качестве параметров модели – коэффициентов диффузии, правой части уравнения (“форсинга”), начальных данных и вектора скоростей – были выбраны соответствующие параметры и результаты расчета прямой модели гидротермодинамики Балтийского моря, разрабатываемой в ИВМ РАН.

Далее от акватории Балтийского моря был отделен Финский залив. Результат предварительного расчета был использован для задания “данных наблюдений” на “жидкой” границе (границе раздела Балтийского моря и Финского залива). Для акватории Финского залива были проведены расчеты на более мелкой сетке с использованием и без использования процедуры ассимиляции, рассмотренной в данной статье. После этого результаты расчетов сравнивались с результатами предварительного расчета (в частности, было проведено сравнение поверхностных температур). Обратим внимание, что усваивалась только температура на границе, в то время как сравниваются результаты для поверхностной температуры.

На рисунке 1а представлена разница между полем температуры в конечный момент времени на поверхности, полученным при расчете без использования алгоритма ассимиляции и полем, полученным в предварительном расчете (“наблюдаемым”). Результат можно сравнить с изображенным на рисунке 1в, где представлена разница между полем температуры, полученным при расчете с использованием алгоритма ассимиляции и тем же “наблюдаемым” полем. Как видно из этих рисунков, алгоритм корректирует граничные условия так, что поверхностная температура становится ближе к “наблюдаемой”, причем значение температуры “подправляется” на величину, меньшую градуса по модулю, причем в большей степени вблизи самой “жидкой” границы.



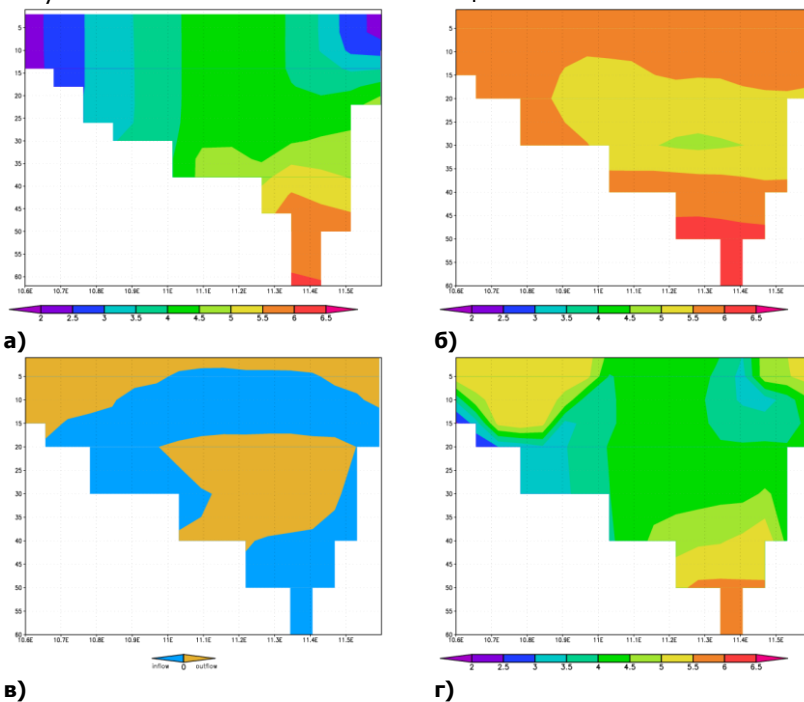
**Рис. 1.** Результаты эксперимента: а) разница между начальным (без использования алгоритма ассимиляции) и “наблюдаемым” полями температуры; б) “наблюдаемое” поле температуры; в) разница между конечным (после использования алгоритма ассимиляции) и “наблюдаемым” полями температуры; г) конечное поле температуры

На рис. 1б и 1г для сравнения представлены “наблюдаемое” поле температуры и поле температуры, полученное на последней итерации алгоритма ассимиляции (в конечный момент времени на поверхности).

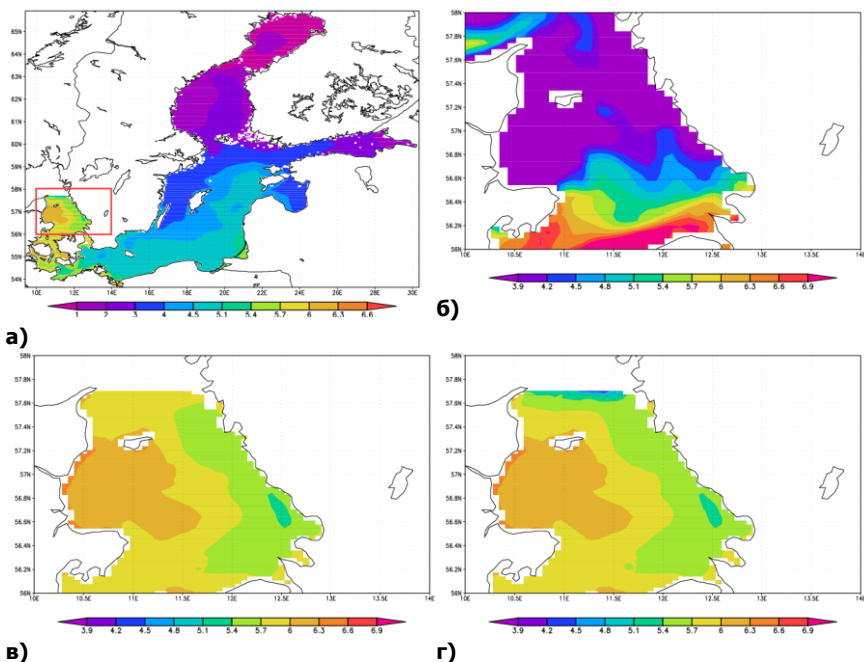
Вторая серия экспериментов была проведена для оценки эффективности ассимиляции профилей температуры на открытой границе в модели гидротермодинамики Балтийского моря.

На рис. 2а представлено поле температуры  $T_{obs}$  [10] (разрез по глубине на открытой границе между Северным и Балтийским морем, положение самой границы можно увидеть на рис. 3а), на рис. 2б и 2г – поля температуры на момент времени 14 модельных суток с начала расчета без использования и с использованием процедуры ассимиляции соответственно. На рис. 2в голубым цветом отмечены точки, где вектор скорости течения воды направлен внутрь акватории (из Северного моря в Балтийское). Соответствующие поверхностные распределения температуры представлены на рис. 3б, 3в, 3г. Как можно заметить, поле

температуры на рис. 3г ближе к представленному на рис. 3б, чем полученное без использования ассимиляции.



**Рис. 2.** а) 'наблюдения' (reanalysis); б) расчет без ассимиляции; в) точки входящих потоков; г) расчет с ассимиляцией



**Рис. 3.** а) моделируемая зона и область вблизи открытой границы (красный прямоугольник); б) 'наблюдения' (reanalysis); в) расчет без ассимиляции; г) расчет с ассимиляцией

В основе используемой численной модели лежат параллельные алгоритмы, однако сама процедура ассимиляции является последовательной. Для ускорения вычислений был использован метод разделения областей. Вносимые при этом вычислительные ошибки оказались незначительными и не повлияли на качество полученных результатов.

### Библиографический список

1. Agoshkov, V.I. Statement and study of some inverse problems in modelling of hydrophysical fields for water areas with 'liquid' boundaries / V.I. Agoshkov // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2017. – V. 32, No. 2. – P. 73-90.
2. Agoshkov, V.I. The study and numerical solution of some inverse problems in simulation of hydrophysical fields in water areas with 'liquid'

boundaries / V.I. Agoshkov, T.O. Sheloput // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2017. – V. 32, No. 3. – P. 147-164.

3. Agoshkov, V.I. The study and numerical solution of the problem of heat and salinity transfer assuming 'liquid' boundaries / V.I. Agoshkov, T.O. Sheloput // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2016. – Vol. 31, No. 2. – P. 71-80.

4. Gejadze, I.Yu. Open Boundary Control Problem for Navier-Stokes Equations Including a Free Surface: Data Assimilation / I.Yu. Gejadze, G.J.M. Copeland, I.M. Navon // Computers and Mathematics with Applications. – 2006. – V.52. – P. 1269-1288.

5. Marchesiello, P. Open boundary conditions for long-term integration of regional oceanic models / P. Marchesiello, J.C. McWilliams, A. Schepetkin // Ocean Modelling. – 2001. – No. 3. – P. 1-20.

6. Ngodock, H. On the direct assimilation of along-track sea-surface height observations into a free-surface ocean model using a weak constraints four-dimensional variational (4D-Var) method / H. Ngodock, M. Carrier, I. Souopgui, S. Smith, P. Martin, P. Muscarella, G. Jacobs // Quarterly Journal of the Royal Meteorological society. – 2016. – V.142. – P. 1160-1170.

7. Semenov, E.V. Problems of Operational Data Assimilation for Marginal Seas / E.V. Semenov, E.V. Mortikov // Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics. – 2012. – Vol. 48, No. 1. – P. 74-85.

8. Temam R. Open Boundary Conditions for the Primitive and Boussinesq Equations / R. Temam, J.Tribbia // Journal of the Atmospheric Sciences. – 2003. – V.60. – P. 2647-2660.

9. Zalesny V. The Baltic Sea circulation modelling and assesment of marine pollution / V. Zalesny, A. Gusev, S. Chernobay, R. Aps, P. Kujala, J.Rytkönen, R. Tamsalu // Russ. J. Numer. Analysis and Math Modelling. – 2014. – V.29, No. 2. – P. 129-138.

10. Baltic Sea Physics Reanalysis from SMHI (1989-2014) // Copernicus marine environment monitoring service. URL: <http://marine.copernicus.eu> (date of access: 13.03.2017).

11. Агошков, В.И. Методы решения обратных задач и задач вариационной ассимиляции данных наблюдений в проблемах крупномасштабной динамики океанов и морей / В.И. Агошков. – М.: ИВМ РАН, 2016. – 192 с.

12. Агошков, В.И. Исследование и численное решение одной обратной задачи моделирования циркуляции в акваториях с «жидкими» границами / В.И. Агошков, Д.С. Гребенников, Т.О. Шелопут // Математические заметки СВФУ. – 2015. – Т. 22, № 2. – С. 3-15.

13. Дементьева, Е.В. Восстановление граничной функции по данным наблюдений для задачи распространения поверхностных волн в

акватории с открытой границей / Е. В. Дементьева, Е. Д. Каропова, В. В. Шайдунов // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2013. – Т. 16, № 1. – С. 10-20.

14. Дианский, Н.А. Сигма-модель глобальной циркуляции океана и ее чувствительность к вариациям напряжения трения ветра / Н.А. Дианский, А.В. Багно, В.Б. Залесный // Изв. АН. Физика атмосферы и океана. – 2002. – Т. 38, № 4. С. 537-556.

15. Марчук, Г. И. Математические модели в геофизической гидродинамике и численные методы их реализации / Г.И. Марчук, В.П. Дымников, В.Б. Залесный. – Л.: Гидрометеиздат, 1987. – 296 с.

16. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики / Г.И. Марчук. – М.: Наука, 1989. – 608 с.

17. Чернов, И. А. Численное моделирование крупномасштабной динамики Белого моря / И. А. Чернов, А. В. Толстиков // Труды Карельского научного центра РАН. – 2014. – № 4. – С. 137-142.

## METADATA

**Title:** Variational assimilation of temperature data for the model of atmosphere hydrodynamics of the Baltic Sea: the solution of problem the open borders.

**Authors:** V.I. Agoshkov, T.O. Sheloput.

**Abstract:** The problem of modeling water areas with 'liquid' (open) lateral boundaries is discussed. The mathematical model of the Baltic Sea circulation, developed in INM RAS, is considered. It is based on the system of thermo-hydrodynamic equations in the Boussinesq and hydrostatic approximations. The splitting method is used for time approximation in the model. Temperature (salinity) assimilation problem is investigated and solved for reconstructing unknown functions in boundary conditions at open boundaries. The domain decomposition method was used for acceleration the assimilation procedure.

**Key words:** variational data assimilation; inverse problems; open boundaries; numerical methods; adjoint equations.

## РАСШИРЕННАЯ МОДЕЛЬ КОНЦЕПЦИИ Q-ДЕТЕРМИНАНТА И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ РЕСУРСА ПАРАЛЛЕЛИЗМА ЧИСЛЕННЫХ АЛГОРИТМОВ\*

*В.Н. Алеева, Н.В. Валькевич, Ю.С. Лаптева, Д.Е. Тарасов*  
Южно-Уральский государственный университет (НИУ),  
г. Челябинск, Россия

**Аннотация.** *Описана расширенная модель концепции Q-детерминанта. Показано ее применение для реализации ресурса параллелизма численных алгоритмов на параллельных вычислительных системах с общей и распределенной памятью. Результаты исследования могут использоваться для повышения эффективности реализации численных алгоритмов на параллельных вычислительных системах.*

**Ключевые слова:** *Q-детерминант алгоритма, представление алгоритма в форме Q-детерминанта, Q-эффективная реализация алгоритма, ресурс параллелизма алгоритма, параллельная вычислительная система, параллельная программа, Q-эффективная программа.*

**Введение.** Использование ресурса параллелизма численных алгоритмов может решить проблему повышения эффективности их выполнения на параллельных вычислительных системах (ВС). В связи с этим очень важным и развитым направлением является исследование параллельной структуры алгоритмов и программ [1]. Для исследования алгоритмов используется их представление с помощью графов. Для описания свойств, особенностей, статических и динамических характеристик алгоритмов с целью их эффективной реализации на параллельных ВС создается Интернет-энциклопедия AlgoWiki [2]. Современное состояние исследований в области распараллеливания алгоритмов и их реализации на параллельных ВС представлено в докладе [3]. В нем поставлен ряд вопросов, которые на сегодня остаются открытыми, в частности, вопросы, связанные со сложностью описания алгоритмов: «Как изобразить потенциально бесконечный граф? Как изобразить потенциально многомерный граф? Как показать зависимость структуры графа от размера задачи? Как выразить имеющийся параллелизм и показать возможный способ параллельного исполнения?». Еще один подход к созданию параллельных программ - синтез параллельных программ. Метод синтеза был впервые описан в [4]. Основанный на нем синтез параллельных программ заключается в том,

---

\* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-07-00865 а, при поддержке Правительства РФ в соответствии с Постановлением №211 от 16.03.2013 г. (соглашение № 02.А03.21.0011).

что из базы знаний параллельных алгоритмов конструируются новые параллельные алгоритмы для решения более крупных задач. На основе метода синтеза разработана технология фрагментированного программирования и реализующие ее язык и система программирования LuNA. В настоящее время это направление исследований развивается [5]. Подход является универсальным, но проблему исследования и использования ресурса параллелизма алгоритмов не решает. Исследование ресурса параллелизма алгоритмов проводится с помощью их программной реализации [6]. Если решать задачу выявления ресурса параллелизма алгоритма, то использование программы, реализующей алгоритм, может оказаться ошибочным, поскольку программа может не содержать всех реализаций алгоритма, в частности, при ее создании могла быть потеряна реализация, полностью использующая ресурс параллелизма алгоритма.

По-видимому, для решения проблемы исследования ресурса параллелизма алгоритмов и его реализации на параллельных ВС более перспективным является подход, основанный на универсальном описании алгоритма, показывающем ресурс параллелизма в полной мере. Один из таких подходов – концепция Q-детерминанта [7].

Целью данного исследования является описание расширенной модели Q-детерминанта, а также основанного на ней метода, с помощью которого для численного алгоритма можно разработать программу, использующую ресурс параллелизма алгоритма. Использование концепции Q-детерминанта для разработки параллельных программ предлагается впервые.

**Концепция Q-детерминанта.** Для лучшего понимания данной работы опишем кратко основные понятия концепции Q-детерминанта.

Пусть  $\alpha$  – алгоритм для решения алгоритмической проблемы  $\bar{y} = F(N, B)$ , где  $N = \{n_1, \dots, n_k\}$  – множество параметров размерности проблемы или пустое множество,  $B$  – множество входных данных,  $\bar{y} = (y_1, \dots, y_m)$  – множество выходных данных.  $\bar{N}$  – вектор  $(\bar{n}_1, \dots, \bar{n}_k)$ , где  $\bar{n}_i$  – некоторое заданное значение параметра  $n_i$ .  $\{\bar{N}\}$  – множество всевозможных векторов  $\bar{N}$ .  $\mathcal{Q}$  – множество операций, используемых алгоритмом  $\alpha$ .

Любое однозначное отображение  $w: \{\bar{N}\} \rightarrow V$ , где  $V$  – множество всех выражений над  $B$  и  $\mathcal{Q}$ , называется безусловным Q-термом. Если при любом  $\bar{N} \in \{\bar{N}\}$  и любой интерпретации переменных  $B$   $w(\bar{N})$  принимает значение логического типа, то  $w$  называется безусловным



логическим Q-термом. Пусть  $u_1, \dots, u_l$  – безусловные логические Q-термы,  $w_1, \dots, w_l$  – безусловные Q-термы. Множество пар  $(u_i, w_i)$ , где  $i = 1, \dots, l$ , обозначается  $(\bar{u}, \bar{w}) = \{(u_i, w_i)\}_{i=1, \dots, l}$  и называется условным Q-термом длины  $l$ . Счетное множество пар безусловных Q-термов  $(\bar{u}, \bar{w}) = \{(u_i, w_i)\}_{i=1, 2, \dots}$  называется условным бесконечным Q-термом, если  $\{(u_i, w_i)\}_{i=1, \dots, l}$  является условным Q-термом для любого  $l < \infty$ . Если не имеет значения, является ли Q-терм безусловным, условным или условным бесконечным, то его можно называть Q-термом.

Под вычислением безусловного Q-терма  $w$  при интерпретации  $B$  следует понимать вычисление выражения  $w(\bar{N})$  при некотором  $\bar{N} \in \{\bar{N}\}$ . Для вычисления при заданной интерпретации  $B$  и некотором  $\bar{N} \in \{\bar{N}\}$  условного Q-терма  $(\bar{u}, \bar{w}) = \{(u_i, w_i)\}_{i=1, \dots, l}$  необходимо найти такие  $u_{i_0}(\bar{N}), w_{i_0}(\bar{N})$ , что  $u_{i_0}(\bar{N})$  принимает значение *true*, а значение  $w_{i_0}(\bar{N})$  определено. В качестве значения  $(\bar{u}, \bar{w})$  нужно взять  $w_{i_0}(\bar{N})$ . Если установлено, что выражений  $u_{i_0}(\bar{N}), w_{i_0}(\bar{N})$  не существует, то значение  $(\bar{u}, \bar{w})$  для данной интерпретации  $B$  и данного  $\bar{N}$  не определено. Вычисление условного бесконечного Q-терма определяется аналогично.

Предположим, что  $I_1, I_2, I_3$  – подмножества множества  $I = (1, \dots, m)$  такие, что: одно или два из множеств  $I_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) могут быть пустыми,  $I_1 \cup I_2 \cup I_3 = I$ ,  $I_i \cap I_j = \emptyset$  ( $i \neq j; i, j = 1, 2, 3$ ). Множество Q-термов  $\{f_i\}_{i \in I}$  удовлетворяет условиям:  $f_{i_1}$  ( $i_1 \in I_1$ ) – безусловный Q-терм,  $f_{i_1} = w^{i_1}$ ;  $f_{i_2}$  ( $i_2 \in I_2$ ) – условный Q-терм,  $f_{i_2} = \{(u_j^{i_2}, w_j^{i_2})\}_{j=1, \dots, l_{i_2}}$ ,  $l_{i_2}$  является вычислимой функцией параметров  $N$ ;  $f_{i_3}$  ( $i_3 \in I_3$ ) – условный бесконечный Q-терм,  $f_{i_3} = \{(u_j^{i_3}, w_j^{i_3})\}_{j=1, 2, \dots}$ . Если алгоритм  $\alpha$  состоит в том, что для определения  $y_i$  ( $i \in I$ ) требуется вычислить Q-терм  $f_i$ , то множество Q-термов  $y_i$  ( $i \in I$ ) называется Q-детерминантом алгоритма  $\alpha$ , а представление алгоритма в виде  $y_i = f_i$  ( $i \in I$ ) представлением в форме Q-детерминанта.

Реализацией алгоритма  $\alpha$ , представленного в форме Q-детерминанта  $y_i = f_i(i \in I)$ , называется вычисление Q-термов  $f_i(i \in I)$  при заданной интерпретации  $B$  и некотором  $\bar{N} \in \{\bar{N}\}$ . Если реализация такова, что выражения  $W(\bar{N}) = \{w^h(\bar{N})(i_1 \in I_1); u_j^k(\bar{N}), w_j^k(\bar{N})(i_2 \in I_2, j = 1, \dots, l_{i_2}); u_j^k(\bar{N}), w_j^k(\bar{N})(i_3 \in I_3, j = 1, 2, \dots)\}$

вычисляются одновременно и при их вычислении операции выполняются по мере готовности, то реализация называется Q-эффективной. Если алгоритм допускает распараллеливание, то его Q-эффективная реализация полностью использует ресурс параллелизма алгоритма, поэтому является максимально параллельной реализацией алгоритма. Реализация алгоритма  $\alpha$  называется выполнимой, если одновременно необходимо выполнять конечное число операций.

**Расширенная модель концепции Q-детерминанта.** Модель концепции Q-детерминанта позволяет исследовать машинно-независимые свойства численных алгоритмов, но не учитывает особенности их выполнения на параллельных ВС, например, зависимость реализаций алгоритмов от потерь, возникающих при работе с памятью. В связи с этим расширим модель концепции Q-детерминанта путем добавления двух подмоделей, которые представляют собой модели параллельных вычислений, отражающие в абстрактной форме архитектуру целевых ВС: ВС с общей и ВС с распределенной памятью. Исходную модель Q-детерминанта будем называть базовой.

В качестве модели параллельных вычислений, ориентированной на ВС с общей памятью, будем использовать PRAM (Parallel Random Access Machine) [8], которая характеризуется следующими особенностями: существует набор однотипных процессоров; все процессоры имеют общий блок памяти и могут взаимодействовать только через общую память; блок доступа к памяти соединяет процессоры с общей памятью. Издержки на синхронизацию процессоров не учитываются. Все процессоры могут выполнять самостоятельные операции из множества  $Q$  над частью данных в одну единицу времени. Это может приводить к одновременному обращению разных процессоров к одной и той же ячейке памяти. Такая ситуация делает модель нереалистичной, так как на физическом уровне доступ к одной и той же ячейке упорядочивается модулями памяти. Для решения данной проблемы были введены варианты модели, зависящие от допустимых комбинаций одновременного выполнения операций чтения и записи одной ячейки памяти. Для организации параллельных вычислений на многопроцессорных системах с общей памятью в настоящее время

наиболее широко применяется технология OpenMP. Эту технологию будем применять при разработке параллельных программ на основе расширенной модели концепции Q-детерминанта для ВС с общей памятью.

В качестве модели параллельных вычислений, ориентированной на ВС с распределенной памятью, будем использовать модель BSP (Bulk-Synchronous Parallel) [9]. В ней каждый процессор имеет локальную память. Процессоры реализуют взаимодействия с помощью односторонних обменов сообщениями. Параллельный алгоритм в рамках модели BSP представляется как последовательность *супершагов* (superstep), на каждом из которых процессоры выполняют локальные вычисления, обмены сообщениями и барьерную синхронизацию. Модель позволяет выразить суммарное время выполнения всех обменов процессорами на фиксированном супершаге.

Одним из часто используемых в параллельном и распределенном программировании фреймворков является парадигма «мастер-рабочие» [10]. В рамках расширенной модели Q-детерминанта для подмодели, ориентированной на распределенную память, в данном исследовании ограничимся парадигмой «мастер-рабочие» с конфигурацией, включающей одного мастера и множество рабочих, которая является наиболее популярной. В этом случае рассматриваемая модель характеризуется следующими свойствами: имеется множество однородных процессорных узлов с общей памятью; процессорные узлы соединены сетью, по которой можно передавать данные от одного узла другому; среди процессорных узлов выделяется, по крайней мере, один, называемый узлом-мастером, будем обозначать его  $M$ , остальные узлы, по крайней мере один, называются узлами-рабочими, будем обозначать их  $P$ . В соответствии с парадигмой «мастер-рабочие» вычислительный процесс разбивается на несколько супершагов: 1) инициализация, супершаг завершается барьерной синхронизацией; 2) посылка задания от узла  $M$  всем узлам  $P$ ; 3) вычисление на каждом узле  $P$  без обменов с другими узлами; 4) посылка результатов от всех узлов  $P$  узлу  $M$ , супершаг завершается барьерной синхронизацией; 5) слияние на узле  $M$  полученных результатов; 6) завершение, вывод результатов. Супершаги 2 – 5 могут образовывать цикл.

Технология MPI (Message Passing Interface) [11] де-факто является стандартом для параллельного программирования на распределенной памяти. Эту технологию будем применять при разработке параллельных программ на основе расширенной модели концепции Q-детерминанта для ВС с распределенной памятью.

### **Реализация ресурса параллелизма численных алгоритмов.**

Метод проектирования параллельной программы для Q-эффективной реализации алгоритма, использующий расширенную модель концепции Q-детерминанта, состоит из трех этапов:

**Этап 1.** Построение Q-детерминанта алгоритма.

**Этап 2.** Описание плана выполнения Q-эффективной реализации алгоритма.

**Этап 3.** Разработка программы для выполнения Q-эффективной реализации алгоритма в случае, если Q-эффективная реализация выполнима.

Первые два этапа метода используют базовую модель концепции Q-детерминанта, третий этап осуществляется в рамках подмоделей расширенной модели, ориентированных на ВС с общей и распределенной памятью. Полученную с помощью описанного метода программу будем называть Q-эффективной.

Метод апробирован на алгоритмах, Q-детерминанты которых содержат Q-термы различного типа: алгоритм умножения плотных и разреженных матриц, метод Гаусса-Жордана и метод Якоби для решения СЛАУ. Q-эффективные программы разработаны для общей и распределенной памяти. Они используют ресурс параллелизма алгоритмов полностью. Для разработки Q-эффективных программ использовался язык программирования C++. Для общей памяти применялась технология OpenMP, для распределенной MPI и OpenMP. Анализировались динамические характеристики программ. Исследование проводилось на суперкомпьютере «Торнадо ЮУрГУ». Программы для общей памяти выполнялись на одном процессорном узле.

Рассмотрим процесс разработки Q-эффективной программы на примере метода Гаусса-Жордана.

**Этап 1.** Предположим, что система линейных уравнений  $\bar{A}\bar{x}=\bar{b}$  такова, что  $A=[a_{ij}]_{i,j=1,\dots,n}$  – матрица размерности  $n \times n$  с ненулевым

определителем,  $\bar{x}=(x_1,\dots,x_n)^T$ ,  $\bar{b}=(a_{1,n+1},\dots,a_{n,n+1})^T$ . Пусть

$\bar{A}=[a_{ij}]_{i=1,\dots,n; j=1,\dots,n+1}$  – расширенная матрица системы. Метод Гаусса-Жордана состоит из  $n$  шагов.

*Шаг 1.* В качестве ведущего элемента выберем первый ненулевой элемент первой строки  $a_{1j_1}$  ( $1 \leq j_1 \leq n$ ). Получим расширенную матрицу

$$\bar{A}^h = [a_{ij}^h]_{i=1,\dots,n; j=1,\dots,n+1}.$$

Шаг  $k$  ( $2 \leq k \leq n$ ). После шага  $(k-1)$  будет получена расширенная матрица  $\bar{A}^{\dot{h} \dots \dot{j}_{k-1}}$ . В качестве ведущего элемента выберем первый ненулевой элемент строки  $k$   $a_{kj_k}^{\dot{h} \dots \dot{j}_{k-1}}$  ( $1 \leq j_k \leq n$ ). Получим расширенную матрицу  $\bar{A}^{\dot{h} \dots \dot{j}_k} = \left[ a_{ij}^{\dot{h} \dots \dot{j}_k} \right]_{i=1, \dots, n; j=1, \dots, n+1}$ .

После шага  $n$  имеем систему уравнений  $A^{\dot{h} \dots \dot{j}_n} \bar{x} = \bar{b}^{\dot{h} \dots \dot{j}_n}$ , где  $A^{\dot{h} \dots \dot{j}_n} = \left[ a_{ij}^{\dot{h} \dots \dot{j}_n} \right]_{i,j=1, \dots, n}$ ,  $\bar{b}^{\dot{h} \dots \dot{j}_n} = (a_{1,n+1}^{\dot{h} \dots \dot{j}_n}, \dots, a_{n,n+1}^{\dot{h} \dots \dot{j}_n})^T$ . Введем обозначения:  $L_{j_1} = \bigwedge_{j=1}^{j_1-1} (a_{1j} = 0)$ , если  $j_1 \neq 1$ ;  $L_{j_1} = true$ , если  $j_1 = 1$ ;  $L_{j_l} = \bigwedge_{j=1}^{j_l-1} (a_{lj}^{\dot{h} \dots \dot{j}_{l-1}} = 0)$ , если  $j_l \neq 1$ ;  $L_{j_l} = true$ , если  $j_l = 1$  ( $l = 2, \dots, n$ ). Перестановки элементов  $(1, \dots, n)$  могут быть пронумерованы. Пусть  $i$  – номер перестановки  $(j_1, \dots, j_n)$ . Тогда  $u_i = L_{j_1} \wedge (a_{1j_1} \neq 0) \wedge (\bigwedge_{l=2}^n (L_{j_l} \wedge (a_{j_l j_l}^{\dot{h} \dots \dot{j}_{l-1}} \neq 0)))$  и  $w_i^{j_l} = a_{i,n+1}^{\dot{h} \dots \dot{j}_n}$  ( $l = 1, \dots, n$ ) являются безусловными Q-термами. Q-детерминант метода Гаусса-Жордана состоит из  $n$  условных Q-термов, а представление в форме Q-детерминанта имеет вид  $x_j = \{u_i, w_i^{j_1}, \dots, (u_i, w_i^{j_n})\}$  ( $j = 1, \dots, n$ ).

**Этап 2.** Опишем план выполнения Q-эффективной реализации метода Гаусса-Жордана. В соответствии с определением Q-эффективной реализации все безусловные Q-термы  $u_i, w_i^{j_l}$  ( $i = 1, \dots, n!; j = 1, \dots, n$ ) должны вычисляться одновременно. Это требование приводит к тому, что должно выполняться параллельное вычисление Q-термов  $u_i$  ( $i = 1, \dots, n!$ ) и параллельное вычисление матриц  $\bar{A}^{\dot{h}}, \bar{A}^{\dot{h} j_2}, \dots, \bar{A}^{\dot{h} j_2 \dots j_n}$  для любых возможных значений  $j_1, j_2, \dots, j_n$ . Первый цикл вычислений состоит в том, что одновременно начинают вычисляться Q-термы  $u_i$  ( $i = 1, \dots, n!$ ) и матрицы  $\bar{A}^{\dot{h}}$ . Вычисление  $u_i$  начинается с подвыражений  $L_{j_1} \wedge (a_{1j_1} \neq 0)$  ( $j_1 = 1, \dots, n$ ), так как только их операции готовы к выполнению. Только одно из этих подвыражений будет иметь значение *true*. Соответствующее ему значение  $j_1$  обозначим  $r_1$ . Далее прекращается вычисление  $u_i$  и  $\bar{A}^{\dot{h}}$ , для которых  $j_1 \neq r_1$ . Во втором цикле одновременно вычисляются Q-термы  $u_i$ , для которых  $j_1 = r_1$  и матрицы

$\bar{A}^{r_1 j_2}$  ( $j_2 = 1, \dots, n; j_2 \neq r_1$ ). При вычислении  $u_i$  нужно вычислять только подвыражения  $L_{j_2} \wedge (a_{2j_2}^{r_1} \neq 0)$  ( $j_2 = 1, \dots, n; j_2 \neq r_1$ ), так как только их операции готовы к выполнению. Только одно из этих подвыражений будет иметь значение *true*. Соответствующее ему значение  $j_2$  обозначим  $r_2$ . Далее прекращается вычисление  $\bar{A}^{r_1 j_2}$  ( $j_2 = 1, \dots, n; j_2 \neq r_1$ ) и  $u_i$  ( $i = 1, \dots, n!$ ), для которых  $j_2 \neq r_2$ . Следующие  $(n-3)$  цикла вычислений выполняются аналогично. В заключение нужно вычислить единственную матрицу  $\bar{A}^{r_1 \dots r_{n-1} j_n}$  ( $j_n \neq r_1, r_2, \dots, r_{n-1}$ ), так как  $j_n$  имеет единственное значение, обозначим его  $r_n$ . В результате получим решение системы линейных уравнений  $x_{r_j} = a_{j, n+1}^{r_1 \dots r_n}$  ( $j = 1, \dots, n$ ). Q-эффективная реализация метода Гаусса-Жордана выполнима.

**Этап 3.** Полученный на этапе 2 план выполнения Q-эффективной реализации используется для разработки параллельной программы, предназначенной для ВС с общей памятью. При использовании распределенной памяти план выполнения необходимо дополнить планом распределения вычислений по узлам  $P$ . Для метода Гаусса-Жордана он заключается в том, что каждая матрица  $\bar{A}^{j_1}$  ( $j_1 = 1, \dots, n$ ) и соответствующий ей Q-терм  $u_i$  должны вычисляться на своем узле  $P$ . Если количество узлов  $P$  меньше  $n$ , то узел  $P$  может выполнять вычисления для нескольких значений  $j_1$ . Узлы  $P$  получают от узла  $M$  информацию для вычисления матриц  $\bar{A}^{j_1}$  и соответствующих Q-термов  $u_i$ . Результаты вычисления  $r_1$  и  $\bar{A}^{r_1}$  посылаются на узел  $M$ . Каждая матрица  $\bar{A}^{r_1 j_2}$  ( $j_2 = 1, \dots, n; j_2 \neq r_1$ ) и соответствующий ей Q-терм  $u_i$  должны вычисляться на своем узле  $P$ . Узлы  $P$  получают от узла  $M$  информацию для вычисления матриц  $\bar{A}^{r_1 j_2}$  ( $j_2 = 1, \dots, n; j_2 \neq r_1$ ) и соответствующих Q-термов  $u_i$ . Результаты вычисления  $r_2$  и  $\bar{A}^{r_1 r_2}$  посылаются на узел  $M$ . Следующие  $(n-3)$  цикла вычислений выполняются аналогично. Последний цикл состоит в вычислении единственной матрицы  $\bar{A}^{r_1 r_2 \dots r_n}$ , поэтому может выполняться на узле  $M$ .

**Заключение.** Q-детерминант делает численный алгоритм прозрачным с точки зрения структуры и реализации. В частности, он позволяет выразить имеющий параллелизм алгоритма и показать возможный способ его параллельного исполнения. В результате становится возможным получать эффективные реализации алгоритма для реальных параллельных ВС.

### **Библиографический список**

1. Воеводин, В.В. Параллельные вычисления / В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
2. Антонов, А.С. Первая версия Открытой энциклопедии свойств алгоритмов / А.С. Антонов, Вад. В. Воеводин, Вл.В. Воеводин, А.М. Теплов, А.В. Фролов // Сборник «Параллельные вычислительные технологии (PaVT'2015): труды международной научной конференции» (31 марта - 2 апреля 2015 г., г. Екатеринбург). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. – С. 31–42.
3. Воеводин, Вл.В. Параллельные алгоритмы под микроскопом [Электронный ресурс] / Вл.В. Воеводин. – Режим доступа: <http://omega.sp.susu.ru/books/conference/PaVT2016/talks/Voevodin.pdf> [Дата обращения: 3 июля 2017 года].
4. Вальковский, В.А. Синтез параллельных программ и систем на вычислительных моделях / В.А. Вальковский, В.Э. Малышкин. – Новосибирск: Наука, 1988. – 128 с.
5. Malyshkin, Victor E. Distributed Algorithm of Data Allocation in the Fragmented Programming / Victor E. Malyshkin, Vladislav A. Perepelkin, Georgy F. Schukin // Parallel Computing Technologies: 13th International Conference, PaCT 2015, Petrozavodsk, Russia, August 31-September 4, 2015, Proceedings. V.Malyshkin (Ed.). – Springer International Publishing Switzerland, 2015. – LNCS 9251. – P. 80–85.
6. Легалов, А. И. Функциональный язык для создания архитектурно-независимых параллельных программ / А. И. Легалов // Вычислительные технологии, – 2005. – № 1 (10). – С. 71–89.
7. Алеева, В.Н. Анализ параллельных численных алгоритмов: Препринт № 590 / В.Н. Алеева. – Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1985. – 23 с.
8. McColl, W.F. General Purpose Parallel Computing / W.F. McColl // Lectures on Parallel Computation, Cambridge International Series on Parallel Computation. – USA: Cambridge University Press, 1993. – P. 337–391.
9. Valiant, L.G. A bridging model for parallel computation / L.G. Valiant // Communications of the ACM, – 1990. – Vol. 33, № 8. – P. 103–111.

10. Leung, J.Y.-T. Scheduling problems in master-slave model / H. Zhao // *Annals of Operations Research*, – 2008. – Vol. 159, № 1. – P. 215–231.

11. Gropp, W. Using MPI: portable parallel programming with the messagepassing interface / W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum. – Second Edi. – MIT Press, 1999. – 371 p.

## **METADATA**

**Title:** Extended model of the concept of Q-determinant and its application for realization the parallelism resource of numerical algorithms.

**Authors:** V.A. Aleeva, N.V. Valkevich, Yu.S. Lapteva, D.E. Tarasov.

**Abstract:** We describe an extended model of the Q-determinant concept. We show how to use that model for realization the parallelism resource of numerical algorithms on parallel computing systems with shared and distributed memory. Results of research can be used to increase the efficiency of implementing numerical algorithms on parallel computing systems.

**Key words:** Q-determinant of algorithm; algorithm representation as Q-determinant; Q-effective algorithm implementation; parallelism resource of algorithm; parallel computing system; parallel program; Q-effective program.



## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОЙ НЕПРОНИЦАЕМОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЕ<sup>‡</sup>

*М.В.Алексеев, Е.Б. Савенков*

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** Рассматривается математическая модель термомеханического поведения упругой среды, содержащей пустоты, заполненные химически активным веществом. Поведение среды описывается уравнениями термомеханики. Для описания процессов, протекающих в порах, используется сосредоточенная модель, в которой учтены энерговыделение, химические реакции и условия фазового равновесия. Учитывается термодинамическое поведение компонент и фаз. Для численного решения системы уравнений модели предложен вычислительный алгоритм на основе комбинации метода декомпозиции области и метода расщепления по физическим процессам.

**Ключевые слова:** радиационные дефекты, протоны, *n-p*-переход, кремний.

**Введение.** Для корректного описания сложных физико-химических процессов в пласте, происходящих при добыче углеводородов, требуется согласованный учет влияния термодинамических, химических и других факторов, определяющих характер течения многофазного многокомпонентного флюида в пласте.

Большая часть исследований в этой области рассматривает математические модели макроуровня, пригодные для описания происходящих в ходе разработки процессов на больших пространственных масштабах (десятки и сотни метров, километры и десятки километров). Процессы, происходящие на этих масштабах, во многом определяются микроуровнем, то есть на масштабе пор нефтесодержащих пород. В силу того, что окончательного понимания динамики этих процессов, достаточного для предсказательного применения моделей макроуровня, в настоящее время не существует, представляет интерес рассмотрение моделей микроуровня.

Современные методы увеличения нефтеотдачи из нефтематеринских керогеносодержащих пород задействуют тепловые методы воздействия на пласт [1,2]. Корректное описание таких процессов возможно только с учетом расширенного набора механических

---

<sup>‡</sup> Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), проект № 16-29-15078 офи\_м

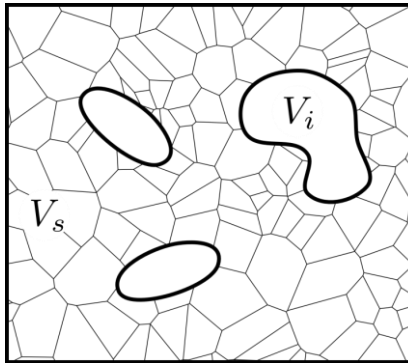
и термохимических механизмов, сопровождающих процесс разработки месторождения.

Среди работ, посвященных анализу процессов в матрице, отличных от чисто гидродинамических, в частности, анализу напряженно-деформированного состояния и теплопроводности, соответствуют работы [3-7].

Основным назначением представленной ниже частной модели является описание термоупругого поведения матрицы *до образования* связанной пористости между пустотами любой природы, содержащими термохимически активное вещество.

**Основные допущения.** Будем считать, что образец среды образован твердым теплопроводным деформируемым скелетом породы (матрицей), внутри которого расположено некоторое число изолированных пустот (пор).

Область пространства, занятую матрицей, будем обозначать  $V_s$ , область пространства, занятую пустотами –  $V_i$ , где  $i = \overline{1, N_v}$ ,  $N_v$  – число пустот. Схема области приведена на рис. 1.



**Рис. 1.** Схема области

Внутри пор находится заданное количество химически активного вещества, состоящего из заданного количества (псевдо)компонент. Эти компоненты могут, в зависимости от термодинамических условий, испытывать химические превращения.

Будем полагать, что процесс деформирования матрицы является медленным, то есть можно пренебречь силами инерции. Вкладом работы

внешних и внутренних упругих сил в уравнение баланса энергии в матрице также будем пренебрегать.

Поскольку размеры керогеносодержащих пор крайне малы, считаем, что особенности пространственного распределения (псевдо)компонент в пустотах и их потоки массы не важны, то есть можно считать, что все компоненты равномерно перемешаны и заполняют весь объем поры. При этом теплопроводность вещества в пустотах существенно больше теплопроводности вещества в матрице. В частности, это позволяет считать, что внутри пустот температура близка к постоянной. В этом случае для описания термодинамического состояния вещества в пустотах можно использовать средние по объему поры температуру и давление.

**Математическая модель. Основные уравнения.** Будем считать, что напряженно-деформированное и термодинамическое состояние скелета породы, занимающего объем  $V_s$ , описывается линейной термоупругой моделью. В условиях малых деформаций напряженно-деформированное состояние линейной термоупругой среды описывается законом сохранения импульса и энергии [8]. Закон сохранения импульса имеет вид:

$$\operatorname{div} \mathbf{T} = \rho \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \in V_s, \quad (1)$$

где  $\rho$  – плотность,  $\mathbf{b}$  – вектор массовой плотности внешних сил,  $\mathbf{T}$  – тензор напряжений, определяющее соотношение для которого имеет вид  $\mathbf{T} = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_T)$ ,  $\mathbf{C}$  – симметричный положительно определенный тензор упругих коэффициентов 4-го ранга,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  – тензор деформаций,  $\boldsymbol{\varepsilon}_T = \mathbf{A}(T - T_0)$ ,  $\mathbf{A}$  – симметричный положительно определенный тензор температурных коэффициентов линейного расширения,  $T$  – температура,  $T_0$  – некоторое опорное значение температуры. Если в ходе процесса отклонения температуры  $T$  от опорного значения  $T_0$  малы, а также мал параметр термоупругой связанности [8], то закон сохранения энергии, записанный в виде уравнения теплопроводности, имеет вид:

$$\rho c_\varepsilon \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{Q} = \rho q, \quad \mathbf{x} \in V_s. \quad (2)$$

Выражение для вектора плотности теплового потока определяется законом Фурье и имеет вид  $\mathbf{Q} = -\boldsymbol{\Lambda} \cdot \nabla T$ , где  $\boldsymbol{\Lambda}$  – симметричный положительно определенный тензор 2-го ранга (тензор коэффициентов теплопроводности).

*Упругие и теплофизические свойства матрицы.* Будем считать, что среда (матрица) является неоднородной, но изотропной.

В этом случае тензор четвертого ранга упругих коэффициентов имеет вид:

$$\mathbf{C} = \lambda \mathbf{I}_2 \otimes \mathbf{I}_2 + 2\mu \mathbf{I}_4^{\text{sym}},$$

где  $\lambda = \lambda(\mathbf{x})$ ,  $\mu = \mu(\mathbf{x})$  – коэффициенты Ламе,  $\mathbf{I}_2$  – единичный тензор второго ранга,  $\mathbf{I}_4^{\text{sym}} = (\mathbf{I}_4 + \bar{\mathbf{I}}_4)/2$  – симметричная часть единичного тензора четвертого ранга. Аналогично, будем считать, что  $\Lambda = \Lambda \mathbf{I}$ , где  $\Lambda = \Lambda(\mathbf{x})$  – коэффициент теплопроводности, и  $\mathbf{A} = A \mathbf{I}$ , где  $A = A(\mathbf{x})$  – коэффициент линейного расширения.

*Закон сохранения массы подвижных компонент.* Уравнение закона сохранения массы для  $i$ -го подвижного компонента имеет вид:

$$\frac{d}{dt}(\phi_j m_i) = Q_i^{(m)}, \quad i = \overline{1, N_f}, \quad (3)$$

где величины  $m_i$  выражаются согласно (16),  $Q_i^{(m)}$  – интенсивность изменения количества компонента  $i$  вследствие химических реакций.

*Закон сохранения массы твердых компонент* имеет вид:

$$\frac{d}{dt}(m_i) = Q_i^{(m)}, \quad i = \overline{N_f + 1, N}. \quad (4)$$

*Закон сохранения энергии* имеет вид:

$$\frac{d}{dt} E = Q_E, \quad E = \sum_{\alpha=W,L,G} b_\alpha S_\alpha U_\alpha + b_S U_S. \quad (5)$$

где  $U_\alpha$  – молярные плотности энергии фаз,  $Q_E = Q_E^{\text{ext}} + Q_E^{\text{ch}}$ ,  $Q_E^{\text{ch}}$  – приток энергии за счет химических реакций,  $Q_E^{\text{ext}}$  – приток энергии из вмещающей объем  $V$  среды (матрицы).

*Термодинамические свойства подвижных фаз и фазовое равновесие.* Для описания термодинамических свойств чистого компонента или псевдокомпонента можно использовать так называемые «кубические» уравнения состояния Ван-дер-Ваальсовского типа, к числу которых относятся распротраненные уравнения состояния Пенга–Робинсона, Редлиха–Квонга, Соаве–Редлиха–Квонга, Зудкевича–Иоффе и др. (см., например, [9-11]). При известном уравнении состояния компонент могут быть построены уравнения состояния фаз, указаны способ вычисления внутренней энергии системы, химических потенциалов, энтальпий и т.д. Остановимся несколько подробнее на способе расчета фазового равновесия системы. Пусть изолированная система состоит из нескольких фаз, способных обмениваться энергией и веществом между собой, и находится в равновесном состоянии. В таком случае выполняются следующие условия [9]:

$$T^\alpha = T^\beta, \quad P^\alpha = P^\beta, \quad \mu_i^\alpha = \mu_i^\beta, \quad \alpha \neq \beta,$$

где  $\mu_i^\alpha$  – химический потенциал компонента  $i$  в фазе  $\alpha$ . Давление  $P$  и температура  $T$  в равновесном состоянии одинаковы для всех фаз и системы в целом, поскольку  $\alpha$  может быть любой фазой системы. Химические потенциалы каждого компонента  $\mu_i^\alpha$  являются функциями от  $T$ ,  $P$  и состава смеси. Условия равенства температур, давлений и химических потенциалов являются необходимыми, но не достаточными условиями, т.к. при их выполнении система может находиться в метастабильном состоянии.

Расчет фазового равновесия является достаточно сложной, но стандартной задачей, для решения которой предложен целый ряд эффективных вычислительных алгоритмов.

**Алгоритм численного решения задачи.** После того, как в области пространства, занятом матрицей, введена расчетная сетка и проведена аппроксимация задачи по времени, может быть построена единая система дискретных уравнений, которая включает в себя аппроксимации как уравнений для распределенных параметров, так и уравнений относительно сосредоточенных параметров.

Полная схема решения задачи может иметь следующий вид (для простоты рассмотрим случай единичной поры).

Пусть первичными переменными задачи являются: поле перемещений точек матрицы  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ , поле температуры матрицы  $T(\mathbf{x}, t)$ , температура  $T_f(t)$  и давление  $P(t)$  в поре, объем поры  $V_f(t)$ , масса компонентов в поре,  $m_i$ ,  $i = \overline{1, N_c}$ , объемные концентрации (насыщенности) фаз  $S_s^\alpha$ ,  $S_\alpha$ ,  $\alpha = W, L, G$  и концентрации  $x_{i\alpha}$  компонент в фазах.

1. Расчет температурного поля  $\hat{T}$  в матрице путем интегрирования на отрезке  $[t, t + \Delta t]$  уравнения теплопроводности с независимым от времени граничным условием при известной температуре в поре  $T_f$ , соответствующей моменту времени  $t$ .

2. Расчет поля перемещений  $\hat{\mathbf{u}}$  в матрице в момент времени  $t + \Delta t$  как решение уравнения теории упругости при заданной температуре  $\hat{T}$  в матрице и заданном давлении  $P$  в поре, соответствующем моменту времени  $t$ .

3. Расчет теплового потока из матрицы в пору, исходя из распределения температуры  $\hat{T}$  в матрице, по формулам.

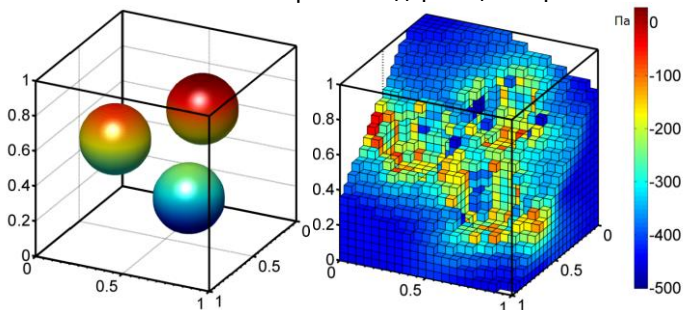
4. Расчет объема  $\hat{V}_f$  поры, исходя из определенных на шаге 2 перемещений  $\hat{u}$ .

5. Расчет количества вещества компонентов в поре на отрезке  $[t, t + \Delta t]$  при известных температуре вещества в поре  $T_f$  и компонентном составе фаз.

6. Расчет значения энергии в поре интегрированием уравнения энергии на отрезке  $[t, t + \Delta]$  при известных на момент времени  $t$  термодинамических параметрах в поре.

7. Расчет по вычисленным на момент времени  $t + \Delta t$  значениям энергии в поре, количеству вещества и объему поры: температуры вещества в поре, давления в ней, насыщенности фаз и их компонентного состава.

**Результаты.** В численных экспериментах расчетной областью являлся куб породы с ребром 1мм с тремя керогеносодержащими сферическими порами(рис. 2а). Задавались начальная температура породы и компонентный состав керогеносодержащих пор.



**Рис. 2.** а) расчетная область, б) максимальные главные напряжения образца в результате численного эксперимента

В результате моделирования были получены поля напряжений, температур, а также фазовые и компонентные составы веществ в керогеновых ячейках.

**Заключение.** В работе представлена математическая модель поведения термоупругой среды, в которой расположено некоторое количество пор, заполненных химически активным веществом. Поведение скелета описывается пространственно-трехмерными уравнениями термоупругости. Поведение вещества в порах описывается нульмерной моделью, включающей в себя уравнения химической

кинетики, рассматриваемые совместно с законом сохранения энергии и условиями фазового равновесия. Предложен алгоритм численного решения, основанный на методах расщепления по физическим процессам и декомпозиции области.

### **Библиографический список**

1. L.W. Lake. Enhanced Oil Recovery. – Society of Petroleum Engineers, 2010, 550 p.
2. L.W. Lake, R. Johns, B. Rossen and G. Pope. Fundamentals Enhanced Oil Recovery. – Society of Petroleum Engineers, Digital Edition, 2014, 498 p.
3. E. Catalano, B. Chareyre, A. Cortis, E. Barthelemy. A pore-scale hydro-mechanical coupled model for geomaterials // II International Conference on Particle-based Methods – Fundamentals and Applications (PARTICLES 2011), 2011.
4. E.H. Saenger, F. Enzmann, Y. Keehm, H. Steeb. Digital rock physics: Effect of fluid viscosity on effective elastic properties // Journal of Applied Geophysics, 2011, v.74, p.236-241.
5. H. Cao, A. Boyd, V. Da Silva Simoes. Numerical simulation of the elastic properties of porous carbonate rocks // 14th International Congress of the Brazilian Geophysical Society, 2013, Paper SBGf-4064. [http://sys2.sbgf.org.br/congresso/abstracts/trabalhos/sbgf\\_4064.pdf](http://sys2.sbgf.org.br/congresso/abstracts/trabalhos/sbgf_4064.pdf).
6. R. Sain. Numerical simulation of pore-scale heterogeneity and its effects on elastic, electrical and transport properties // PhD Thesis, Stanford University, 2010.
7. H. Lan, C.D Martin., B. Hu. Effect of heterogeneity of brittle rock on micromechanical extensile behavior during compression loading // J. Geophys. Res., 2010, v.115, B01202.
8. В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин. Математические модели термомеханики. – М.: Физматлит, 2002, 168 с.; V.S. Zarubin, G.N. Kuvyrkin. Mathematical models of thermomechanics. – Moscow, Fizmatlit, 2002, 168 p.
9. О.Ю. Баталин, А.И. Брусиловский, М.Ю. Захаров. Фазовые равновесия в системах природных углеводородов. – М.: Недра, 1992, 272 с.; O.Yu. Batalin, A.I. Brusilovsky, M.Yu. Zakharov. Phase equilibrium in natural hydrocarbon systems. – Moscow, Nedra, 1992, 272 p.
10. R.C Reid., J.M.Prausnitz, T.K. Sherwood. The properties of gases and liquids. (3rd Ed.) – McGraw-Hill, New York, 1977.
11. J.M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E.G. de Azevedo. Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria. (3rd Ed.). – Prentice Hall, 1998, 864 p.

## METADATA

**Title:** Mathematical modeling thermomechanical processes in reactive impermeable porous medium.

**Authors:** M.V.Alekseev, E.B.Savenkov

**Abstract:** We consider self-consistent mathematical model for thermomechanical behavior of a linear elastic medium which contains voids filled with chemically active substance. The medium is described by linear thermomechanics equations. Substance in voids is described by lumped model which accounts for energy balance, chemical reactions and phase equilibrium conditions. For numerical solution of the complete coupled system of equations we propose an algorithm based on combination of domain decomposition method and physical splitting approach.

**Key words:** thermomechanics, phase equilibrium, chemical kinetics, chemical reactions.



## О ДЕКАРТОВЫХ СЕТКАХ В НЕКОТОРЫХ АДАПТИВНЫХ АЛГОРИТМАХ АЭРОДИНАМИКИ<sup>§</sup>

*А.Л.Афендииков, В.С.Никитин*

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** При численном решении задач гидрогазодинамики используется дискретизация, когда область решения разбивается на счетные ячейки с помощью надлежащим образом подобранной сетки, а непрерывная задача сводится к дискретной, аппроксимирующей дифференциальные операторы и краевые условия.

**Ключевые слова:** гидрогазодинамика; пространственные сетки; дискретизация; алгоритм; параллельная реализация.

Гидро- и газовая динамика имеют критически важные научные и технические приложения. При этом наряду с экспериментальными и строгими математическими результатами, все большую роль играет математическое моделирование, основанное на применении параллельных суперкомпьютерных систем. Зачастую исследуемые задачи характеризуются сильным различием пространственно-временных масштабов, для разрешения которых требуются не только высокоточные численные методы, но и весьма подробные пространственные сетки в геометрически сложных областях, границы которых могут зависеть от времени. Для таких задач до половины времени, необходимого для того, чтобы смоделировать и провести расчет, тратится на генерацию начальной сетки и последующую ее модификацию (проводимую обычно вручную) с целью получения решения адекватного качества. Поэтому одной из актуальных задач является разработка методов автоматической адаптации сеток.

Отметим, что для математических моделей, описывающих указанные явления и процессы, нет строгой математической теории, выделяющей подходящие функциональные компакты, в которых лежат решения соответствующих начально-краевых задач. Поэтому соображения, лежащие в основе аппроксимации решений и построения дискретных моделей и алгоритмов, должны служить достижению компромисса между физическими представлениями о характере разыскиваемых решений (прежде всего гладкостью и многомасштабностью), оптимальностью по числу операций,

---

§ Работа поддержана грантом РФФ 17-71-30014

возможностью массивной параллелизации, а также спецификой архитектуры и элементной базы (CPU, GPU) суперкомпьютера, используемого для проведения расчетов.

При численном решении задач гидрогазодинамики используется дискретизация, когда область решения разбивается на счетные ячейки с помощью надлежащим образом подобранной сетки, а непрерывная задача сводится к дискретной, аппроксимирующей дифференциальные операторы и краевые условия. В настоящее время существует несколько подходов к решению этой задачи.

Первый – стандартный метод связанных сеток, второй – метод химерных (chimera) сеток, где основная сетка строится во всей расчетной области, а сетка второго уровня строится отдельно около каждого твердого объекта поверх основной сетки. Третий подход – метод декартовых сеток, где расчетная область выбирается простейшей формы, например, в виде куба, в котором строится регулярная декартовая сетка [2]–[4]. Поверхности тел, находящихся в области течения, пересекают отдельные ячейки. Таким образом, возникают два типа счетных ячеек: нормальные, целиком лежащие в области, занятой газом, и усеченные, имеющие форму некоторого многогранника, зависящего от топологии пересечения. Дискретизация уравнений выполняется для ячеек как нормального, так и усеченного типа методом конечного объема (см., например, [1]).

Несмотря на наличие известных коммерческих (StarCD, StarCCM+, CFX, FLuent) и открытых (Open FOAM) CFD-пакетов на неструктурированных сетках, алгоритмы на декартовых сетках на основе метода вложенной границы сохраняют ряд конкурентных преимуществ. Это вызвано, в первую очередь, простотой генерации расчетной сетки и дискретизации уравнений движения, а также открывающимися возможностями использования параллельных суперкомпьютеров.

В работе [5] использован следующий формат описания двумерной сетки с возможностью двухуровневой локальной адаптации. Каждая исходная ячейка может разбиваться только на четыре равных делением пополам по каждому из направлений. При этом анализ проводился глобально по всей сетке.

В работе [6] было использовано свойство локальности вейвлетного преобразования и была взята первоначальная прямоугольная сетка размера  $M \times N$  с ячейками, допускающими многоуровневое разбиение.

Далее каждая ячейка описывается своим уровнем (для базовой сетки размера  $M \times N$  он равен нулю), виртуальным положением на этом уровне – парой параметров, показывающих, какую строку и столбец

занимала бы ячейка в случае полного заполнения данного уровня. Кроме того, она имеет поле-флаг, показывающее, является ли данная ячейка расчетной и конечной (листом соответствующего дерева) или подразбитой на 4 ячейки следующего уровня. Для подразбитой ячейки присутствуют указатели на потомков данной ячейки (т.е. на те 4 ячейки, на которые подразбита данная). Для конечной ячейки эти указатели пустые, но зато есть указатель на структуру, описывающую реальную физическую ячейку. Она хранит в себе координаты ячейки и газодинамические характеристики внутри нее. В случае фиктивной ячейки (разбитой) этот указатель, естественно, нулевой. Такая структура данных позволяет описывать адаптивные сетки совершенно различных конфигураций без использования лишней памяти. Именно этот подход используется и в текущей работе.

Для автоматического локального измельчения и укрупнения сетки в соответствии с локальными свойствами течения используется сеточный анализатор на основе вейвлетного анализа с вейвлетами, построенными по неравномерным В-сплайнам.

**Алгоритм обхода сетки и поиска соседей.** Обход квадратного массива (матрицы) деревьев, описанных выше, осуществляется простой процедурой: мы обходим в двойном цикле по всем элементам базовой сетки. В случае, когда текущая ячейка является конечной, применяем целевую функцию к ней, в противном случае вызываем ее же для всех четырех потомков данной ячейки.

Для поиска соседей удобно использовать еще одну особенность сеток описанного формата: ячейка 1-го уровня с индексами  $(i, j)$  обязательно имеет своим родителем ячейку с индексами  $([i/2], [j/2])$ , где  $/$  – операция целочисленного деления, а нумерация обоих индексов начинается с нуля,  $i=0, M-1; j=0, N-1$ . Тогда, например, для случая двух уровней соседей текущей ячейки по каждой из осей можно получить простым перебором на основе половинного деления и умножения индексов.

**Схема газодинамического расчета на неструктурированной сетке.** Если расчетная стека состоит одновременно из ячеек разных уровней, она становится неконформной и рассчитывать суммарные потоки через ячейку приходится по более сложной формуле:

$$\mathbf{Q}_{vl,i,j}^{n+1} = \mathbf{Q}_{vl,i,j}^n - \frac{\Delta t}{V_{vl,i,j}} \left[ \sum_{\sigma x} s_{\sigma} \mathbf{F}_{\sigma} + \sum_{\sigma y} s_{\sigma} \mathbf{F}_{\sigma} \right], \quad (1)$$

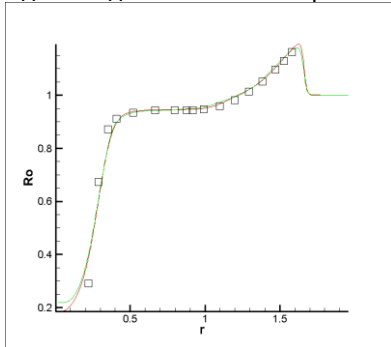
где  $Q_{l,i,j}^n$  – значение вектора консервативных переменных в ячейке

уровня  $l$  с виртуальными индексами  $(i, j)$  на этом уровне на временном шаге с номером  $n$ . Потоки, умноженные на соответствующие площади частей границы, по каждому из направлений суммируются вдоль всей границы ячейки.

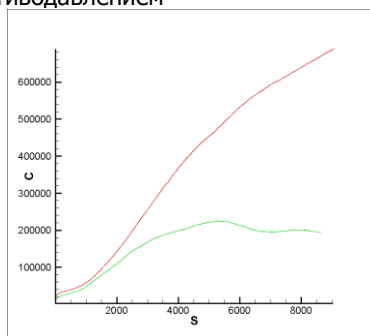
При измельчении сетки всем потомкам сносится значение примитивного вектора переменных  $(\rho, U_x, U_y, p)$ , при объединении четырех ячеек в одну в качестве значения консервативного вектора переменных в ячейке берется среднее арифметическое консервативных векторов в ячейках-потомках.

**Индикаторы гладкости решения заданного на неравномерной сетке на основе вейвлет-анализа.** При работе с многоуровневыми расчетными сетками возникает потребность в индикаторах, сигнализирующих о необходимости перестроения неравномерной сетки. Если в работах [5-7] для анализа использовалась переинтерполяция на равномерную сетку, то в настоящей работе предложен подход, где анализ проводится непосредственно на неравномерной сетке, с использованием формулы де Бура для построения В-сплайнов на неравномерной сетке [8].

Приведем для сравнения результаты двумерного моделирования задачи Седова о сильном взрыве с противодавлением



**Рис. 1.** Приведена зависимость плотности от радиуса в двумерной задаче о сильном взрыве с противодавлением. Квадратикам соответствуют данные из [9], красным выделена зависимость для расчета с равномерным, а зеленым с



**Рис. 2.** На рисунке приведена зависимость числа ячеек от номера шага

неравномерным анализаторами.

Приведенные данные демонстрируют практическое совпадение результатов расчетов при выигрыше во времени расчета приметно на порядок, за счет более эффективного неравномерного анализа и многократного уменьшения числа расчетных ячеек. Это связано с тем, что равномерный анализатор не показывает адекватные результаты в областях с локальной неравномерностью сетки. В результате завышения индикатора гладкости решения образуется много лишних ячеек, и кроме того в областях, где больше не требуется подробная сетка неэффективно происходит ее огрубление, что демонстрируется постоянным ростом числа ячеек в равномерном случае.

### **Библиографический список**

1. Афендииков, А.Л. и др. Адаптивные вейвлетные алгоритмы для решения задач гидро- и газовой динамики на декартовых сетках. — М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. — 228 с.
2. Chetverushkin B.N., Churbanova N.G., Trapeznikova M.A., Sukhinov A.A., Malinovskij A.A. Adaptive cartesian mesh refinement for simulating multiphase flows in porous media. *Computational methods in applied mathematics*, Vol.8(2008), No.2, pp.101–115
3. A.M. Khokhlov. Fully threaded tree for adaptive refinement fluid dynamics simulations. arXiv:astro-ph/9701194v1 25 Jan 1997.
4. D. Hartmann, M. Meinke, W. Schroder. A strictly conservative Cartesian cut-cell method for compressible viscous flows on adaptive grids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 200, pp. 1038-1052, 2011.
5. Афендииков А.Л., Меркулов К.Д., Пленкин А.В. Динамическая локальная адаптация сеток на основе вейвлет-анализа в задачах газовой динамики //Препринты Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. – 2014. – № 99. – 26 с.
6. Афендииков А.Л., Меркулов К.Д., Пленкин А.В. Сравнительный анализ подходов к численному моделированию газодинамических течений на двухуровневых адаптивных расчетных сетках // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2015. № 95. 24 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-95>
7. Афендииков А. Л., Луцкий А. Е., Меньшов И. С., Меркулов К.Д., Пленкин А.В., Ханхасаева Я.В. Алгоритм динамической локальной адаптации сеток на основе вейвлет-анализа с использованием метода свободной границы // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, № 94, 2015. 20 с.

8. C. de Boor A Practical Guide to Splines (revised ed.), Springer-Verlag, New York, (2001).

9. Кестенбойм Х.С., Росляков Г.С., Чудов Л.А. Точечный взрыв: методы расчета : таблицы / АН СССР, Ин - т проблем механики. -М.: Наука, 1974. -255 с.

## **METADATA**

**Title: About decard grides in some adaptive algorithms of aerodynamics.**

**Authors: A.L. Afendikov, V.S. Nikitin**

**Abstract:** In numerical solution of hydro-gas dynamics problems the discretization is used when the solution domain is divided into counting cell by using an adequate grid, and the continuous problem is reduced to discrete problem that approximating differential operators and boundary conditions.

**Key words:** hydro-gas dynamics; spatial grids; discretization; algorithm; parallel implementation.

## ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА БЕНЗИЛИДЕНБЕНЗИЛАМИНА

И.В. Ахметов<sup>2</sup>, И.М. Губайдуллин<sup>1,2</sup>, З.Р. Шакирова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт нефтехимии и катализа РАН,

<sup>2</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет  
г. Уфа, Россия

**Аннотация.** В данной работе разработана кинетическая модель реакции синтеза бензилиденбензиламина. Найдены оптимальные константы скорости стадий и энергии активации. При поиске кинетических параметров использовалась технология параллельных вычислений OpenMP. Определено эффективное число потоков, при котором решение обратных задач наиболее результативно.

**Ключевые слова:** кинетическая модель; константы скорости; обратная задача; параллельные вычисления; OpenMP.

Для понимания физико-химической сущности каталитической реакции, последующего математического моделирования каталитического процесса и определения условий его промышленной реализации необходима, прежде всего, разработка его кинетической и математической моделей [1].

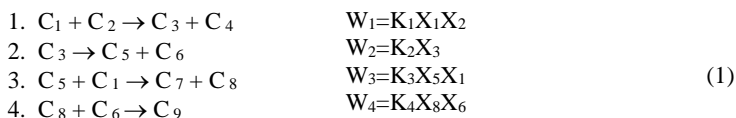
Основополагающей, базисной основой моделирования каталитических процессов являются, прежде всего, детальные исследования физико-химической сущности химических реакций, поскольку полученные в натуральных и уточненные в вычислительных экспериментах количественные характеристики позволят построить кинетические модели, которые станут надежной основой последующих разработок.

Кинетическая модель процесса представляет собой совокупность элементарных стадий, реакций и уравнений, характеризующих зависимость скорости химического превращения от параметров реакции: давления, температуры, концентраций реагентов и др. Подобные зависимости определяются на основе экспериментальных данных, полученных в области изменения параметров реакции, охватывающей практические условия ведения процесса в промышленных условиях. Построенная таким образом кинетическая модель является первым уровнем модели каталитического реактора и базисом для решения статических и динамических задач, возникающих при разработках технологических процессов.

Разработка кинетической модели, приведенная в работе, основана на экспериментальных данных по синтезу бензилиденбензиламина

реакцией бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  [2].

На основе анализа экспериментальных данных и результатов их математической обработки предложена следующая схема химических превращений синтеза бензилиденбензиламина и соответствующие кинетические уравнения:



где  $C_i$  – концентрации компонентов, кмоль/м<sup>3</sup>:  $C_1 = \text{C}_7\text{H}_9\text{N}$  – бензиламин,  $C_2 = \text{CCl}_4$  – четыреххлористый углерод,  $C_3 = \text{C}_7\text{H}_8\text{NCl}$  – хлорбензиламин,  $C_4 = \text{CHCl}_3$  – хлороформ,  $C_5 = \text{C}_7\text{H}_7\text{N}$  – 1-фенилметанимин,  $C_6 = \text{HCl}$  – хлористый водород,  $C_7 = \text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{N}$  – бензилиденбензиламин,  $C_8 = \text{NH}_3$  – аммиак,  $C_9 = \text{NH}_4\text{Cl}$  – хлористый аммоний.

В (1)  $X_i$  – концентрации компонентов (мольные доли);  $K_j$  – приведенная кинетическая константа скорости  $j$ -ой реакции (ч<sup>-1</sup>).

Кинетические уравнения схемы превращений (1) проанализированы в рамках закона действующих масс. Корректным описанием лабораторного реактора с мешалкой является модель идеального смешения.

Суммарный баланс изотермического реактора идеального смешения для  $i$ -того компонента в элементе объема реактора ( $\Delta V$ ) для варианта, когда мольная плотность газа или жидкости (или суммарная концентрация  $C$ , кмоль/м<sup>3</sup>) изменяется во времени, т.е. когда реакция протекает с изменением числа молей, определяется за счет изменения:

– было в момент времени ( $t$ ):  $C_i(t) \cdot \Delta V = C(t) \cdot X_i(t) \cdot \Delta V$

– стало в момент времени ( $t + \Delta t$ ):

$$C_i(t + \Delta t) \cdot \Delta V = C(t + \Delta t) \cdot X_i(t + \Delta t) \cdot \Delta V$$

– изменилось за время ( $\Delta t$ ) за счет химических реакций:

$$\left( \sum_{j=1}^J v_{ij} W_j \right) \cdot \Delta V \cdot \Delta t$$

где  $C_i$  – концентрация  $i$ -того компонента, кмоль/м<sup>3</sup>;  $X_i = C_i / C$  – концентрация  $i$ -того компонента в мольных долях;  $W_j$  – скорости химического превращения, кмоль/(м<sup>3</sup>·ч).

Заметим, что приведенные размерности переменных могут, в зависимости от интервалов исследования, изменяться: например, вместо



стандартного объема ( $\text{м}^3$ ) может использоваться (л) или ( $\text{мл}=\text{см}^3$ ), вместо веса (кг) – (г), вместо количества вещества (кмоль) – (моль или ммоль), вместо времени (ч) – (с) или (мин).

Тогда, материальный баланс изотермического реактора идеального смешения описывается уравнением:

$$C(t) \times X_i(t) \times DV - C(t + Dt) \times X_i(t + Dt) \times DV + \left( \sum_{j=1}^J v_{ij} W_j \right) \cdot \Delta V \cdot \Delta t = 0$$

или

$$C(t) \times X_i(t) - C(t + Dt) \times X_i(t + Dt) + \left( \sum_{j=1}^J v_{ij} W_j \right) \Delta t = 0.$$

В пределе, при  $\Delta t$ , стремящемся к нулю, получим систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{d(Cx_i)}{dt} = \sum_{j=1}^J v_{ij} W_j \quad (2)$$

с начальными условиями –  $t = 0$ :  $X_i = X_i^o$ ,  $C = C_o$ .

Система уравнений (2) замыкается условием нормировки по компонентам реакционной среды:  $\sum_{i=1}^I X_i = 1$ .

При кинетических исследованиях экспериментальные данные получают, как правило, в изотермических условиях при постоянном давлении. Для газофазных реакций мольная плотность газа ( $C_o$ ) может быть рассчитана из уравнения состояния, например, уравнения

Менделеева-Клапейрона для идеальных газов:  $PV = \frac{m}{M} RT = nRT$  или

$$P = C_o RT, C_o = P / (RT), \text{ где } C_o = \frac{m}{MV} = \frac{n}{V}.$$

Начальная мольная плотность жидкости ( $C_o$ ) постоянна при любых температурах.

Тогда, разделив (2) на  $C_o$ , получим систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{d(\bar{N}x_i)}{dt} = \sum_{j=1}^J v_{ij} \omega_j \quad (3)$$

где  $\bar{N} = C / C_o$  – относительное изменение числа молей реакционной среды,  $\omega_j = W_j / C_o$  – приведенные скорости химических реакций.

Суммируя уравнения (3) с учетом условия нормировки, получим:

$$\frac{d\bar{N}}{dt} = F_N = \sum_{j=1}^J \omega_j \sum_{i=1}^I v_{ij} \quad (4)$$

Продифференцировав уравнения (4), получим:

$$x_i \frac{d\bar{N}}{dt} + \bar{N} \frac{dx_i}{dt} = F_i = \sum_{j=1}^J v_{ij} \omega_j \quad (5)$$

Умножим (4) на  $X_i$  и вычтем из (5). Тогда, с учетом правой части уравнения (4), получим систему дифференциальных уравнений материального баланса периодического реактора идеального смешения (6) – (7):

$$\frac{d\bar{N}}{dt} = F_N, \quad F_N = \frac{1}{V_0} \sum_{j=1}^J \delta_j \omega_j, \quad \delta_j = \sum_{i=1}^I v_{ij} \quad (6)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{F_i - X_i F_N}{\bar{N}} \quad (7)$$

с начальными условиями: при  $t=0$  –  $X_i = X_i^0$ ,  $\bar{N} = 1$ , где  $\bar{N} = C/C_0$  – относительное изменение числа молей реакционной смеси;  $C$  и  $C_0$  – мольная плотность и ее начальное значение, моль/л;  $X_i = C_i/C$  – концентрации компонентов (мольные доли);  $\omega_j = W_j/C_0$  – приведенные скорости реакций,  $\text{ч}^{-1}$ ;  $W_j$  – скорость  $j$ -ой стадии, моль/(л·ч);  $J$  – число стадий химического превращения;  $I$  – количество веществ.

Правые части систем уравнений (6) – (7) для реакции синтеза бензилиденбензиламина реакцией бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  имеют следующий вид:

$$F_1 = -\omega_1 - \omega_3; F_2 = -\omega_1; F_3 = \omega_1 - \omega_2; F_4 = \omega_1; F_5 = \omega_2 - \omega_3; F_6 = \omega_2 - \omega_4;$$

$$F_7 = \omega_1; F_8 = \omega_3 - \omega_4; F_1 = \omega_4; F_n = \omega_2 - \omega_4.$$

Расчет кинетических параметров химической реакции в присутствии металлокомплексного катализатора – процесс длительный. Для ускорения решения обратной задачи химической кинетики была разработана программа на языке C++ с технологией многопоточного программирования OpenMP [3, 4].

Для параллельного решения обратной задачи химической кинетики наиболее эффективным является генетический алгоритм, основу которого составляет заимствованная из биологии идея селекции, то есть преимущественного размножения наиболее приспособленных особей [5]. Практическое применение генетического алгоритма во всех известных случаях приводило к положительным результатам [6, 7, 8]. Показано, что генетический алгоритм, в отличие от градиентных методов минимизации, является универсальным методом для поиска оптимума

независимо от сложности функций [5]. Последовательность операций, составляющих основу генетического алгоритма, следующая.

На первом шаге алгоритма случайным образом создается начальная популяция, состоящая из  $N$  особей ( $N$  точек в пространстве кинетических параметров, каждая точка имеет  $m$  координат – значений параметров). На этапе мутации особи популяции изменяются в соответствии с заранее определенной операцией мутации, в качестве которой был взят покоординатный/параболический спуск из точек пространства. На этапе селекции из всей популяции выбирается определенная ее доля, которая останется «в живых» на этом этапе эволюции. Вероятность выживания особи зависит от значения функции приспособленности для этой особи; в качестве функции приспособленности выступает функционал невязки. Доля выживших  $s$  является параметром генетического алгоритма, и по итогам отбора из  $N$  особей популяции в итоговую популяцию войдут  $sN$  особей. В рассматриваемом случае  $s=1/2$ . При формировании нового поколения используется скрещивание – чтобы произвести потомка, нужны два родителя. Для формирования новой точки в пространстве параметров в качестве родителей выбирается одна точка из «выживших» и одна из «погибающих», и скрещивание производится путем выбора  $m/2$  координат от первой точки и оставшихся – от второй; при этом потомок наследует черты обоих родителей. Особи для размножения выбираются из всей популяции, а не из выживших на первом шаге элементов с целью исключения возможности деградации популяции. Этот набор действий повторяется итеративно, так моделируется «эволюционный процесс», продолжающийся несколько жизненных циклов (поколений), пока не будет выполнен критерий остановки алгоритма, в качестве которого выступает любое из условий:

- 1) нахождение глобального либо субоптимального решения;
- 2) исчерпание числа поколений, отпущенных на эволюцию;
- 3) исчерпание времени, отпущенного на эволюцию.

Распараллеливание вычислительного процесса производится на стадии начального заполнения, когда заданные псевдослучайно точки в пространстве параметров равномерно распределяются по потокам. Мутация осуществляется каждым потоком независимо; обмен данными производится на этапе селекции. При этом время автономной работы процессов значительно превышает время межъядерных взаимодействий, что обуславливает эффективность данного алгоритма (рис. 1).

Для решения системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (6) – (7) был выбран модифицированный метод Кутты-Мерсона пятого порядка точности.

Численные значения найденных констант скоростей стадий и энергий активации для синтеза бензилиденбензиламина приведены в табл. 1.



Рис. 1. Генетический алгоритм

Константы ( $K_i$ ) являются некоторыми приведенными величинами, которые имеют размерность обратного времени и связаны с истинными константами ( $k_i$ ) соотношениями:

$$K_i = k_i \cdot C_o, \quad (i = 1, 3, 4), \text{ размерность } k_i (\text{л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{ч}^{-1}); \quad k_2 = K_2 (\text{ч}^{-1}).$$

Таблица 1

Кинетические параметры для синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

Кинетические константы при температуре 23°C, ч <sup>-1</sup>		E <sub>i</sub> , ккал/моль
K <sub>1</sub>	0,015	10,59
K <sub>2</sub>	4,67	7,73
K <sub>3</sub>	13,39	1,59
K <sub>4</sub>	0,6	0,42

Для данной реакции приведенные и истинные константы связаны соотношениями:  $K_i = k_i \cdot C_o$ , ( $i = 1, 2, 3, 4$ ), размерность  $k_i$  ( $\text{л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{ч}^{-1}$ );  $k_5 = K_5 (\text{ч}^{-1})$ .

В табл. 1 приведены константы при некоторой опорной температуре ( $T_{\text{оп}}$ ), в качестве которой для синтеза бензилиденбензиламина выбрана  $T_{\text{оп}} = 23^\circ\text{C}$  или 296 К. Пересчет констант для любой температуры производится через выбранную опорную температуру по формулам (8):

$$K_i(T_{\text{оп}}) = K_i^o \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{RT_{\text{оп}}}\right), K_i(T) = K_i(T_{\text{оп}}) \cdot \exp\left[\frac{E_i}{RT_{\text{оп}}}\left(1 - \frac{T_{\text{оп}}}{T}\right)\right]; \quad (8)$$

Оценка эффективности распараллеливания при тестировании программы показала, что параллельная программа работает достаточно эффективно при увеличении числа потоков. При решении обратной задачи для реакции синтеза бензилиденбензиламина по всем экспериментальным данным общее время расчета составило: на 1 ядре – 60 часов, с использованием 18 потоков – 3,5 часа (рис. 2 и рис. 3).

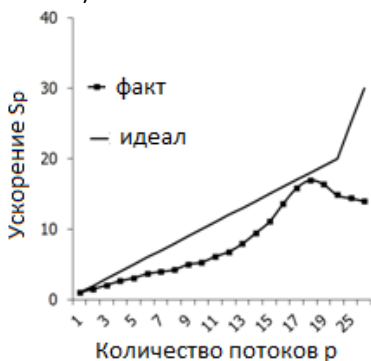


Рис. 2. Ускорение

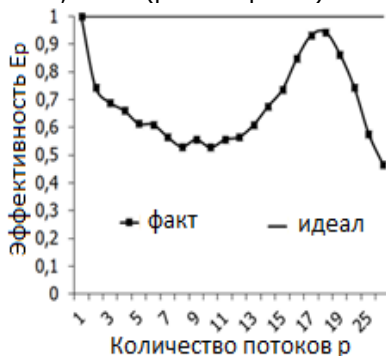


Рис. 3. Эффективность

### Библиографический список

1. Слинко М.Г. Моделирование химических реакторов / М.Г. Слинко. – Новосибирск: Наука, 1968. – 96 с.
2. Хуснутдинов Р.И. Синтез N-бензилиденбензиламина из бензиламина при действии железосодержащих катализаторов в  $\text{CCl}_4$  /

Р.И. Хуснутдинов, А.Р. Байгузина, Р.И. Аминов // Журнал органической химии. – 2012. – Т. 48 (8) – Вып. 8 – С. 1063-1065.

3. Ахметов И.В. Многоядерность в обратных кинетических задачах / И.В. Ахметов // В сборнике: Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений Труды Международной суперкомпьютерной конференции. – 2012. – С. 656-661.

4. Ахметов И.В. Разработка кинетических моделей реакций синтеза ароматических и гетероциклических соединений на основе многоядерных вычислительных систем / И.В. Ахметов // В сборнике: Параллельные вычислительные технологии 2013 (ПаВТ'2013) Труды международной научной конференции. Ответственные за выпуск: Л.Б. Соколинский, К.С. Пан. – 2013. – С. 268-277.

5. Никитин А.В. Эволюционная модель оптимизации модульной ассоциативной памяти для машин потока данных на основе генетического алгоритма / А.В. Никитин, Л.И. Никитина // Программирование, 2002. – № 6. – С. 31–42.

6. Чернышев О. Сравнительный анализ решения задач оптимизации генетическими и градиентными методами / О. Чернышев, А. Борисов // Transport and Telecommunication, 2007. – Vol. 8, No. 1. – P. 40–52.

7. Ахметов И.В., Губайдуллин И.М. Разработка кинетических моделей с использованием параллельных вычислений на многоядерных системах // Вестник Омского университета, 2012. – № 2 (64). – С. 172-174.

8. Ахметов И.В., Губайдуллин И.М. Построение кинетических моделей химических реакций на основе многоядерных систем // Журнал Средневолжского математического общества, 2012. – Т. 14, № 3. – С. 38-42.

## METADATA

**Title:** High-performance modeling the synthesis process of benzylideneaniline.

**Authors:** I.V. Ahmetov, I.M. Gubaidullin, Z.R. Shakirova.

**Abstract:** In this paper, a kinetic model of the benzylidene benzylamine synthesis reaction has been developed. The optimal rate constants for the stages and activation energies are found. When searching for kinetic parameters, the OpenMP parallel computing technology was used. An effective number of flows are determined, in which the solution of inverse problems is most effective.

**Key words:** kinetic model; rate constants; inverse kinetic problem; parallel calculations; OpenMP.

## ФОРМИРОВАНИЕ ПЛАНА ВЫПОЛНЕНИЯ ЧАСТЕЙ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ И ПРОГРАММНЫЙ СТЕНД ДЛЯ РАЗРАБОТКИ РАЦИОНАЛЬНЫХ СТРАТЕГИЙ ПЛАНИРОВАНИЯ

*В.М. Баканов*

Национальный Исследовательский Университет  
"Высшая Школа Экономики",  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** *Реальным путем повышения производительности вычислительных систем является подход на основе распараллеливания процессов обработки данных. Параллелизация требует решения сложной задачи рационального использования оборудования конкретной многопроцессорной вычислительной системы. Несмотря на наличие архитектур параллельных вычислительных систем, именно априорное планирование в настоящее время приоритетно.*

**Ключевые слова:** *многопроцессорная вычислительная система; параллелизация; декомпозиция; алгоритм; граф.*

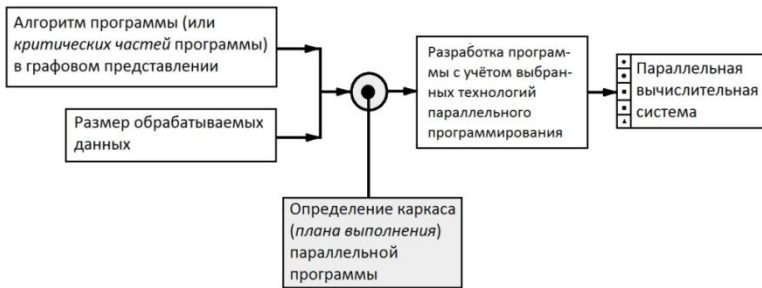
В обозримом будущем реальным путем повышения производительности вычислительных систем является подход на основе распараллеливания процессов обработки данных (далее - параллелизация). Путь повышения тактовой частоты процессоров ограничивается технологией их производства и фундаментальными законами.

Параллелизация (возможность одновременного, параллельного выполнения различных частей одной программы на независимо работающих вычислителях) требует от алгоритмистов и программистов дополнительных усилий не только по выявлению в алгоритме участков, которые могут быть исполнены параллельно, но и решения более сложной задачи рационального использования оборудования конкретной многопроцессорной вычислительной системы (МВС).

Анализом алгоритмов на наличие потенциала параллелизма, часто именуемый исследованием тонкой информационной структуры алгоритма, в нашей стране занимались В.В. Воеводин и Вл.В. Воеводин [1]. Конструктивным подходом при таком анализе является представление программ графовыми моделями.

Несмотря на наличие архитектур параллельных вычислительных систем, не нуждающихся в априорном планировании (напр., потоковый вычислитель аппаратно определяет очередность выполнения операторов на этапе выполнения программ), именно априорное планирование в настоящее время приоритетно.

Выбор модели графового представления обуславливается компромиссом между требованиями к глубине постановки задачи и сложностью обработки графа. Как правило, для представления и анализа программ используются (наряду с иными формами) информационные графы (напр., проект AlgoWiki, [2]). При таком подходе для максимального повышения быстродействия оптимизации подвергаются критические участки программы, не имеющие ветвлений; в этом случае информационный граф зачастую достаточен для описания алгоритма. Целью AlgoWiki является "дать исчерпывающее описание алгоритма, которое поможет оценить его потенциал применительно к конкретной параллельной вычислительной платформе" [2]. Следующим (перед процедурой собственно кодирования) и естественным этапом в цикле разработки параллельного приложения должно являться моделирование выполнения программы на конкретной МВС с целью разработки плана выполнения (каркаса) параллельной программы (рис. 1, рассматриваемый в данной работе этап выделен серым фоном).



**Рис. 1.** Фрагмент цикла разработки эффективной параллельной программы

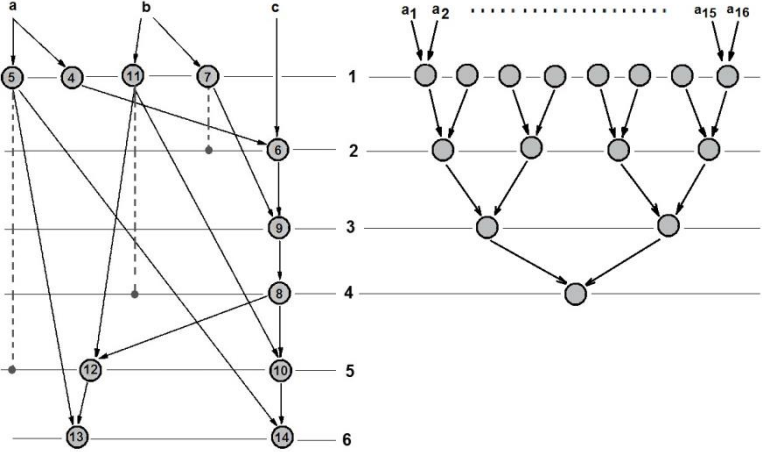
При представлении программы информационным графом алгоритма (ИГА, вычислительная модель "операторы - операнды") вершины графа соответствуют преобразователям информации (операторам), а дуги - информационным связям операторов (операндам). Под "операторами" понимаются отдельные последовательности вычислений (гранулы параллелизма) любого (в принципе) размера (в зависимости от соглашений, принятых при декомпозиции исходной программы). При оптимизации каркаса параллельной программы для процессора со сверхдлинным машинным словом оператором служит собственно машинная инструкция (параллелизм уровня машинных команд), для вычислительных кластеров под оператором следует понимать блок команд, выполняемых на каждом узле кластера.



В общем случае дуги ИГА нагружены величинами объема пересылаемых данных, вершины - значениями вычислительной сложности операторов (в машинных командах или тактах процессора). Время пересылки данных определяется технологией обмена с учетом латентности коммуникационной среды, а время выполнения операторов - параметрами конкретного вычислителя (в общем случае вычислительное поле МВС гетерогенно).

Удобным и полезным методом выявления параллелизма является представление ИГА в ярусно-параллельной форме (ЯПФ). Формально каждый ярус ЯПФ является сечением ИГА, удовлетворяющим условию независимости по данным находящимся на этом ярусе операторов.

Глубина ЯПФ (число ярусов, длина критического пути графа) определяет общее время выполнения алгоритма, ширина ЯПФ – максимальное число задействованных отдельных (параллельно работающих) вычислителей данной МВС. В зависимости от начала построения ЯПФ (от исходных к выходным данным или наоборот) получаем "верхний" или "нижний" канонические варианты ЯПФ, два таких представления ограничивают весь диапазон возможного расположения операторов на ярусах ЯПФ.



**Рис. 2.** Примеры ЯПФ алгоритма с имеющимся потенциалом вариативности расположения операторов по ярусам (слева, пунктиром показан допустимый диапазон расположения операторов по ярусам) и с нулевым потенциалом вариативности (справа); цифры в центре - номера ярусов ЯПФ.

Формально каноническая ЯПФ уже представляет собой некоторый каркас (план выполнения) отдельных частей программы (номера ярусов определяют последовательность выполнения параллельных групп операторов на данном ярусе). Однако подобное расписание реализуемо лишь на гипотетической МВС с бесконечно большим числом параллельных вычислителей (согласно концепции неограниченного параллелизма). Реальные ЯПФ информационных графов обладают большой неравномерностью в распределении числа операторов по ярусам (показательный пример - применяемый для ассоциативных операций граф сдваивания). Вследствие стремления разработчиков к быстрейшему выполнению вычислений обычно останавливаются на построении статичного плана исполнения параллельной программы (миграция подзадач в пределах конкретного задания между вычислителями резко снижает производительность).

На рис. 2 слева показана ЯПФ графа простой программы вычисления вещественных корней полного квадратного уравнения и (справа) ЯПФ процедуры сдваивания.

Для количественной оценки уровня вариативности (возможности перемещения операторов с уровня на уровень без нарушения информационных связей)  $V$  конкретной ЯПФ предложено использовать (в первом приближении) выражения:

$$V_P = \sum \frac{P_i}{P} \quad (1)$$

и

$$V_T = \sum \frac{T_i^{\max} - T_i^{\min}}{T}, \quad (2)$$

где в обоих случаях суммирование ведется по номерам операторов  $i$ ,  $P_i$  – число обладающих вариативностью операторов,  $P$  – общее число операторов,  $T_i^{\max}$  и  $T_i^{\min}$  – максимальный и минимальный номера ярусов данной ЯПФ, на которых может располагаться  $i$ -тый оператор (фактически диапазон возможного их расположения),  $T$  – общее число ярусов ЯПФ. Выражения (1) учитывает вклад числа операторов со свойством вариабельности, выражение (2) – величину собственно вариабельности, оба они дают ноль при отсутствии вариабельности и монотонно возрастают с её увеличением; разумна также суперпозиция выражений (1,2) в форме их произведения.

Для ЯПФ графа на рис. 2 слева возможна перестановки операторов с яруса на ярус, в результате чего программа может быть выполнена на 2 (вместо 4-х) параллельно работающих вычислителях за

то же время. При этом изменятся накладные расходы на хранение и передачу данных, что также может быть учтено.

Данная задача близка к проблематике разбиения графов и, согласно [3], относится к классу NP-полных. В этом случае неизбежно применение эвристических методов; с учетом этого корректнее говорить о нахождении не оптимального, а рационального решения, приближающегося к оптимальному. Областью оптимизации служит все множество планов выполнения операторов параллельной программы (с учетом сохранения информационных связей). В качестве критерия оптимизации разумно принимать максимум скорости выполнения и/или полноту использования существующего оборудования. Для практики необходимо иметь гибкий аппарат для решения задачи планирования с разной степенью оптимизации (вследствие NP-полноты задачи понимая эту процедуру как последовательное повышение качества эвристик в сторону улучшения критерия оптимизации) – от "быстрых" методов (основанных, напр., на использовании ЯПФ с последующими преобразованиями) до более трудоемких (методы "ветвей и границ", эволюционные и др.) для получения лучших решений. Трудоемкие методы более подходят для лабораторных исследований, для использования в составе компиляторов полезными будут именно "быстрые" методы.

Таким образом, можно определить направление данного исследования как разработку "быстрых" эвристик решения задачи получения рациональных (стремящихся к оптимальным) планов выполнения частей параллельной программы.

Будем использовать следующие обозначения параметров ЯПФ информационного графа:

- $H$  – глубина ЯПФ, определяется количеством ярусов в нем.
- $W_i$  – ширина  $i$ -того яруса (количество операторов на нём).
- $W$  – ширина ЯПФ графа, определяется максимумом операторов по всем ярусам,  $W = \max(W_i)$ .
- $\bar{W}$  – средняя ширина ЯПФ,  $\bar{W} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} W_i$ ,  $N$  – число ярусов ЯПФ.
- $k$  – степень (коэффициент) неравномерности распределения операторов по ярусам ЯПФ графа,  $k = \max(W_i) / \min(W_i)$ .
- $\sigma$  – среднеквадратичное отклонение ширин ярусов,  
$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} (W_i - \bar{W})^2}$$
- $CV$  – коэффициент вариации ширин ярусов ЯПФ,  $CV = \sigma / \bar{W}$ .

Исходя из общего понимания процесса выполнения параллельной программы на заданном вычислительном поле можно сформулировать перечисленные далее два типовых направления оптимизационной задачи:

а) Требование максимальной производительности (условие неувеличения числа ярусов канонической ЯПФ), при этом использование имеющихся параллельных вычислителей может быть неэффективным (в идеальном случае число вычислителей не менее  $\bar{W}$ , в реальности зависит от свойств алгоритма и качества алгоритма "балансировки" операторов по ярусам). Следует заметить, что потенциал оптимизационной задачи в этой постановке сильно ограничен для большинства алгоритмов.

б) Наиболее полное использование доступных ресурсов (количества выделенных данной задаче вычислительных узлов) имеющейся МВС при допущении увеличения времени выполнения. Для наглядности полезно представить этот процесс как подготовку связки (bundle), состоящей из не более чем заданного числа заведомо независимых (ортогональных) по операндам команд для вычислительной системы в аппаратно-программной идеологии микропроцессорной архитектуры с явным параллелизмом команд (EPIC, Explicitly Parallel Instruction Computing) для параллельных вычислителей архитектуры сверхдлинного командного слова (VLIW, Very Long Instruction Word).

Заметим, что в данном случае оптимизируется выполнение конкретной программы, в случае многозадачного режима необходима оптимизация по всем одновременно выполняемым заданиям.

Известен ряд программных продуктов, близких по постановочным целям, функциональные возможности которых для данного случая явно избыточны.

Для реализации и оптимизации эвристических алгоритмов поиска рациональных (стремящихся к оптимальным) планов выполнения частей параллельных программ разработано специализированное программное обеспечение инструментального уровня, в котором для описание стратегий решения задачи использован встроенный скриптовый язык программирования Lua по причине его известных полезных качеств [4].

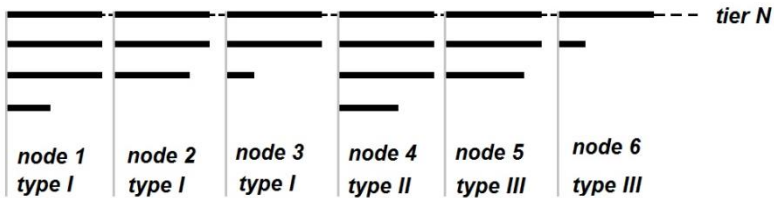
Клиентская часть программного инструментария (предварительное информационное сообщение приведено в работе [5]) разработана на языке программирования C++, является 32-битным GUI-приложением Windows и доступна для свободной загрузки с WEB-ресурса автора <http://vbakanov.ru/spf@home/content/spf@home.rar>.

Набор API-вызовов разработанной системы позволяет реализовывать любой из возможных критериев оптимизации (включая их

комбинации), т.к. выбор критерия осуществляет собственно пользователь (на основе задач, им поставленных). Например, совсем необязательно использовать представление ИГА в виде ЯПФ (хотя API системы включает такой вызов).

Требование учета гетерогенности (по параметрам объема памяти, вычислениям с различными типами данных, векторных вычислений и т.п.) вычислительного поля с возможностью выбора выполнения определенного оператора на соответствующем по параметрам вычислителе потребовали дополнения модели системой тегов (дополнительных параметров) для операторов и вычислителей. Также реализована система тегов для описания мер вершин и дуг ИГА (фактически операторов и линий передачи сообщений), позволяющая задавать для них собственные метрики.

Для случая гетерогенности поля параллельных вычислителей предложена (и реализована на Lua) стратегия, позволяющая разбивать ярусы ЯПФ на подъярусы. Если в пределах данного яруса имеется операторов не более чем число вычислителей, могущих выполнять операторы этого типа, то они выполняются параллельно, в ином случае эти операторы вынужденно выполняются последовательно на подъярусах (рис. 3).



**Рис. 3.** Выполнение параллельной программы на гетерогенном поле вычислителей согласно схемы расщепления ярусов для 6 параллельных вычислителей (node) трех типов - type I, type II и type III по 3, 1 и 2 штуки соответственно для N-ного яруса (tier) ЯПФ

В этом случае общее время  $T$  решения задачи равно сумме по всем ярусам максимальных значений времен выполнения операторов на подъярусах данного яруса:

$$T = \sum_j \left( \max_{k_j} \sum_i t_{ik} \right) \quad (3)$$

где  $j$  – число ярусов,  $i$  – число подъярусов на данном ярусе,  $k_j$  - типы вычислителей на  $j$ -том ярусе,  $t_{ik}$  – время выполнения оператора типа  $i$  на вычислителе типа  $k$ .

Задача минимизации общего времени решения усложняется в случае возможности выполнения каждого оператора на нескольких вычислителях вследствие неоднозначности  $t_{ik}$  в выражении (3); здесь необходима дополнительная балансировка выполнения по подъярусам.

Рассмотрим две (не излишне изощренные) стратегии преобразования ЯПФ - стратегия с метафорическим названием БУЛЬДОЗЕР (перемещение операторов с наиболее нагруженных на наименее нагруженные яруса при условии сохранения высоты ЯПФ, критерий останова алгоритма – перебор всех операторов, которые могут быть перенесены “с холмов во впадины”) и стратегия ДИХОТОМИЯ (балансировка при условии увеличения высоты ЯПФ, критерий останова - снижение ширины ЯПФ до величины, не превышающей заданной).

Эффективность этих стратегий проверялась на распространенных алгоритмах численной обработки (вследствие чрезмерного объема данных приводятся лишь общие результаты). При применении стратегии БУЛЬДОЗЕР снижение показателей  $k$  и  $CV$  достигает 1,5-2 раз (большие значения соответствуют обработке данных больших размеров), применение стратегии ДИХОТОМИЯ характеризуется значениями тех же показателей до 10 (в некоторых случаях много больше - в зависимости от заданных условий и конкретных алгоритмов).

Особенно интересна и практически важна задача априорного (до проведения собственно преобразований ЯПФ) предсказания уровня эффективности стратегий (задача распознавания ситуации и применение методов искусственного интеллекта).

В ходе исследований в целом удалось добиться поставленной цели - разработки рациональных стратегий составления плана выполнения частей параллельных программ, использование предложенного программного стенда оказалось эффективным. Получены количественные параметры текущего приближения при совершенствовании стратегий оптимизации выполнения параллельных программ, выявлены пути дальнейшего развития таких стратегий.

Результаты исследований применимы для анализа алгоритмов (в плане выявления эффективности выполнения параллельных программ), при разработке распараллеливающих компиляторов и в процессе обучения специалистов в области технологий параллельного программирования.

### Библиографический список

1. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
2. AlgoWiki. Открытая энциклопедия свойств алгоритмов. [Электронный ресурс]. Дата обновления: 18.10.2016. URL: <http://algowiki-project.org> (дата обращения: 01.05.2017).
3. Гери М., Джонсон Д. Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. – М.: Мир, 1982. — 416 с.
4. Иерусалимски Роберту. Программирование на языке Lua. – М.: ДМК Пресс, 2014. – 382 с.
5. Баканов В.М. Программный инструментарий анализа информационной структуры алгоритмов по их информационным графам // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016): труды международной научной конференции (г. Архангельск, 28.03–01.04.2016). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. – С. 432-441.

### METADATA

**Title:** The formation of the execution plan of parallel parts and software stand for development rational planning strategies.

**Authors:** V.M. Bakanov

**Abstract:** The real means to improve performance of computing systems is an approach based on parallelization of data processing. Parallelization requires the solution of complex problems of rational use the equipment specific multiprocessor area system. Despite the presence of architectures of parallel computing systems, a priori planning is now priority.

**Key words:** multiprocessor computer system; parallelization; decomposition; algorithm; graph.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ МНОГОУРОВНЕВЫХ СИСТЕМ

Н.Н. Боголюбов (мл.), А.В. Солдатов  
Математический институт им. В.А. Стеклова РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** Предложен метод моделирования эволюции открытой квантовой многоуровневой системы с конечным числом  $N$  квантовых состояний, взаимодействующей с внешними полями и диссипативным окружением, позволяющий получать приближенные эволюционные уравнения для статистического оператора системы и многовременных корреляционных функций в рамках теории возмущений по слабому взаимодействию с внешним окружением, при этом взаимодействие с внешними полями учитывается непертурбативно. Эти уравнения упрощаются, если динамика системы под воздействием внешних полей, а также её эволюция, обусловленная взаимодействием с окружением, описываются в терминах алгебры  $SU(N)$ , что позволяет реализовать эффективные численные алгоритмы решения полученных уравнений при исследовании реальных проблем в разнообразных областях теоретической и прикладной физики и смежных естественных наук.

**Ключевые слова:** многоуровневая квантовая система; открытая квантовая система; редуцированный статистический оператор; корреляционная функция; управляющее уравнение; проекционный оператор; операторная алгебра; полиномиальная аппроксимация; система ортогональных полиномов; интерполяция сплайнами; параллельные вычисления.

Проблема реалистичного моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с веществом актуальна во многих областях теоретической и прикладной физики и смежных естественных наук. Во многих практически важных случаях решение этой проблемы сводится к исследованию разнообразных моделей, описывающих открытую квантовую многоуровневую систему, которая взаимодействует одновременно с заданными в пространстве и времени классическими внешними электромагнитными полями и внешним диссипативным окружением, которое, в свою очередь, представлено разнообразными моделями классических стохастических или квантовых систем-термостатов. Такая ситуация характерна, например, для задач квантовой оптики, где вышеуказанная модель в её разных вариантах является одной из основных исследуемых моделей, а также в области квантовой химии в той её части, где разрабатываются способы управления химическими реакциями посредством воздействия на реагенты лазерным излучением со сложной пространственно-временной структурой. Как правило, для практических целей достаточно извлечь из исследуемой



модели информацию о поведении собственно квантовой многоуровневой системы как открытой системы, т.е. реализовать так называемое сокращенное описание полной системы, по необходимости пренебрегая детальной информацией о поведении диссипативного окружения, для которого характерно наличие бесконечного числа степеней свободы. Под сокращенным описанием обычно подразумевается возможность вычислять каким-либо способом неравновесный редуцированный статистический оператор многоуровневой системы, средние значения связанных с этой системой наблюдаемых величин и многовременные неравновесные корреляционные функции этих наблюдаемых. Приближенные эволюционные уравнения для этих величин, которые допускают последующее применение численных методов, обычно выводятся из формально точных уравнений в рамках некоторой теории возмущений. При этом проблема собственно численного анализа полученных приближенных уравнений сводится к решению двух взаимосвязанных задач - вычислению вынужденной гамильтоновой динамики системы под воздействием внешних полей и численному анализу диссипативной эволюции системы, обусловленной взаимодействием с окружением. Решение последней из этих задач часто предполагает необходимость учитывать немарковский характер эволюционных уравнений. Для сколько-нибудь реалистичных моделей обе эти задачи приводят к интенсивным компьютерным вычислениям, что крайне желательно принимать во внимание уже на стадии получения приближенных аналитических эволюционных уравнений, с тем чтобы сама структура этих уравнений допускала бы впоследствии использование эффективных численных алгоритмов для их решения.

Преимущество предложенного подхода [1] к моделированию эволюции многоуровневых систем состоит в том, что он позволяет получать из формально точных уравнений приближенные эволюционные уравнения для редуцированного статистического оператора и многовременных корреляционных функций системы в виде, удобном для последующего численного анализа. Эти приближенные уравнения выводятся единообразным способом как для статистического оператора, так и для корреляционных функций, в рамках регулярной теории возмущений, заключающейся в разложении некоторого пропагатора по степеням взаимодействия системы с термостатом, которое предполагается слабым. В то же время взаимодействие с внешними полями учитывается точно в каждом из порядков этой теории возмущений путем точного вычисления вынужденной гамильтоновой динамики системы, обусловленной воздействием внешних полей. Тот факт, что вынужденная динамика в представлении  $SU(N)$  алгебры

сводится к вращению некоторого вещественнозначного вектора в пространстве  $N^2-1$  измерений, существенно упрощает и ускоряет численные вычисления, так как позволяет задействовать эффективные специализированные численные алгоритмы. Дальнейшее ускорение вычислений может быть достигнуто путём параллельного вычисления вынужденной динамики под воздействием внешних полей для  $N^2-1$  операторных переменных многоуровневой системы, а также при вычислении временной зависимости всех коэффициентов, присутствующих в приближенных эволюционных уравнениях. Общая структура приближенных уравнений для редуцированного статистического оператора и корреляционных функций остается одной и той же во всех порядках схемы теории возмущений, хотя временизависимые коэффициенты и неоднородные слагаемые в этих уравнениях приобретают всё более сложный вид. Для вычисления редуцированного статистического оператора и корреляционных функций используется фактически один и тот же алгоритм, что упрощает программную реализацию всего метода. Корреляционные поправки к корреляционным функциям, вводимые с целью учета корреляций между квантовым состоянием системы и окружения, также могут быть учтены методом теории возмущений путем добавления в соответствующие приближенные эволюционные уравнения поправочных слагаемых, возникающих в результате разложения того же вышеупомянутого пропагатора по степеням взаимодействия с термостатом. Предложенная процедура вычисления произвольных многовременных корреляционных функций есть в сущности не что иное, как обобщение регрессионной гипотезы, также известной под названием регрессионной теоремы. Использованное в предлагаемом методе разложение приближенных интегро-дифференциальных по времени эволюционных уравнений по набору ортогональных полиномов Лагерра позволяет избавиться от конволютивной структуры этих уравнений не прибегая методу преобразований Лапласа, который неприменим в случае многоуровневых систем даже с относительно небольшим числом уровней  $N$ . Это разложение может оказаться особенно полезным при исследовании немарковской эволюции, имеющей место при взаимодействии многоуровневой системы с короткими импульсами лазерного излучения сложной пространственно-временной структуры. Тот факт, что в результате использования полиномиальной аппроксимации задача решения эволюционных уравнений сводится к вычислению соответствующих коэффициентов разложения по рекуррентным линейным соотношениям, существенно упрощает и ускоряет численные вычисления. Для ускорения собственно вычисления коэффициентов

разложения по полиномам Лагерра может также оказаться целесообразным использовать интерполяцию зависящих от времени коэффициентов в приближенных эволюционных уравнениях сплайнами и использовать далее эффективные рекуррентные соотношения при вычислении соответствующих интегралов. В предлагаемом методе вычислений [1] использовались точные управляющие уравнения для статистических операторов в форме конволютивного уравнения Накаджимы-Цванцига [2]. Но весь подход может быть переформулирован и с использованием альтернативного метода неконволютивных управляющих уравнений [3], за исключением разложения по полиномам Лагерра, которое в этом случае не требуется. Предлагаемый подход универсален в том смысле, что в нём не конкретизируется ни природа и структура внешних полей, ни также число, природа и структура термостатов, описывающих внешнее окружение.

### Библиографический список

1. N.N. Bogolubov, Jr., and A.V. Soldatov, "Algebraic aspects of the quantum multi-level systems dynamics in the projection operator method", Theor. Math. Phys. (to be published).
2. R. Zwanzig, J. Chem. Phys., v. **33**, pp. 1338-1341 (1960).
3. H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2002).

### METADATA

**Title:** Numerical modelling the evolution of open quantum multi-level systems.

**Authors:** N.N. Bogolubov, Jr., A.V. Soldatov.

**Abstract:** An approach to the modelling of the evolution of open quantum multi-level system with finite number of levels  $N$  interacting with external fields and dissipative environment is proposed. The approach allows to derive approximate evolution equations for the density operator and multi-time correlation functions of the system by means of a perturbative scheme with respect to the weak interaction with the environment while the interaction with the external fields is accounted for non-perturbatively. These equations can be simplified significantly if the dynamics of the system, driven by the external fields, as well as its evolution, stipulated by the interaction with the environment, are described in terms of the  $SU(N)$  algebra representation. As a consequence, efficient numerical methods can be developed and employed to analyze these master equations for real problems

in various fields of theoretical and applied physics and concomitant natural sciences.

**Key words:** multi-level quantum system; open quantum system; reduced density operator; correlation function; projection operator; master equation; operator algebra; spline interpolation; polynomial approximation; set of orthogonal polynomials; parallel computing.

## О ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ ТЕСТЕ ДЛЯ ОДНОЙ МОДЕЛИ БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНОГО ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА\*

Д.А. Быковских, В.А. Галкин  
Сургутский государственный университет,  
г. Сургут, Россия

**Аннотация.** Рассматривается задача о построении кинетической модели идеального бесстолкновительного газа. Для решения задачи используется метод прямого статистического моделирования Монте-Карло. Представлены результаты статистических оценок макроскопических параметров, полученные в результате численного моделирования, проведено их сравнение с известным аналитическим решением. Исследована зависимость погрешности полученных результатов от числа частиц и количества испытаний.

**Ключевые слова:** метод Монте-Карло, газ Эйлера, уравнение Лиувилля.

**Введение.** Работа посвящена исследованию численного метода, связанного с моделированием особенностей течения газа в задачах переноса для динамических систем, состоящих из невзаимодействующих частиц [1, 5]. К таким задачам относится описание областей фокусировки и кумулятивных явлений в динамике фотонного газа, нейтронов и т.п. [3].

Целью работы является построение модели идеального газа с помощью метода прямого статистического моделирования Монте-Карло и исследование статистических оценок макроскопических параметров газа в элементарном объеме.

**Кинетическая модель газовой динамики.** Основой кинетической модели является динамическая система, состоящая из статистически большого числа частиц. Движение невзаимодействующих частиц газа можно описать с помощью уравнения Лиувилля, записанного в векторной форме:

$$\frac{\partial f_i(t, x)}{\partial t} + v_i \frac{\partial f_i(t, x)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

где  $f_i(t, x)$  – функция распределения  $i$ -й группы частиц;  $v_i$  – скорость  $i$ -й группы частиц;  $x$  – координаты движения частиц;  $t$  – время.

Поскольку начальное состояние системы неизвестно, вводится  $f(t, x, v)$   $N$  – частичная функция распределения. Не смотря на то, что состояние такой системы отобразить кривой в  $6N$ -мерном фазовом  $\Gamma$ -

---

\* Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты: № 15-41-00013, № 15-41-00059.

пространстве, с точки зрения исследования динамической системы в целом или ее части наиболее интересны макроскопические параметры, такие как плотность, давление, температура.

Ниже представлено описание средних значений макроскопических параметров и статистических оценок плотности (2), массовой (гидродинамической) скорости (3), внутренней энергии единицы массы газа (4), температуры (5) и давления (6).

$$\rho(t, x) = \int_{R_3} f dv \quad \hat{\rho}(t, x) = \frac{1}{NV} \sum_{j: x_j \in D(h)}^N m_j, \quad (2)$$

$$\bar{v}(t, x) = \frac{1}{\rho} \int_{R_3} v f dv \quad \bar{v}(t, x) \equiv \begin{cases} 1/(\hat{\rho}NV) \sum_{j: x_j \in D(h)}^N v_j, & \hat{\rho} > 0 \\ 0, & \hat{\rho} = 0 \end{cases}, \quad (3)$$

$$e(t, x) = \frac{1}{2\rho} \int_{R_3} (v - \bar{v})^2 f dv \quad e(t, x) = \frac{1}{2N} \sum_{k=1}^3 \left[ \sum_{j: x_j \in D(h)}^N (v_j^k)^2 - \frac{1}{N} \left( \sum_{j: x_j \in D(h)}^N v_j^k \right)^2 \right], \quad (4)$$

$$T(t, x) = \frac{2}{3R} e, \quad (5)$$

$$p(t, x) = \frac{1}{3} \int_{R_3} (v - \bar{v})^2 f dv \quad p(t, x) = \frac{2}{3} \hat{\rho} e, \quad (6)$$

где  $V$  – мера элементарного объема;  $D(h)$  – элементарный объем;  $m_j$  – масса  $j$ -ой частицы;  $v_j$  – скорость  $j$ -ой частицы;  $R = 8,314459(84)$  – универсальная газовая постоянная. Из формул (2)–(6) следует стандартное соотношение Клапейрона-Менделеева для идеального газа ( $p = R\rho T$ ).

**Оценка погрешностей макроскопических параметров.** Одно из главных преимуществ стохастических расчетных методов связано с тем, что можно оценить статистическую ошибку, т.е. в ходе расчета можно вычислять не только средние значения, но и дисперсию. Статистическая погрешность уменьшается очень медленно по сравнению с другими численными методами. При этом нельзя сравнивать определенные влияния малых воздействий по двум отчетам [2, 4]. Погрешность полученных статистических оценок макроскопических параметров (далее макроскопические параметры) можно оценить следующими способами.

Оценка погрешностей при моделировании  $n$  независимых историй. Доверительный интервал  $(\hat{\mu} - \delta, \hat{\mu} + \delta)$ , в котором находится истинное значение  $\mu$  случайной величины  $\xi$ , распределенной по нормальному закону, с заданной вероятностью  $P$ , определяется следующим образом:

$$P \left\{ \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \mu \right| \leq \frac{3\hat{s}}{\sqrt{n}} \right\} \approx 0,9975, \quad (7)$$

$$\hat{\mu} = \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad (8)$$

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad (9)$$

где  $\hat{\mu}$  – математическое ожидание  $M\xi$ ;  $n$  – независимые истории (число испытаний);  $x_i$  – неизвестные величины, полученные в результате испытаний;  $\hat{s}$  – несмещенная оценка дисперсии  $D\xi$ . Таким образом, можно утверждать, что случайная величина  $\xi$  не отклонится от математического ожидания  $\hat{\mu}$  по абсолютной величине больше чем на  $3\sigma$  ( $\sigma = \hat{s} / \sqrt{n}$ ) с вероятностью 0,9975 (правило трех сигм).

*Статистическая флуктуация* – оценка погрешности колебания макроскопических параметров, которая определяется следующим выражением:

$$\frac{\sqrt{\langle (\Delta F)^2 \rangle}}{\langle F \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (10)$$

где  $F$  – макроскопическая величина;  $L$  – число частиц в элементарном объеме.

*Сравнение численных результатов с аналитическими.* В случае когда для задачи существует аналитическое решение, точность численного решения макроскопических параметров можно оценить максимальные абсолютную  $\Delta F$  и относительную  $\delta F$  погрешности:

$$\Delta F = \max_t |F_{num} - F_{an}| \quad \delta F = \frac{\Delta F}{|F_{an}|} \cdot 100\% \quad (11)$$

где  $F_{num}$  – численное значение;  $F_{an}$  – аналитическое значение;  $t \in [0; T]$  – временной интервал.

**Динамическая модель движения газа Эйлера.** Рассмотрим пример движущихся навстречу друг другу частиц, у которых функции

плотности распределения определяются следующими соотношениями [3]:

$$\begin{cases} f_1(x,t) = \rho_0(1 - \theta(x - v_0t)) \\ f_2(x,t) = \rho_0\theta(x - v_2t) \end{cases}, \quad (12)$$

где  $\rho_0 = const > 0$  – начальная плотность;  $\theta(x)$  – функция Хевисайда;  $v_1 = v_0 \geq 0$  – скорость частицы;  $v_2 = -v_0 \leq 0$  – скорость частицы.

Тогда макроскопические величины аналитического решения для модели Эйлера имеют следующий вид:

$$v(x,t) = \begin{cases} 0, & |x| \leq v_0t \\ -v_0, & x > v_0t \\ v_0, & x < -v_0t \end{cases}, \quad (13)$$

$$\rho(x,t) = \begin{cases} 2\rho_0, & |x| \leq v_0t \\ \rho_0, & |x| > v_0t \end{cases}, \quad (14)$$

$$T(x,t) = \begin{cases} v_0^2 / (3R), & |x| \leq v_0t \\ 0, & |x| > v_0t \end{cases}, \quad (15)$$

**Численная модель.** Алгоритм, предназначенный для моделирования динамики идеального газа, состоит из следующих шагов: 1) задание начальных условий; 2) вычисление нового местоположения частиц; 3) вычисление макроскопических параметров; 4) сохранение промежуточных результатов; 5) проверка условия выхода.

Шаг 1. Инициализация начальных условий (рис. 1) включает задание параметров частиц, элементарного объема и шага по времени  $\Delta t$ . Начальное местоположение частиц определяется случайным образом с равномерным законом распределения на интервале  $(-5;5)$ . Модуль скорости частиц равняется 1, вектор направления определяется по формуле (12). Элементарный объем устанавливается в центре, его размер равен  $[1;1]$ .



Рис. 1. Вычислительная схема



Шаг 2. Вычисление нового местоположения  $i$ -й частицы определяется следующей итерационной формулой, записанной в векторной форме:

$$q_i^{(k+1)} = q_i^{(k)} + v_i^{(k)} \Delta t, \quad (16)$$

где  $k$  – номер итерации;  $q_i^{(k)}$  – координаты  $i$ -й частицы на предыдущем шаге;  $v_i^{(k)}$  – скорость  $i$ -й частицы;  $\Delta t$  – шаг по времени.

Для данной задачи установка границ и граничных условий не требуется.

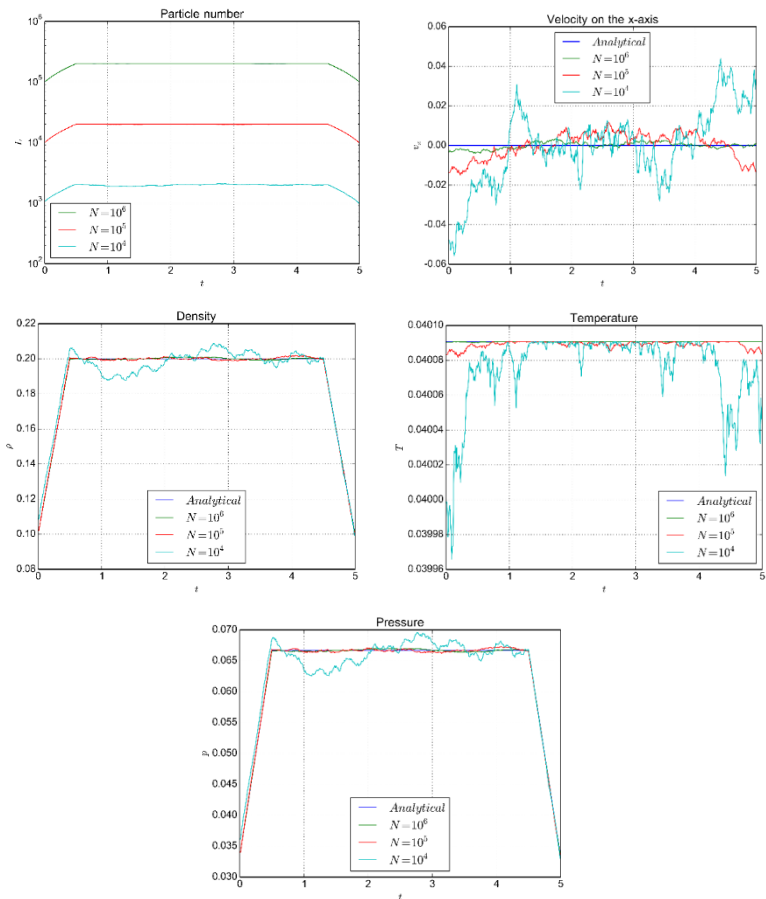
Шаг 3. Вычисление макроскопических параметров в элементарном объеме основано на формулах (2)–(6). Размер элементарного объема должен выбираться в соответствии с расстоянием, которое преодолевает частица за одну итерацию ( $\Delta x \leq v_0 | \Delta t$ ).

Шаг 4. Сохранение промежуточных результатов. В целях экономии вычислительных ресурсов, запись в файл осуществляется через специальный буфер накопления, позволяющий записывать большими блоками за раз, при этом экономить место в оперативной памяти при длительных расчетах.

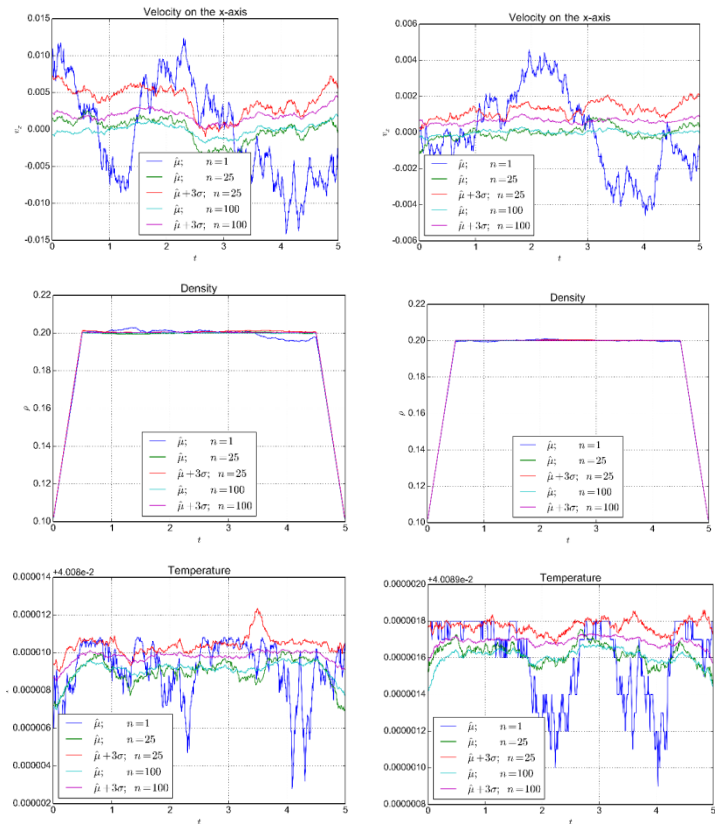
Шаг 5. На последнем шаге проверяется условие выхода. Шаги 2-4 составляют один шаг по времени  $\Delta t$ . Перед завершением программы происходит запись накопившейся информации из буфера в файл для последующей обработки.

В целях повышения эффективности последовательный алгоритм, написанный на языке Си, был адаптирован с помощью технологий OpenMP и MPI для высокопроизводительных вычислительных систем с традиционной архитектурой. Вычислительные расчеты проводились на одном вычислительном узле с классическим процессором Intel XEON CPU E5-2690 V2 и 32 ГБ ОЗУ.

**Результаты моделирования.** На рис. 2 и 3 представлены сравнения результатов численного моделирования с аналитическим решением. Из графиков видно, что статистических оценки макроскопических параметров газа с увеличением числа частиц приближаются к их аналитическим значениям (скорость  $v_0 = 1$ , плотность  $\rho_0 = 0,1$  и температура  $\tau \approx 0,0400908$ ).



**Рис. 2.** Сравнение макроскопических параметров модели газа Эйлера численного моделирования при  $\Delta t = 0,01$  с аналитическими решениями при различном количестве частиц



**Рис. 3.** Сравнение макроскопических параметров модели газа Эйлера численного моделирования при  $\Delta t = 0,01$  с аналитическими решениями при различном количестве историй: слева –  $N = 10^5$  ; справа –  $N = 10^6$

В табл. 1 представлены погрешности макроскопических параметров, полученных в результате моделирования при различном числе частиц  $N$ . Из табл. 1 видно, что с увеличением числа частиц погрешность макроскопических параметров уменьшается согласно (10).

Таблица 1  
Максимальные абсолютные и относительные погрешности  
при различном числе частиц

$N$	$\Delta v$	$\Delta p$	$\Delta T$	$\Delta p$	$\delta p$	$\delta T$	$\delta p$
$10^3$	$1.89 \cdot 10^{-1}$	$3.20 \cdot 10^{-2}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$1.01 \cdot 10^{-2}$	$1.60 \cdot 10^1$	3.59	$1.51 \cdot 10^1$
$10^4$	$5.58 \cdot 10^{-2}$	$1.22 \cdot 10^{-2}$	$1.25 \cdot 10^{-4}$	$4.10 \cdot 10^{-3}$	7.27	$3.12 \cdot 10^{-1}$	7.01
$10^5$	$1.50 \cdot 10^{-2}$	$1.98 \cdot 10^{-3}$	$9.00 \cdot 10^{-6}$	$6.60 \cdot 10^{-4}$	1.38	$2.24 \cdot 10^{-2}$	1.40
$10^6$	$3.91 \cdot 10^{-3}$	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$5.98 \cdot 10^{-7}$	$3.34 \cdot 10^{-4}$	$5.01 \cdot 10^0$	$1.49 \cdot 10^{-3}$	$5.01 \cdot 10^0$

Для сравнения точности макроскопических параметров, основанных на  $\hat{\mu}$  и  $\hat{s}$ , т.е. с различным числом испытаний  $n$ , с аналитическим решением модифицируется формула (11) для абсолютной погрешности следующим образом:

$$\Delta F' = \max_t [|\hat{\mu} - F_{an}| + \delta], \quad (17)$$

где  $\delta = 3\hat{s} / \sqrt{n}$  – погрешность, зависящая от числа испытаний.

В табл. 2 представлены результаты абсолютных и относительных погрешностей, полученных при моделировании различного числа частиц и количества историй. При сравнении числа частиц с количеством историй видно, что с увеличением числа частиц в 10 раз при одном испытании эквивалентно увеличению количества историй в 100 раз.

Таблица 2  
Максимальные абсолютные и относительные погрешности  
при различном числе частиц и историй

$N$	$n$	$\Delta v$	$\Delta p$	$\Delta T$	$\Delta p$	$\delta p$	$\delta T$	$\delta p$
$10^5$	1	$1.41 \cdot 10^{-2}$	$4.56 \cdot 10^{-3}$	$8.00 \cdot 10^{-6}$	$1.52 \cdot 10^{-3}$	2.28	$2.00 \cdot 10^{-1}$	2.28
$10^5$	25	$4.01 \cdot 10^{-3}$	$6.72 \cdot 10^{-4}$	$3.89 \cdot 10^{-6}$	$2.21 \cdot 10^{-4}$	$5.03 \cdot 10^{-1}$	$9.69 \cdot 10^{-1}$	$4.93 \cdot 10^0$
$10^5$	100	$2.09 \cdot 10^{-3}$	$4.00 \cdot 10^{-4}$	$3.82 \cdot 10^{-6}$	$1.31 \cdot 10^{-4}$	$2.82 \cdot 10^{-1}$	$9.53 \cdot 10^{-1}$	$2.73 \cdot 10^0$
$10^6$	1	$4.60 \cdot 10^{-3}$	$1.01 \cdot 10^{-3}$	$8.98 \cdot 10^{-7}$	$3.37 \cdot 10^{-4}$	$5.07 \cdot 10^{-1}$	$2.24 \cdot 10^0$	$5.06 \cdot 10^0$
$10^6$	25	$1.16 \cdot 10^{-3}$	$3.46 \cdot 10^{-4}$	$3.38 \cdot 10^{-7}$	$1.16 \cdot 10^{-4}$	$2.25 \cdot 10^{-1}$	$8.44 \cdot 10^0$	$2.26 \cdot 10^0$
$10^6$	100	$4.19 \cdot 10^{-4}$	$2.32 \cdot 10^{-4}$	$3.77 \cdot 10^{-7}$	$7.71 \cdot 10^{-5}$	$2.08 \cdot 10^{-1}$	$9.41 \cdot 10^0$	$2.07 \cdot 10^0$

В результате получается, что экономичнее строить модель с большим количеством частиц, чем проводить множество повторных испытаний.

**Заключение.** Представлено подробное описание построения модели идеального газа, состоящей из невзаимодействующих частиц. Разработан программный комплекс для задач численного моделирования динамики идеального газа, позволяющий вычислять статистические оценки макроскопических параметров в элементарных объемах. Реализованный алгоритм, лежащий в основе программного комплекса, позволяет производить расчеты на высокопроизводительных вычислительных системах. Проведена серия вычислительных экспериментов и представлена оценка точности полученных результатов, при этом численное решение сравнивалось с известным аналитическим решением.

### Библиографический список

1. Черчиньяни К. Теория приложения уравнения Больцмана. – М.: Мир, 1978. – 496 с.
2. Зельдович Я.Б., Мышкис А.Д. Элементы математической физики. Среда из невзаимодействующих частиц. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 368 с.
3. Галкин В.А. Анализ математических моделей: системы законов сохранения, уравнения Больцмана и Смолуховского. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 408 с.
4. Крянев А.В., Лукин Г.В., Удумян Д.К. Метрический анализ и обработка данных. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. – 308 с.
5. Франк-Каменецкий А.Д. Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. – М.: Атомиздат, 1978. – 96 с.

### METADATA

**Title:** On a computing test of an ideal non-interacting gas model.

**Authors:** D.A. Bykovskikh, V.A. Galkin.

**Abstract:** In the present paper the problem of non-interacting ideal gas kinetic model construction is considered. The direct simulation Monte Carlo method was used for the problem solution. Results of statistical estimates derived from numerical simulation were presented. These results were compared with the analytic solution. Numerical error depending on particles and computing experiments were researched.

**Key words:** Monte Carlo method; Euler's gas; Liouville's equation.

## ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВО – ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ВЫБОРЕ АКТИВНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ ДЛЯ ЭЛАСТОМЕРОВ

*Х.Х. Валиев, Ю.Н. Карнет, О.Б. Юмашев*  
Институт прикладной механики РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** *Полученные ранее результаты прямого численного моделирования, в рамках кластерного квантово-химического приближения, наноструктуры шунгита и его адсорбционных комплексов с эластомерами применяются для анализа экспериментально исследованных особенностей топографии поверхности и физико – механических свойств композитов бутадиен – стирольных каучуков с шунгитом.*

**Ключевые слова:** *эластомерные нанокompозиты; шунгит; квантово-химическое моделирование; атомно – силовая микроскопия; распределение наполнителей; усиление.*

**Введение.** Численные методы, основанные на алгоритмах параллельного счета, выполняемых суперкомпьютером с использованием квантово-химического подхода, позволяют прогнозировать микроскопические свойства адсорбирующих систем различных неоднородных вязкоупругих сред по “первым принципам”. Молекулярное вычислительное моделирование является эффективным методом виртуального анализа структурных, энергетических и микромеханических свойств микро и нанокompозитов. Полученные в работе [1] результаты прямого численного моделирования, в рамках кластерного квантово-химического приближения, наноструктуры шунгита и его компонент, предсказывающие эффективность использования его как наполнителя в эластомерах, в данной работе используются при анализе экспериментально исследованных особенностей топографии поверхности и физико – механических свойств композитов бутадиен – стирольных каучуков с шунгитом.

**Объекты и методы исследования.** В работе [1] энергетические и структурные характеристики исследованных модельных систем рассчитывались в рамках полуэмпирического метода NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap) с параметризацией PM3 [2]. Этот метод был реализован в разработанном в ИПРИМ РАН оригинальном пакете NDDO/sp-spd [3]. Он предназначен для расчета базовых структурных и энергетических характеристик многоатомных наноразмерных кластеров в основном электронном состоянии. Применялись параллельные вычисления в рамках пакета NANOPACK. Расчеты проводили на суперкомпьютере МВС-5000 в Межведомственном суперкомпьютерном

центре и на многопроцессорном (200-ядерном) кластере ИПРИМ РАН. На базе этого пакета в кластерном приближении были изучены особенности нано- и микроскопического механического поведения и характеристики деформации и разрушения адсорбатов полиизопрена с шунгитом при одноосном растяжении. Элементы границы раздела фаз реальных нанокompозитных материалов моделировались кластерами конечной величины различного химического состава и пространственного строения. Строились и оптимизировались молекулярные модели отдельных компонентов нанокompозита, затем строился составной кластер - адсорбционный комплекс компонентов, включающий модель межфазной зоны контакта. Для составных кластеров рассчитывались энергии связывания компонентов и силы деформации, которые характеризовали на микроскопическом уровне прочность. При моделировании перестройки структуры молекулярной системы под действием внешней силы вычислительный эксперимент строился по аналогии с механическими испытаниями в режиме активного нагружения. Однако в отличие от реального физического эксперимента, в котором обычно фиксируется изменение формы и механических свойств исследуемого объекта в результате приложенной к нему нагрузки, в вычислительном эксперименте рассматривался отклик объекта на деформацию его формы (растяжение/сжатие) и рассчитывалась сила деформации. Взаимосвязь структуры и энергетических характеристик поверхности раздела фаз с характеристиками его напряженного состояния, исследовали в рамках подхода микроскопической координаты трения.

Были исследованы взаимодействия ультрадисперсных частиц компонент шунгита - частицы технического углерода (аморфная черная сажа) и аморфный силикат (белая сажа) с фрагментами цепи полиизопрена. Были рассчитаны энергии связывания, силы микроскопического трения и микроскопические модули сдвиговой деформации для этих комплексов.

Из полученных результатов следовало, что эти параметры определяются, в основном, гидрофобными контактами между молекулами, а также конформационным сходством взаимодействующих поверхностей.

Таким образом, результаты компьютерного моделирования показывают, что можно ожидать существенного усиления физико – механических показателей для композитов на основе эластомеров и шунгитовым наполнителем. Результаты этих расчетов были применены в данной работе при практическом синтезе таких композитов.

В качестве наполнителя эластомеров использовался природный минерал шунгит (Зажогинское месторождение, Карелия, Россия). Порода представляет собой натуральный композит, в углеродной матрице которого распределены высокодисперсные частицы силикатов и малые количества других окислов. Сложная структура и состав породы сообщают шунгитовым материалам ряд необычных физических, химических, физико-химических и технологических свойств. Химический состав шунгита, использовавшегося данной работе, приведен в табл. 1.

Таблица 1  
Химический состав шунгита (%). ООО «Карбон-Шунгит»

SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	S	C	H <sub>2</sub> O <sub>крис</sub>
57,0	0,2	4,0	2,5	1,2	0,3	0,2	1,5	1,2	29,0	4,2

Учитывая квантово-химические расчеты [1], была реализована многостадийная технология физико – химической модификации исходного неактивного или полуактивного шунгита в его стандартной товарной форме в активный наполнитель для резин. В результате диспергирования частиц промышленно выпускаемого исходного микроразмерного шунгита в планетарной шаровой мельнице (Retsch PM100, Германия) были получены наночастицы шунгита со средним размером порядка 50 нм.

Для формирования одного резинового компаунда, включающего шунгит, в качестве матрицы использовали бутадиен-стирольный каучук (S-SBR - 4400). Наполнение эластомеров шунгитом составляло порядка 50 масс. ч. на 100 масс. ч. каучука. по стандартной рецептуре, характерной для наполнителей из технического углерода типа N 660. Также были приготовлены в промышленном смесителе опытные образцы резин: ВЖ1 – 80 и ВЖ2 – 80 (90 массовых частей исходного и нанодиспергированного шунгита соответственно на 100 массовых частей бутадиен – метилстирольного каучука СКМС – 30 – АРК со временем вулканизации 80 мин.).

Исследования структуры поверхности частиц шунгита и синтезированных композитов проводились с помощью атомного силового микроскопа, работающего в динамической моде “Intermittent Contact” ДСМ (NanoSurf, Швейцария) [4]. Измерения проводили на воздухе при комнатной температуре. Области сканирования ХУ: 100 мкм - 300 нм, Z - высоты: 18 мкм - 70 нм. Частицы исходных и нанодиспергированных образцов шунгита, суспендированные в толуоле, после дополнительной обработки в ультразвуковой ванне наносили на высокоориентированный

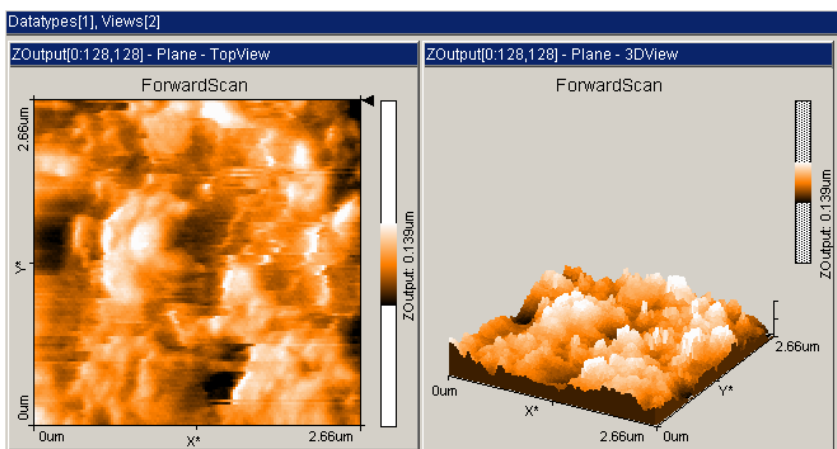


пиролитический графит НОРГ (НТ –МДТ, Зеленоград, Россия). или на трековые мембраны (ОИЯИ, Дубна, Россия).

Реологические испытания сырых резиновых смесей проводили на динамическом реоспектрометре марки Rheostress 150 (фирма HAAKE, Германия), а прочностные испытания вулканизованных образцов – на универсальной разрывной машине марки UTS-10 (Ulm, Германия).

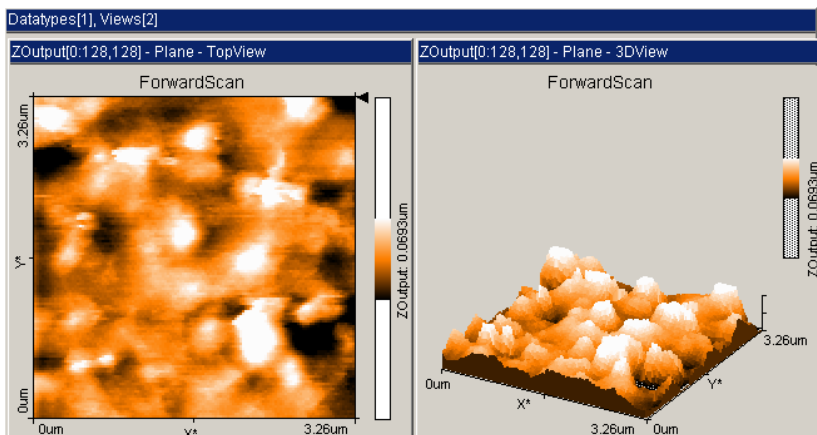
**Экспериментальные результаты и обсуждение.** Анализ полученных в ДСМ микроскопе изображений образцов шунгита, высаженных на НОРГ, выявил четкое влияние механической обработки этого материала на размер полученных частиц. Изображения поверхности исходных частиц шунгита позволили определить широкое распределение агрегатов частиц по размерам в области 100 нм – 5 мкм. Наблюдалась четкая внутренняя структура отдельных частиц агрегатов размерами 100 нм – 500 нм. ДСМ снимки нанодиспергированного шунгита показали, что средний размер агрегатов частиц уменьшился до 70 – 200 нм.

Визуализация распределения частиц микро и наноразмерного шунгитового наполнителя в каучуковой матрице получено также в ходе прямых экспериментов с использованием ДСМ. Снимки топографии поверхности и трехмерных изображений композитов, приведены для ВЖ 1 – 80 на рис.1, а для ВЖ 2 – 80 на рис. 2. Слева – топография, справа – трехмерный вид. Реализуется резко неоднородное распределение исходного шунгита в каучуковой матрице с размером агрегатов наполнителя 0.5 – 2 мкм для ВЖ 1 – 80, а для ВЖ 2– 80 существенно более однородное распределение шунгита в каучуковой матрице с размером агрегатов частиц 80 – 350 нм.



**Рис. 1.** ДСМ изображение поверхности резины ВЖ1 – 80.  
Скан  $2.66 \times 2.66$  мкм

Испытания механических свойств на разрывной машине UTS – 10 выявили невысокие упруго – прочностные характеристики композитов ВЖ1 – 80 по сравнению со стандартным промышленным наполнителем из технического углерода N 660, тогда как композиты ВЖ2 – 80 проявляют существенное усиление физико – механических свойств. Аналогичные выводы относительно исследованных композитов получены при реологических испытаниях образцов на динамическом реоспектрометре.



**Рис. 2.** ДСМ изображение поверхности резины ВЖ2 – 80.  
Скан 3.26 × 3.26 мкм

Эти исследования показывают эффективность использования шунгита после соответствующей химико-механической обработки как альтернативного наполнителя эластомеров. Важной основой проведения экспериментов явились предварительно проведенные прямые численные расчеты в рамках кластерного квантово-химического приближения, наноструктуры шунгита и его компонент, предсказывающие эффективность использования его как наполнителя в эластомерах.

**Заключение.** Экспериментальные исследования показали как теоретическую, так и практическую значимость предложенного в [1] квантово – химического подхода для компьютерного подбора компонентов эластомерных композитов и путей модификации их наполнителей с целью прогнозирования технологий получения материалов с улучшенными прочностными характеристиками. Разработанная вычислительная методика может быть применена в аналогичных задачах разработки новых перспективных композитов.

### Библиографический список

1. Яновский Ю.Г., Мягков Н.Н., Никитина Е.А., Карнет Ю.Н., Валиев Х.Х., Жогин В.А., Гамлицкий Ю.А. Компьютерное моделирование и наноскопические исследования структуры и свойств шунгита // Механика композиционных материалов и конструкций. 2006. Т.12. № 4. С.513 – 529.

2. Stewart J.J.P. Optimization of Parameters for Semi-Empirical Methods. I-Method. II-Applications. J. Comput. Chem., 1989, V.10, № 2, P. 209 - 264.

3. Программный компонент NDDO/sp-spd высокоточных полуэмпирических расчетов в SP- и SPD-базах, включающий в себя набор программ для получения структурных, электронных, энергетических, деформационных и спектроскопических характеристик атомно-молекулярных систем до 1000 атомов. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №209614949, 2009 год.

4. Белов Д.Е., Валиев Х.Х., Гамлицкий Ю.А., Жогин В.А., Карнет Ю.Н., Тимашев Р.Р., Шумихин Т.А., Яновский Ю.Г. Результаты исследования поверхностей материалов различной природы в сканирующем туннельном и динамическом силовом микроскопах серии NanoSurf. //Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2006, № 9, С.70 -77.

#### METADATA

**Title:** Application of quantum-chemical modeling in choosing active fillers for elastomers.

**Authors:** H.H. Valiev, Yu.N. Karnet, O.B. Yumashev

**Abstract:** Results of direct numerical simulation obtained earlier, within the cluster quantum-chemical approximation, the shungite nanostructure and its adsorption complexes with elastomers, are used to analyze the experimentally researched features of surface topography and the physico-mechanical properties of styrene-butadiene rubber composites with shungite.

**Key words:** elastomeric nanocomposites; shungite; quantum-chemical modeling; atomic force microscopy; distribution of fillers; reinforcement.

# МАТРИЧНЫЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕОСНОВНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА, ГЕНЕРИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ МАТЕРИАЛЕ\*\*

Ю.А. Гладышев, В.В. Калманович, М.А. Степович  
Калужский государственный университет им. К. Э. Циолковского,  
г. Калуга, Россия

**Аннотация.** Рассмотрены возможности использования матричного метода для решения дифференциального уравнения диффузии неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в однородной и многослойной полупроводниковых мишенях. Для однородных полупроводников проведено сравнение результатов аналитического решения и численного моделирования матричным методом.

**Ключевые слова:** электронный пучок; неосновные носители заряда; дифференциальное уравнение диффузии; матричный метод; многослойная среда.

**Введение.** Диффузия неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных широким электронным пучком в однородной полупроводниковой мишени, может быть количественно описана дифференциальным уравнением [1-3]:

$$D \frac{d^2 \Delta p(z)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z)}{\tau} = -\rho(z) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$D \left. \frac{d\Delta p(z)}{dz} \right|_{z=0} = v_s \Delta p(0), \quad \Delta p(\infty) = 0. \quad (2)$$

Здесь  $D$ ,  $\tau$ ,  $v_s$  – электрофизические параметры полупроводниковой мишени: коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно, а  $\rho(z)$  – плотность ННЗ, генерированных в полупроводнике. Значения  $\rho(z)$  могут быть определены из соотношения для плотности энергии  $\rho^*(z)$ , выделяемой в мишени в единицу времени, делением  $\rho^*(z)$  на энергию образования электронно-дырочной пары [4]. Для широкого электронного пучка справедлива полуэмпирическая формула [5]:

---

\*\* Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-03-00515)

$$\rho^*(z) = \frac{1,085(1-\eta)P_0}{\sqrt{\pi}(1-\eta+\eta z_{ss}/z_{ms})} \left( \exp \left[ -\left( \frac{z-z_{ms}}{z_{ms}} \right)^2 \right] + \frac{\eta}{\eta-1} \exp \left[ -\left( \frac{z-z_{ss}}{z_{ss}} \right)^2 \right] \right), \quad (3)$$

где  $\eta$  – коэффициент обратного рассеяния электронов пучка,  $z_{ms}$  – глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние и поглощённых мишенью,  $z_{ss}$  – глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами,  $P_0$  – мощность электронов пучка.

Ранее [5] для случая возбуждения ННЗ в однородном полубесконечном материале широким электронным пучком или световым излучением методом функций Грина было получено аналитическое решение уравнения (1), (2). Однако для полученного выражения  $\Delta\chi(z)$  отмечалась вычислительная неустойчивость при неограниченном возрастании аргумента  $z$  [6]. Данным методом расчеты проводились как для однородного материала [5], так и для двух- [7] и трехслойных [8, 9] полупроводниковых структур. Однако в планарных структурах оптоэлектроники количество слоев существенно больше. Увеличение числа слоев приводит к решению большого числа алгебраических уравнений с большим числом параметров, т.е. значительно увеличивается трудоемкость задачи. Использование других методов (операционных, вариационных, совместного использования точных и приближенных аналитических методов) приводит к различным проблемам. В этом случае, как правило, приходится решать алгебраические уравнения высоких степеней и системы алгебраических уравнений, которые могут иметь плохую обусловленность матриц коэффициентов, а в случае, когда удастся получить аналитическое решение в виде бесконечных рядов, имеется их плохая сходимость [10]. Поэтому для решения задачи (1)-(2) в случае многослойного материала предлагается новый аналитический матричный метод, (так называемый метод  $K$ -матрицы), общность которого достигается применением аппарата обобщенных степеней Берса. Понятие обобщенной степени было введено Берсом [11]. Подробно аппарат обобщенных степеней Берса и его приложения описаны в [12, 13], а кратко были изложены нами в работе [14]. Предлагаемый метод  $K$ -матрицы решения задачи тепломассопереноса сводится к последовательному умножению функциональных матриц, компоненты которых в каждой точке определяются физическими и геометрическими параметрами текущего слоя. В случае решения уравнения (1), (2) для многослойного полупроводника задача сводится к решению только одного алгебраического линейного уравнения и поиску только одного параметра при любом количестве слоев. Данный матричный метод возможно

применять также и для численного решения задачи (1), (2), когда аналитическое решение получить не удастся, как для однородной, так и для многослойной среды.

**Постановка задачи.** Цель работы – получить аналитическое решение задачи (1), (2) для однородной структуры непосредственным интегрированием, показать его устойчивость при неограниченном возрастании аргумента и сравнить результаты численного решения этой же задачи матричным методом с полученным аналитическим.

Так как правая часть в (1) представляет собой сумму двух функций гауссовского вида, поэтому рассмотрим сначала вспомогательную задачу:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} - m^2 f = C e^{-x^2}, \quad (4)$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_1} + \nu f(x_1) = 0, \quad (5)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 0, \quad (6)$$

Где  $m, C, \nu$  – заданные постоянные.

Для нахождения частного решения уравнения (4) запишем его в виде:

$$e^{mx} \frac{d}{dx} \left( e^{-2mx} \frac{d}{dx} (e^{mx} f) \right) = C e^{-x^2}$$

и проведем последовательное интегрирование с помощью методов замены переменной и интегрирования по частям. Учитывая произвольность постоянных  $C_1$  и  $C_2$ , получим общее решение в виде:

$$f(x) = \frac{C\sqrt{\pi}}{4m} e^{\frac{m^2}{4}x^2} \left[ e^{mx} \left( \operatorname{erf} \left( x + \frac{m}{2} \right) + C_1 \right) - e^{-mx} \left( \operatorname{erf} \left( x - \frac{m}{2} \right) + C_2 \right) \right]. \quad (7)$$

Так как функция ошибок  $\operatorname{erf}(x)$  является ограниченной функцией, то при  $x \rightarrow \infty$  второе слагаемое в (7) стремится к нулю. С помощью правила Лопиталья можно показать, что при  $C_1 = -1$  выполняется условие

$$\lim_{x \rightarrow \infty} e^{mx} \left( \operatorname{erf} \left( x + \frac{m}{2} \right) + C_1 \right) = 0, \quad (8)$$

а значит, и граничное условие (6) также выполнено.

Определим  $C_2$  из условия (5), подставив в него решение (7).

$$C_2 = \frac{e^{2mx_1} (m + \nu) \left( \operatorname{erf} \left( x_1 + \frac{m}{2} \right) - 1 \right)}{\nu - m} - \operatorname{erf} \left( x_1 - \frac{m}{2} \right).$$

Таким образом, аналитическое решение задачи (4), (5), (6) найдено. Вернемся к задаче (1), (2). Раскрыв скобки, запишем правую часть уравнения (1) в виде

$$-\rho(z) = K_1 e^{-\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1\right)^2} + K_2 e^{-\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1\right)^2}.$$

И далее решение задачи (1), (2) найдем как сумму решений уравнений

$$D \frac{d^2 \Delta p(z)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z)}{\tau} = K_1 e^{-\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1\right)^2} \quad \text{и} \quad D \frac{d^2 \Delta p(z)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z)}{\tau} = K_2 e^{-\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1\right)^2}$$

при граничных условиях (2) в каждом случае. Используя результат (7), получим аналитическое решение задачи (1), (2), где  $L = \sqrt{D\tau}$  – диффузионная длина,

$$\begin{aligned} \Delta p(z) = & \frac{z_{ms} K_1}{4} \sqrt{\frac{\tau}{D}} \exp\left(\frac{z_{ms}^2}{4L^2}\right) \left[ \exp\left(\frac{z_{ms}}{L}\right) \left( \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1 + \frac{z_{ms}}{2L}\right) - 1 \right) - \exp\left(-\frac{z_{ms}}{L}\right) \times \right. \\ & \left. \times \left( \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ms}} - 1 - \frac{z_{ms}}{2L}\right) + \frac{\exp\left(-\frac{2z_{ms}}{L}\right) \left(v_s - \frac{z_{ms}}{L}\right) \left(\operatorname{erf}\left(-1 + \frac{z_{ms}}{2L}\right) - 1\right) + \operatorname{erf}\left(1 + \frac{z_{ms}}{L}\right)}{v_s + \frac{z_{ms}}{L}} \right) \right] + \\ & + \frac{z_{ss} K_2}{4} \sqrt{\frac{\tau}{D}} \exp\left(\frac{z_{ss}^2}{4L^2}\right) \left[ \exp\left(\frac{z_{ss}}{L}\right) \left( \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1 + \frac{z_{ss}}{2L}\right) - 1 \right) - \exp\left(-\frac{z_{ss}}{L}\right) \times \right. \\ & \left. \times \left( \operatorname{erf}\left(\frac{z}{z_{ss}} - 1 - \frac{z_{ss}}{2L}\right) + \frac{\exp\left(-\frac{2z_{ss}}{L}\right) \left(v_s - \frac{z_{ss}}{L}\right) \left(\operatorname{erf}\left(-1 + \frac{z_{ss}}{2L}\right) - 1\right) + \operatorname{erf}\left(1 + \frac{z_{ss}}{L}\right)}{v_s + \frac{z_{ss}}{L}} \right) \right]. \end{aligned}$$

Данный результат имеет иную форму записи, чем аналитическое решение, полученное ранее методом функций Грина, которое, как отмечалось в [6], обладает вычислительной неустойчивостью на бесконечности. Полученное же нами непосредственным интегрированием уравнения (1) аналитическое решение будет устойчивым вследствие доказанного выполнения условия (6) при любых значениях коэффициентов.

**Матричный метод решения задачи тепломассопереноса для многослойных сред.** В общем виде одномерный стационарный процесс тепломассопереноса в многослойной среде может быть задан уравнением



$$D_2^{(i)} D_1^{(i)} \Phi^{(i)}(x) - m_i^2 \Phi^{(i)}(x) = \mu^{(i)}(x), \quad i = \overline{1, n}, \quad (9)$$

где потенциал  $\Phi^{(i)}(x)$  – искомая функция,

$$D_1^{(i)} = a_1^{(i)}(x) \frac{d}{dx}, \quad D_2^{(i)} = a_2^{(i)}(x) \frac{d}{dx}, \quad a_1^{(i)}(x), \quad a_2^{(i)}(x) – \text{положительные функции,}$$

определённые физическими и геометрическими параметрами слоёв,  $\mu^{(i)}(x)$  – величина, пропорциональная объёмной плотности мощности распределения источников,  $i$  – номер слоя. Поток задаётся  $J^{(i)}(x) = -D_1^{(i)} \Phi^{(i)}(x)$ . В точке контакта слоёв выполняются условия непрерывности потенциала и потока.

Если значения потенциала  $\Phi^{(1)}(x_1)$  и потока  $J^{(1)}(x_1)$  заданы, то для уравнения (9) поставлена задача Коши.

Введём вектор-столбцы  $V, W$  и матрицу  $K$  :

$$V^{(i)}(x) = \begin{pmatrix} \Phi^{(i)}(x) \\ J^{(i)}(x) \end{pmatrix}, \quad W^{(i)}(x) = \begin{pmatrix} w^{(i)}(x) \\ -D_1^{(i)} w^{(i)}(x) \end{pmatrix},$$

$$K^{(i)}(x, x_i) = \begin{pmatrix} \text{ch } mX_i(x, x_i) & -m^{-1} \text{sh } mX_i(x, x_i) \\ -m \text{sh } mX_i^0(x, x_i) & \text{ch } mX_i^0(x, x_i) \end{pmatrix},$$

где  $w^{(i)}(x)$  – частное решение уравнения (3) для  $i$ -ого слоя,  $X_i(x, x_i)$ ,  $X_i^0(x, x_i)$  – соответственно обобщенная степень и присоединенная обобщенная степень на интервале  $(x_i, x_{i+1})$ , которые образованы последовательным применением правых обратных операторов для  $D_1^{(i)}$  и  $D_2^{(i)}$ .

В работе [15] было показано, что для точек  $i$ -ого слоя:

$$V^{(i)}(x) = L^{(i,1)}(x, x_1) V^{(1)}(x_1) + \sum_{j=1}^i L^{(i,j)}(x, x_j) (W^{(j-1)}(x_j) - W^{(j)}(x_j)) + W^{(i)}(x), \quad (10)$$

где  $W^{(0)}(x_1) = 0$ ,  $L^{(i,j)}(x, x_j) = K^{(i)}(x, x_j) K^{(i-1)}(x_j, x_{i-1}) \dots K^{(j)}(x_{j+1}, x_j)$ ,  $i \geq j$ .

Обозначив общую матрицу всей системы слоёв  $K^{(n)}(x_{n+1}) = L^{(n,1)}(x_{n+1}, x_1)$  и

$$W^{(n)}(x_{n+1}) = \sum_{j=1}^n L^{(n,j)}(x_{n+1}, x_j) (W^{(j-1)}(x_j) - W^{(j)}(x_j)) + W^{(n)}(x_{n+1}) – \text{вектор}$$

дополнительных потоков, получим для конечной точки системы слоёв

$$V^{(n)}(x_{n+1}) = K^{(n)}(x_{n+1}) V^{(1)}(x_1) + W^{(n)}(x_{n+1}). \quad (11)$$

Формула (10) дает аналитическое решение задачи Коши для уравнения (9), а формула (11) позволяет при заданных  $\Phi^{(1)}(x_1)$  и  $\Phi^{(n)}(x_{n+1})$  найти  $J^{(1)}(x_1)$ , т.е. дает связь решений задачи Коши и первой краевой задачи.

Применяя данный метод к уравнению (1), получим, что  $a_1^{(i)}(x)$  равно коэффициенту диффузии  $D^{(i)}$  в  $i$ -м слое, и  $a_2^{(i)}(x)$  равно времени жизни  $\tau^{(i)}$  НЗ в  $i$ -ом слое,  $m = 1$ . Поскольку коэффициенты уравнения в каждом слое постоянны, при подстановке  $a_1^{(i)}(x)$  и  $a_2^{(i)}(x)$  в элементы матрицы  $K$  она принимает вид

$$K^{(i)}(x, x_i) = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} \frac{x - x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & -\sqrt{\frac{\tau^{(i)}}{D^{(i)}}} \operatorname{sh} \frac{x - x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \\ -\sqrt{\frac{D^{(i)}}{\tau^{(i)}}} \operatorname{sh} \frac{x - x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} & \operatorname{ch} \frac{x - x_i}{\sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}} \end{pmatrix}.$$

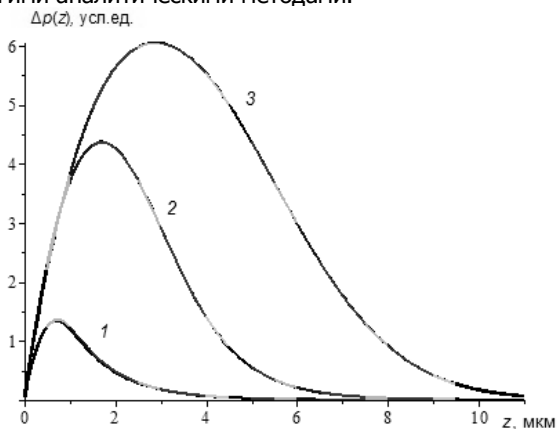
**Результаты расчетов и их обсуждение.** В работе [14] были представлены некоторые результаты реализации матричного метода для трехслойной полупроводниковой структуры. Частное решение уравнения (1) для каждого слоя при этом не находилось, т.е. метод применялся как численный. Полупроводник мысленно разбивался по глубине на некоторое число слоев, на каждом из которых правая часть уравнения (1) считалась постоянной и равной, среднему арифметическому своих значений на концах слоя. Таким образом, исходная задача как для многослойного, так и для однородного материала сводится к задаче для многослойной структуры.

В настоящей работе, чтобы оценить численные возможности предлагаемого метода, мы рассмотрели решение уравнения (1)-(2) для однородного полупроводника при воздействии широким электронным пучком с энергиями 10 кэВ, 20 кэВ и 30 кэВ. На рис. 1 приведены результаты моделирования концентрации НЗ для кремния, когда глубина полупроводника в пределах 10 мкм разбита на 20 слоёв одинаковых размеров.

Расчеты проводились при характерных электрофизических параметрах для выбранного типа мишени: времени жизни НЗ  $\tau = 10^{-8}$  с, коэффициента диффузии  $D = 10^8$  мкм<sup>2</sup>/с, скорости поверхностной рекомбинации  $v_s = 10^{10}$  мкм/с. В выбранном масштабе кривая, полученная численным моделированием матричным методом, совпадает с кривой, построенной по аналитическому выражению. Однако оценка

относительной погрешности результатов показала, что в приповерхностном слое погрешность очень высока, и наибольшее значение имеет при  $z = 0$  мкм. Это может объясняться неизбежностью округлений при вычислении аналитического результата, недостаточным количеством слоев разбиения и др.

Также необходимо отметить, что при численном моделировании распределения ННЗ матричным методом возникали и иные трудности. В силу неизбежных округлений в реальном вычислительном процессе значений функции  $\Delta\rho(z)$  результат обладал вычислительной неустойчивостью: при достаточно больших значениях аргумента (глубины материала) концентрация носителей стремилась не к нулю, а к бесконечности. Тем не менее, при значениях аргумента  $\sim 10\text{--}15$  мкм, соответствующих реальным физическим размерам материала, на которых для выбранных энергий электронного пучка распределение ННЗ убывает практически до нуля, данный метод дает приемлемый результат в сравнении с другими аналитическими методами.



**Рис. 1.** Результаты моделирования распределения ННЗ в кремнии. Энергия электронов пучка  $E_0 = 10$  кэВ (кривые 1),  $E_0 = 20$  кэВ (кривые 2),  $E_0 = 30$  кэВ (кривые 3). В выбранном масштабе кривые, полученные численно матричным методом при разбиении участка от 0 мкм до 10 мкм на 20 слоёв (участки на кривых выделены оттенками серого цвета), совпали с соответствующими кривыми, построенными по аналитической формуле

**Выводы.** Совместное применение аппарата обобщенных степеней Берса и матричного метода (метода  $K$ -матрицы) для задачи тепломассопереноса в многослойной среде дает возможность получить аналитическое решение для произвольного количества слоев с

различными параметрами. Его применение возможно и для численно-аналитического моделирования процессов переноса как в случае однородной, так и неоднородной среды.

### **Библиографический список**

1. Kyser D.F., Wittry D.B. Spatial distribution of excess carriers in electron-beam excited semiconductors // *Proceedings of the IEEE*. 1967. V. 55. No. 3. P. 733-734.

2. Wittry D.B., Kyser D.F. Measurement of diffusion lengths in direct-gap semiconductors by electron-beam excitation // *Journal of Applied Physics*. 1967. V. 38. No. 1. P. 375-382.

3. Степович М.А. Количественная катодолюминесцентная микроскопия прямозонных материалов полупроводниковой оптоэлектроники: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003. 451 с.

4. Mikheev N.N., Stepovich M.A. Distribution of energy losses in interaction of an electron probe with material // *Industrial Laboratory*. 1996. V. 62. No. 4. P. 221-226.

5. Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А. Использование модели независимых источников для расчета распределения неосновных носителей заряда, генерированных в полупроводниковом материале электронным пучком // *Известия РАН. Серия физическая*. 2002. Т. 66. № 9. С. 1317-1322.

6. Серегина Е.В., Степович М.А., Макаренков А.М., Филиппов М.Н. О некоторых проблемах моделирования распределения неосновных носителей заряда, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2016. № 4. С. 88-93.

7. Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopova M.G. The model of independent sources using for calculation of distribution of minority charge carriers, generated in two-layer semiconductor by electron beam // *Proceedings of SPIE*. 2004. V. 5398. P. 159-165.

8. Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A. Mathematical simulation of the distribution of minority charge carriers generated in a multilayer semiconducting structure by a wide electron beam // *Semiconductors*. 2007. Vol. 41. Issue 4. P. 444-447.

9. Снопова М.Г., Михеев Н.Н., Петров В.И., Степович М.А. Математическое моделирование зависимостей интенсивности монохроматической катодолюминесценции от энергии электронов пучка для трехслойной полупроводниковой структуры // *Известия РАН. Серия физическая*. 2008. Т. 72. № 11. С. 1534-1538.

10. Кузнецова А.Э. Разработка численно-аналитических методов решения задач тепломассопереноса и термоупругости для однослойных и многослойных тел: Дис. ... канд. техн. наук: 05.13.18. Самара: СГТУ, 2014. 145 с.

11. Bers L., Gelbart A. On a class of functions defined by partial differential equations // Transactions of the American Mathematical Society. 1944. V. 56. P. 67-93.

12. Гладышев Ю.А. Формализм Бельтрами-Берса и его приложения в математической физике. Калуга: КГПУ им. К.Э. Циолковского, 1997. 260 с.

13. Гладышев Ю.А. Метод обобщенных степеней Берса и его приложение в математической физике. Калуга: КГУ им. К.Э. Циолковского, 2011. 204 с.

14. Гладышев Ю.А., Калманович В.В., Степович М.А. О возможности приложения аппарата Берса к моделированию процессов тепломассопереноса, обусловленного электронами в планарной многослойной среде // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2017. № 10. С. 105-110.

15. Калманович В.В. О построении решений задач теории переноса в многослойной среде при наличии распределённых источников // Современные методы прикладной математики, теории управления и компьютерных технологий: Сборник трудов VIII международной конференции. Воронеж: Научная книга, 2015. С. 166-169.

## METADATA

**Title:** Matrix simulation method of distribution of the minority charge carriers generated by the electron beam in the semiconductor material.

**Authors:** Yu.A. Gladyshev, V.V. Kalmanovich, M.A. Stepovich

**Abstract:** The possibilities of using the matrix method for solving differential diffusion equation of minority charge carriers generated by the electron beam in a homogeneous and multilayer semiconductor target. The results of the analytical solution and numerical simulation by the matrix method are compared for homogeneous semiconductors.

**Key words:** electron beam; minority charge carriers; differential diffusion equation; matrix method; multilayered media.

## О ГИПЕРБОЛИЗАЦИИ ЯВНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

А.Ю. Глотов, В.М. Головизнин, А.В. Соловьев  
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация:** проведено исследование сходимости к фундаментальному решению гиперболизированных явных разностных схем для уравнения теплопроводности, записанных в виде системы уравнений в частных производных первого порядка. Получены достаточные условия устойчивости, показано, что расширение области устойчивости по сравнению с обычной явной схемой приводит к снижению порядка аппроксимации и может приводить к нарушению монотонности численного решения на разрывных начальных данных. Для решения гиперболизированных уравнений предложено использовать балансно – характеристические методы с нелинейной коррекцией потоков, обычно используемые в задачах вычислительной гидродинамики, в частности, схему КАБАРЕ. Приведены примеры тестовых расчетов.

**Ключевые слова:** численные методы, разностные схемы, уравнения параболического типа, гиперболизация, вычислительная гидродинамика, схема КАБАРЕ.

**Введение.** При прямом численном моделировании турбулентных течений при больших числах Рейнольдса, как правило, используются явные аппроксимации конвективных потоков. Вычислительная устойчивость явных алгоритмов сеточного переноса обеспечивается выполнением критерия Куранта-Фридрихса-Леви. Также, приходится решать и уравнение теплопроводности (конвекции – диффузии) с доминирующей конвекцией. Для молекулярных сред диффузия тепла и импульса происходит по одним и тем же законам, поэтому число Прандтля имеет величину порядка единицы: ( $Pr = \nu/\sigma : 1$ ). Это позволяет использовать явную аппроксимацию кондуктивных тепловых потоков.

Ситуация существенно меняется в случае жидкометаллических теплоносителей, электронная теплопроводность которых в сотни раз превосходит молекулярную ( $Pr : 10^{-2} - 10^{-3}$ ). Явная аппроксимация диффузионных членов приводит в этом случае к сильному измельчению временного шага. Переход к неявной аппроксимации усложняет вычислительный алгоритм и также удлиняет расчеты. Хотелось бы модифицировать явные вычислительные алгоритмы для уравнений параболического типа таким образом, чтобы область их вычислительной устойчивости слабо зависела от коэффициента теплопроводности.

Эффективным способом решения этой проблемы является «гиперболизация» явных разностных схем [1-3].

Целью настоящей работы является презентация явного вычислительного алгоритма для уравнений параболического типа с областью устойчивости, не зависящей от коэффициента теплопроводности и зависимостью  $\tau \leq h^\gamma, \gamma \in (1, 2]$ .

**Гиперболизация уравнения параболического типа и предварительные оценки устойчивости.** Рассмотрим систему одномерных уравнений в частных производных первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} &= G(x, t); \\ \alpha \frac{\partial q}{\partial t} + \sigma^{1-\beta} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} &= -\sigma^{-\beta} \cdot q; \end{aligned} \quad (1)$$

где  $T(x, t), q(x, t)$  – температура и тепловой поток,  $\sigma(x) > 0$  – коэффициент теплопроводности,  $G(x, t)$  – объемный источник или сток энергии,  $\alpha, \beta$  – некоторые параметры. При  $\alpha = 0$  эта система эквивалентна классическому уравнению теплопроводности, имеющему параболический тип, а при  $\alpha > 0$  становится гиперболической.

Проанализируем, каких результатов, в принципе, можно добиться, рассматривая различные явные разностные схемы, аппроксимирующие систему (1). Можно ожидать, что устойчивость будет определяться условием Куранта-Фридрихса-Леви:

$$c \cdot \frac{\tau}{h} \leq 1 \Rightarrow \sqrt{\frac{\sigma^{1-\beta}}{\alpha}} \cdot \frac{\tau}{h} \leq 1; \quad (2)$$

Для того, чтобы область устойчивости не зависела от величины коэффициента теплопроводности, следует положить  $\beta = 1$ . В этом случае

$$\tau \leq \sqrt{\alpha} \cdot h; \quad (3)$$

Для сохранения аппроксимации, необходимо, чтобы параметр  $\alpha$  был связан с параметрами расчетной сетки.

Пусть  $\alpha = \alpha_0 \cdot \tau$ . В этом случае  $\tau \leq \sqrt{\alpha_0} \cdot h^2$ . Качественно это условие совпадает с условием устойчивости явных схем для «классического» уравнения теплопроводности  $\tau \leq \frac{1}{2\sigma} \cdot h^2$ . Возможный

выигрыш в величине допустимого шага по времени возникает только при значениях коэффициента теплопроводности  $\sigma > 1$ . При  $\sigma < 1$  преимущество достигается при  $\beta = 0$ .

Несколько иная картина наблюдается в случае, когда  $\alpha = \alpha_0 \cdot h$ . Из (3) следует  $\tau \leq \sqrt{\alpha_0} \cdot h^\gamma$ ;  $\gamma=3/2$ . Характер степенной зависимости можно менять, полагая  $\alpha = \alpha_0 \cdot h^\lambda, \lambda \in (0, 2]$ . В этом случае условие устойчивости будет иметь вид  $\tau \leq \sqrt{\alpha_0} \cdot h^\gamma$ ;  $\gamma=1+\lambda/2$ . При  $\lambda \rightarrow 0$  показатель  $\gamma$  будет стремиться к единице, а порядок аппроксимации, соответственно, к нулю.

**Гиперболизированная разностная схема и достаточные условия устойчивости.** На вещественной оси введем два сеточных множества: множество равностоящих узлов, с координатами  $x_i$ , которое будем обозначать как  $\varpi$ , и множество центров образуемых этими узлами ячеек, с координатами  $x_{j+1/2}$ , которое будем обозначать как  $\omega$ . Пусть  $H_\varpi$  и  $H_\omega$  – множества финитных сеточных функций, определенных на  $\varpi$  и  $\omega$ , соответственно.

На множествах  $H_\varpi$  и  $H_\omega$  определим скалярные произведения как:

$$\begin{aligned} (f, g)_\omega &= \sum_{\omega} f_{i+1/2} \cdot g_{i+1/2} \cdot h_{i+1/2}; \quad f, g \in H_\omega; \quad h_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i; \\ (\varphi, \psi)_\varpi &= \sum_{\varpi} \varphi_j \cdot \psi_j \cdot h_j; \quad \varphi, \psi \in H_\varpi; \quad h_j = 0.5 \cdot (x_{j+1} - x_{j-1}); \end{aligned} \quad (4)$$

Пусть  $T \in H_\omega, q \in H_\varpi$ . Аппроксимируем систему уравнений (1) разностной схемой:

$$\frac{\hat{T} - T}{\tau} + \Lambda \hat{q} = 0; \quad \alpha \cdot \frac{\hat{q} - q}{\tau} + \frac{\hat{q}}{\sigma} + \Lambda^* T = 0; \quad (5)$$

где  $\Lambda$  и  $\Lambda^*$  – сопряженные сеточные операторы первых производных, аппроксимирующие соответствующие величины со вторым порядком по пространственной переменной:

$$\Lambda q = \left( \frac{q_{i+1} - q_i}{h_{i+1/2}} \right); \quad \Lambda^* T = \left( \frac{T_{i+1/2} - T_{i-1/2}}{h_i} \right) \quad (6)$$

Методом энергетических неравенств можно показать, что достаточное условие устойчивости гиперболизированной схемы имеет вид:

$$\tau \leq \sqrt{\alpha} \cdot h; \quad (7)$$

Следует отметить, что это условие совпадает с (3), полученным ранее из качественных соображений.

**Примеры тестовых расчетов.** Исследуем поведение гиперболизированной системы разностных уравнений при различном выборе параметра гиперболизации  $\alpha$  на задаче с дельтаобразным



источником  $G(x,t) = \delta(x,t)$ . Этот предельный случай представляется наиболее интересным, поскольку слабые стороны разностной гиперболизации должны на нем проявиться с наибольшей наглядностью.

Аппроксимируем на отрезке  $x \in [0,1]$  дифференциальную задачу разностной схемой:

$$\begin{aligned} \frac{T_{i+1/2}^{n+1} - T_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{h} &= \delta_h(t - t_0); \quad i = 1, \dots, N+1; \quad h = \frac{1}{N} \\ \alpha \cdot \frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{\tau} + \frac{T_{i+1/2}^n - T_{i-1/2}^n}{h} &= -\sigma^{-1} \cdot q_i^{n+1}; \end{aligned} \quad (8)$$

с начальными условиями  $T_{i+1/2}^0 = 0$ ;  $q_i^0 = 0$ , где  $N$  – число узлов.

Сеточная дельта – функция определяется выражением

$$\delta_h = \begin{cases} \frac{1}{h} & \text{if } \left( i = \frac{N+1}{2} \right) \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (9)$$

На границах области будем поддерживать граничные условия, соответствующие фундаментальному решению уравнения теплопроводности.

Рассмотрим случай  $\sigma = 1$ ,  $\alpha = 5 \cdot \tau$ ,  $\tau = \frac{5}{2} \cdot \frac{h^2}{\sigma}$ , что соответствует

параболическому числу Куранта, равному пяти ( $CFL=5$ ). На рис.1 представлены графики температуры, полученные в численном расчете с  $N = 100$  (ломаная кривая) и аналитическое решение (гладкая кривая) на момент времени  $t = 0.05$ . На рис.2 приведены численные и аналитические графики температуры на момент  $t = 0.13$ . Видно, что сильная немонотонность численного решения, возникающая в начальный момент, со временем исчезает, и численное решение начинает аппроксимировать аналитическое.

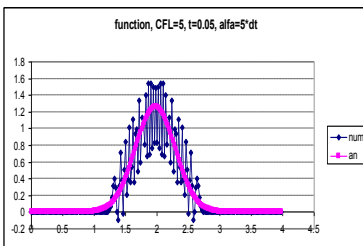


Рис. 1

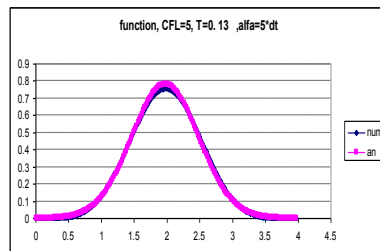


Рис. 2

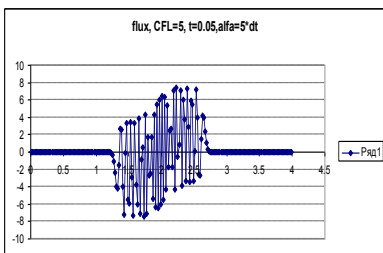


Рис. 3

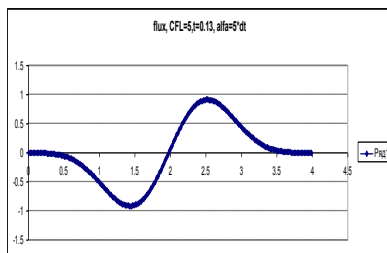


Рис. 4

Аналогично ведут себя и тепловые потоки, представленные на рис. 3 и рис. 4. В случае  $\alpha = h$ ,  $CFL=10$  начальная немонотонность резко возрастает (рис. 5), однако в дальнейшем также «рассасывается» (рис.6). Следует отметить, что, если в качестве начального условия взять аналитическое решение на момент времени  $t=0.1$ , то начальных осцилляций не наблюдается.

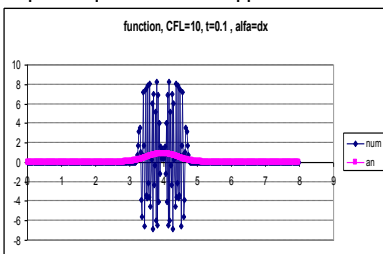


Рис. 5

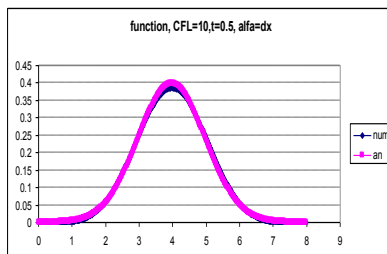


Рис. 6

Представленные результаты позволяют сделать следующие выводы:

- процедура гиперболизации позволяет проводить численные расчеты параболических задач по явным схемам при ослабленных требованиях к величинам шага по времени;
- расчеты с разрывными начальными данными сопровождаются появлением немонотонности в решении в начальные моменты времени;
- для гиперболизированных разностных схем желательно использовать нелинейную коррекцию потоков по аналогии с вычислительной гидродинамикой.

**Схема КАБАРЕ для гиперболизированных параболических уравнений.** В схеме КАБАРЕ используются переменные двух типов. Так называемые «консервативные» переменные  $(q_{i+1/2}, T_{i+1/2})$  относятся к

центрам пространственных ячеек, «потокосые» переменные  $(q_i, T_i)$  относятся к узлам.

На первом этапе алгоритма находятся консервативные переменные на полуцелом временном слое:

$$\begin{aligned} \frac{T_{i+1/2}^{n+1/2} - T_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \frac{q_{i+1}^n - q_i^n}{h} &= G_{i+1/2}^n; \\ \frac{q_{i+1/2}^{n+1/2} - q_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \frac{1}{c^2} \cdot \frac{T_{i+1}^n - T_i^n}{h} &= -\frac{1}{\sigma c^2} \cdot q_{i+1/2}^{n+1/2}; \end{aligned} \quad (10)$$

На втором этапе вычисляются римановы инварианты

$$\begin{aligned} R_i^n &= q_i^n + c \cdot T_i^n; \quad R_{i+1}^n = q_{i+1}^n + c \cdot T_{i+1}^n; \quad R_{i+1/2}^n = q_{i+1/2}^{n+1/2} + c \cdot T_{i+1/2}^n; \\ R_{i+1/2}^{n+1/2} &= q_{i+1/2}^{n+1/2} + c \cdot T_{i+1/2}^{n+1/2}; \quad Q_i^n = q_i^n - c \cdot T_i^n; \quad Q_{i+1}^n = q_{i+1}^n - c \cdot T_{i+1}^n; \\ Q_{i+1/2}^n &= q_{i+1/2}^{n+1/2} - c \cdot T_{i+1/2}^n; \quad Q_{i+1/2}^{n+1/2} = q_{i+1/2}^{n+1/2} - c \cdot T_{i+1/2}^{n+1/2}; \end{aligned} \quad (11)$$

которые, затем, линейно экстраполируются на новый временной слой

$$R_{i+1}^{*1} = 2 \cdot R_{i+1/2}^{n+1/2} - R_i^n; \quad Q_i^{*1} = 2 \cdot Q_{i+1/2}^{n+1/2} - Q_{i+1}^n \quad (12)$$

и подвергаются нелинейной коррекции по алгоритму:

$$R_{i+1}^{n+1} = \min(\bar{R}_{i+1/2}^n, \max(R_{i+1/2}^n, R_{i+1}^{*1})), \quad Q_i^{n+1} = \min(\bar{Q}_{i+1/2}^n, \max(Q_{i+1/2}^n, Q_i^{*1})), \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{R}_{i+1/2}^n &= \max\{R_{i+1}^n, R_i^n, R_{i+1/2}^n\} + \tau \cdot D_R; \\ \underline{R}_{i+1/2}^n &= \min\{R_{i+1}^n, R_i^n, R_{i+1/2}^n\} + \tau \cdot D_R; \\ \bar{Q}_{i+1/2}^n &= \max\{Q_{i+1}^n, Q_i^n, Q_{i+1/2}^n\} + \tau \cdot D_Q; \\ \underline{Q}_{i+1/2}^n &= \min\{Q_{i+1}^n, Q_i^n, Q_{i+1/2}^n\} + \tau \cdot D_Q; \\ D_R &= \frac{R_{i+1/2}^{n+1/2} - R_{i+1/2}^n}{\tau/2} + c \cdot \frac{R_{i+1}^n - R_i^n}{h}; \\ D_Q &= \frac{Q_{i+1/2}^{n+1/2} - Q_{i+1/2}^n}{\tau/2} - c \cdot \frac{Q_{i+1}^n - Q_i^n}{h}. \end{aligned} \quad (14)$$

Затем вычисляются значения потоковых переменных на новом временном слое:

$$q_i^{n+1} = 0.5 \cdot (R_i^{n+1} + Q_i^{n+1}); \quad T_i^{n+1} = 0.5 \cdot (R_i^{n+1} - Q_i^{n+1}) / c \quad (15)$$

На третьем этапе вычисляются новые значения консервативных переменных:

$$\frac{T_{i+1/2}^{n+1} - T_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{q_{i+1}^{n+1} - q_i^{n+1}}{h} = G_{i+1/2}^{n+1};$$

$$\frac{q_{i+1/2}^{n+1} - q_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{1}{c^2} \cdot \frac{T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}}{h} = -\frac{1}{\sigma c^2} \cdot q_{i+1/2}^{n+1}.$$
(16)

**Пример тестового расчета по схеме КАБАРЕ.** Рассмотрим задачу с точечным источником, описанную выше:

$$\sigma = 1, \quad \alpha = 5 \cdot \tau, \quad \tau = \frac{5}{2} \cdot \frac{h^2}{\sigma}$$
(17)

В качестве начального условия возьмем аналитическое решение на момент времени  $t = 0.001$  (рис.7). Эволюция численного решения, полученного по схеме КАБАРЕ, представлена на рис. 8-10. Видно, что вначале формируются две волны, разбегающиеся в разные стороны, что полностью соответствует гиперболическому характеру разностных уравнений. Затем, диссипация, заложенная в исходное уравнение теплопроводности, гасит высокочастотную компоненту спектра, и численное решение начинает аппроксимировать решение дифференциальной задачи.

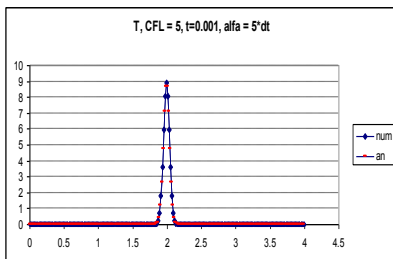


Рис. 7

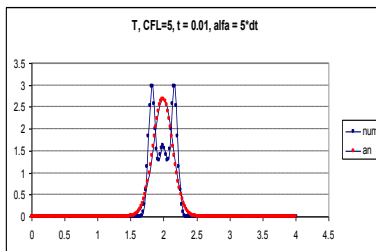


Рис. 8

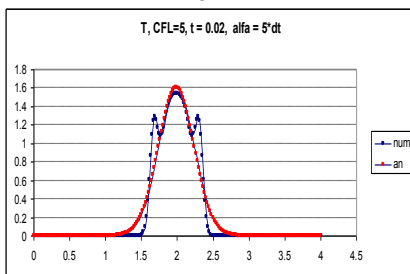


Рис. 9

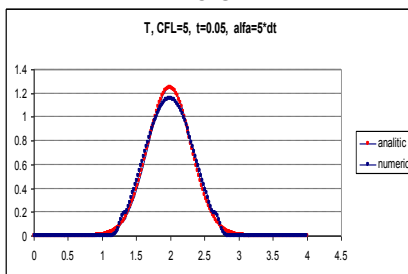


Рис. 10

Следует отметить, что при  $\alpha = \tau, \alpha = h^2$ , когда пределы устойчивости гиперболизованной разностной схемы остаются такими же, как у явной схемы для уравнения теплопроводности, расчеты при параболических числах куранта меньших единицы, не приводят к немонотонности решения в начальные моменты времени.

**Заключение.** Гиперболизация уравнений параболического типа позволяет проводить расчеты по явным разностным схемам при существенно более слабых ограничениях на величину шага интегрирования по времени, чем для обычных явных схем. Расширение области устойчивости сопровождается, при этом, понижением порядка аппроксимации по пространственным переменным. При параметре гиперболизации  $\alpha = \alpha_0 \cdot h^2, \lambda \in (0, 2]$  условие устойчивости будет иметь вид:

$$\tau \leq \sqrt{\alpha_0} \cdot h^\gamma; \quad \gamma = 1 + \lambda/2. \quad (18)$$

При  $\lambda \rightarrow 0$  показатель  $\gamma$  будет стремиться к единице, а порядок аппроксимации, соответственно, к нулю.

Гиперболизацию, не приводящую к изменению порядка аппроксимации и области устойчивости схемы, естественно назвать «слабой гиперболизацией».

Слабая гиперболизация позволяет использовать для решения параболических уравнений балансно-характеристические разностные схемы, в частности, схему КАБАРЕ.

Процедура гиперболизации практически не изменяется при переходе к нескольким пространственным переменным.

Схема КАБАРЕ для гиперболизированных параболических уравнений в одномерном случае является более «затратной», нежели обычные явные разностные схемы. Однако, в случае трех пространственных переменных при использовании неструктурированных гексагональных сеток, это нивелируется за счет того, что в схеме КАБАРЕ не требуется вычислений вторых производных и вычислительный шаблон оказывается максимально компактным.

### Библиографический список

1. Четверушкин Б.Н., Савельев В.И. Кинетические модели и высокопроизводительные вычисления // Препринты ИГМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 79. 31 с.

2. Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. Параболичность квазигазодинамической системы уравнений, гиперболичность одной ее

модификации и устойчивость малых возмущений для них, // Ж. вычисл. мат. и матем. физ., 2008, т. 49, № 3, С. 445 - 472.

3. Регин С.М., Четверушкин Б.Н. Оценка разности приближенных решений задач Коши для параболического уравнения и гиперболического уравнения с малым параметром, // ДАН, т. 461, 3, 2013, С. 255-258.

4. Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.Ф., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов.. 2013, Москва, издательство Московского университета, 467 стр.

## METADATA

**Title:** **About** exaggeration of explicit difference schemes of parabolic type.

**Authors:** V.Yu. Glotov, V. M. Goloviznin, V. A. Soloviev

**Abstract:** Research of the convergence to the fundamental solution hyperbolized explicit difference schemes for the heat equation, written as a system of equations of the first order, was performed. The sufficient conditions of stability were obtained; it is shown that the extension of the stability domain, compared to the conventional explicit scheme, is lead to a reduction of the order of approximation and may lead to violation of the monotonicity of the numerical solution for the discontinuous initial data. To solve hyperbolizing equations we proposed to use the balanced-characteristic methods with nonlinear correction flows typically used in computational hydrodynamics, in particular, the CABARET scheme. The examples of test calculations were presented.

**Key words:** numerical methods, difference schemes, equations of parabolic type, exaggeration, computational hydrodynamics, CABARE scheme.

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ ПРИ НЕПОЛНОМ РАЗРЕШЕНИИ СПЕКТРА ТУРБУЛЕНТНЫХ ПУЛЬСАЦИЙ БЕЗ НАСТРОЕЧНЫХ ПАРАМЕТРОВ**

*В.М. Головизнин, А.Ю. Глотов, А.В. Соловьев*

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация:** *проведено численное моделирование по схеме КАБАРЕ в приближении крупных вихрей задач о распаде вихря Тейлора-Грина и о турбулентном переносе свинцового теплоносителя в круглой трубе. Показано хорошее совпадение результатов с DNS расчетами других авторов и экспериментальными данными.*

**Ключевые слова:** *схема КАБАРЕ, метод крупных вихрей, вихрь Тейлора-Грина, турбулентность*

**Введение.** Проблема моделирования турбулентности по-прежнему остаётся одной из наиболее сложных и актуальных проблем механики жидкостей. Неудовлетворенность существующими полуэмпирическими моделями турбулентности (RANS), с одной стороны, и возросшие возможности современной вычислительной техники с другой, стимулируют поиск новых более строгих и универсальных подходов к расчету турбулентных течений.

Использование достаточно малых временных шагов и размеров ячеек (DNS) гарантирует, с одной стороны, точность решения, но одновременно значительно увеличивает вычислительную стоимость. Поэтому основным инструментом для моделирования реалистичных конфигураций потоков с высоким числом Рейнольдса в настоящий момент является моделирование крупных вихрей (LES). Начиная с ранних работ Смагоринского, многочисленные «подсеточные» (sgs) модели замыкания были получены путем применения физических предположений к отфильтрованным уравнениям Навье-Стокса [1]. При этом влияние схемы дискретизации обычно не исследовалось. Однако в работах [2,3] было показано, что численная диссипация схемы может быть сравнима с диссипацией подсеточной модели, и, вообще, маскировать её. Это значит, что усилия по совершенствованию вычислительных моделей турбулентности можно (может быть, даже с большим успехом) сосредоточить на разработке разностных схем с улучшенными диссипативными и дисперсионными свойствами.

В 1992 году группа авторов во главе с J.P. Boris [4] впервые предложила использовать ошибки округления схем дискретизации в качестве неявной подсеточной модели (ILES). В рамках такого подхода,

диссипация, введенная операторами приближенного пространственного дифференцирования, используется в качестве функциональной модели, воспроизводящей рассеяние на малых масштабах. Примерами схем, пригодных для ILES-моделирования, служат монотонные конечно-объемные схемы высокой разрешающей способности: FCT (Boris, 1976), PPM (Collela, 1984), TVD (Harten, 1983), MUSCL (van Leer, 1979), ENO/WENO (Shu, 1987) и другие [5]. К таким схемам относится и схема КАБАРЕ [6], развиваемая в последние годы в ИБРАЭ РАН и отличающаяся простотой и вычислительной эффективностью.

К особенностям этой схемы относятся: явность, консервативность, максимально компактный вычислительный шаблон, балансно-характеристическая форма, второй порядок аппроксимации, улучшенные дисперсионные свойства, обратимость по времени (при отсутствии пересечений характеристик одного семейства), и как следствие, бездиссипативность (на гладких решениях). В схеме КАБАРЕ используется специальный сеточный диссипативный механизм, изначально предложенный для монотонизации газодинамических решений с разрывами – нелинейная коррекция потоковых переменных на основе математического принципа максимума. При моделировании турбулентных течений этот механизм работает как узкополосный фильтр, удаляющий мелкомасштабные пульсации, тем самым обеспечивая отвод энергии каскада турбулентности на «подсеточный» уровень. Данный фильтр слабо влияет на крупные масштабы, и позволяет сохранить статистические характеристики турбулентности, по крайней мере, с инженерной точностью (~5%). Таким образом реализуется метод крупных вихрей.

Схема КАБАРЕ имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционным подходом, использующим вихревую вязкость, – это отсутствие каких-либо настроечных параметров, что ведёт к большей универсальности метода, нет проблем с устойчивостью и сходимостью численных решений, а также простота в реализации. Целью данной работы является исследование возможностей схемы КАБАРЕ при расчете турбулентных течений. В качестве тестовых задач рассматривались две классические задачи – задача о распаде вихря Тейлора-Грина, и задача о турбулентном теплопереносе в круглой трубе. Результаты расчетов сравниваются с DNS расчетами других авторов и экспериментальными данными, также проводится кросс верификация с коммерческим кодом Star-CCM+, использующим различные RANS/LES модели турбулентности.

**Вихрь Тейлора-Грина.** Рассматривается модель несжимаемой жидкости с постоянными свойствами



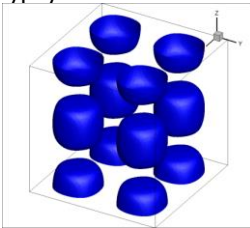
$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \operatorname{div}(u_i \mathbf{u}) + \frac{1}{\rho} \nabla_i P = \nu \Delta u_i, \quad i = 1..3' \quad (19)$$

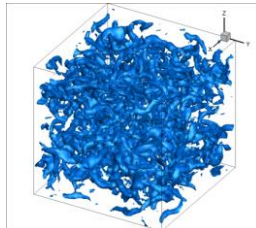
где  $u_i, i=1..3$  – скорость,  $\rho$  – плотность,  $P$  – давление,  $\nu$  – кинематическая вязкость. Вихрь Тейлора–Грина (Taylor–Green vortex, 1937) представляет собой течение в периодичной кубической расчётной области размерами  $-\pi < x, y, z < \pi$  при следующих начальных условиях:

$$\begin{cases} u_x = \sin(x)\cos(y)\cos(z) \\ u_y = -\cos(x)\sin(y)\cos(z) \\ u_z = 0 \\ p = p_0 + \frac{1}{16}(\cos(2x) + \cos(2y))(\cos(2z) + 2) \end{cases} \quad (20)$$

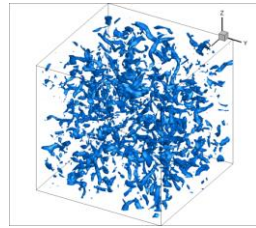
Эволюция вихревого течения (20) представляет собой наглядный пример распада первоначального одиночного стационарного вихря с последующим образованием каскада все более и более мелких вихревых образований, которые постепенно затухают за счет присущих течению диссипативных процессов (рис. 1-3). Данная задача хорошо изучена теоретически и служит моделью свободной однородной изотропной турбулентности.



**Рис. 1.**



**Рис. 2.**



**Рис. 3.**

Расчеты проводились для двух значений числа Рейнольдса ( $Re = 1/\nu$ ):  $Re = 1600$  и  $Re = 5000$ . При этом применялись равномерные расчетные сетки  $64^3$ ,  $128^3$ ,  $256^3$  и  $512^3$ . Интегрирование по времени велось с шагом, соответствующим числу Куранта  $CFL = 0,3$ . Для прямого численного моделирования расчетная область должна содержать не менее  $Re^{9/4}$  ячеек, что соответствует сетке  $253^3$  для  $Re = 1600$  и  $597^3$  для  $Re = 5000$ . Для сравнения приведены данные прямого численного моделирования с помощью псевдоспектрального метода, полученные на

сетке  $512^3$  для  $Re=1600$  [7], и на сетке  $864^3$  для  $Re=5000$  [8] соответственно.

На рис. 4-6 представлены профили безразмерной скорости диссипации кинетической энергии  $\varepsilon = -dE_k/dt$  для  $Re=1600$ . Из рисунков видно, что хорошее совпадение результатов достигается уже на сетке  $128^3$ .

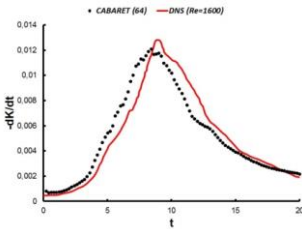


Рис. 4.  $64^3$ ,  $Re=1600$

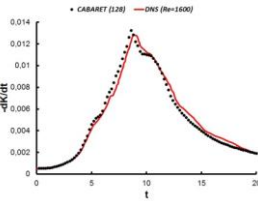


Рис. 5.  $128^3$ ,  $Re=1600$

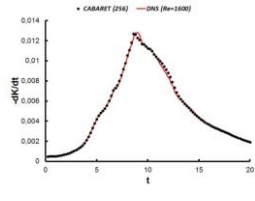


Рис. 6.  $256^3$ ,  $Re=1600$

Энергетический спектр в момент времени  $T=9$ , когда скорость диссипации достигает максимума, приведен на рисунках 7-8. Спектр на сетке  $256^3$  слабо отличается от DNS. Небольшое отличие есть только в «хвосте» спектра начиная с гармоники  $k_{256} \approx 35$ . Для сетки  $128^3$  расхождение возникает с гармоники  $k_{128} \approx 25$ .

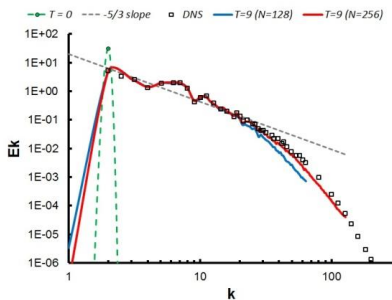


Рис. 7. Энергетический спектр  $Re=1600$

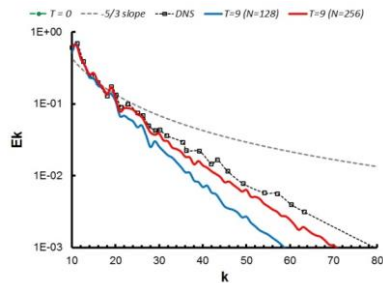
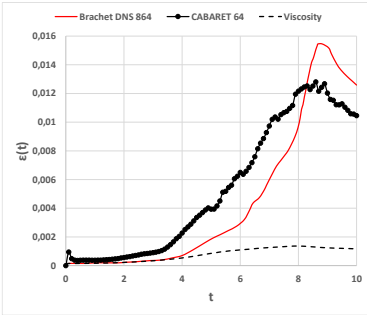
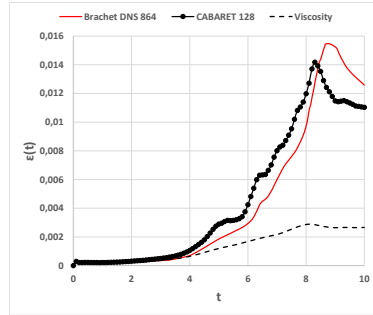


Рис. 8. «Хвосты» спектров

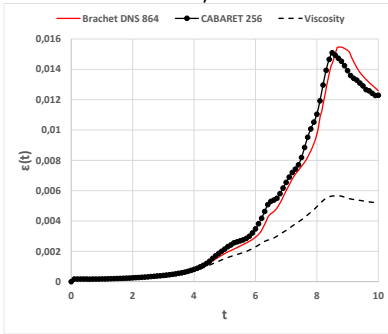
Аналогичные результаты для  $Re=5000$  приведены на рисунках 9-14.



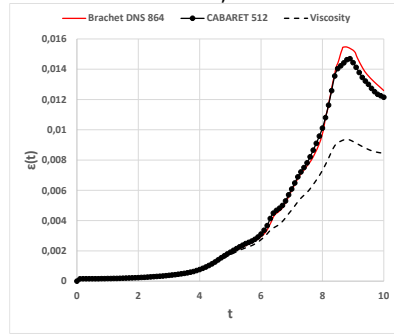
**Рис. 9.**  $64^3$ ,  $Re=5000$



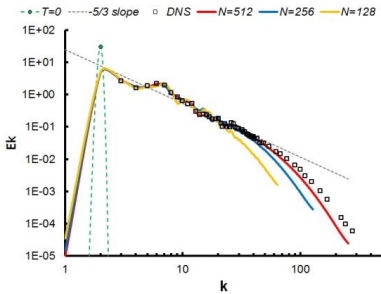
**Рис. 10.**  $128^3$ ,  $Re=5000$



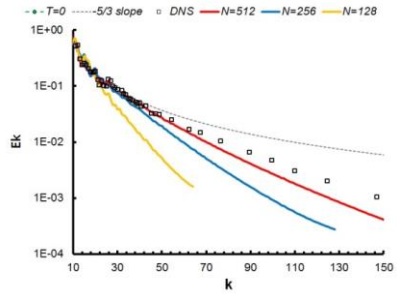
**Рис. 11.**  $256^3$ ,  $Re=5000$



**Рис. 12.**  $512^3$ ,  $Re=5000$



**Рис. 13.** Энергетический спектр  $Re=5000$



**Рис. 14.** «Хвосты» спектров

Загиб спектра вниз возникает на гармониках  $k_{128} \approx 25$ ,  $k_{256} \approx 40$  и  $k_{512} \approx 70$ .

Таким образом:

- Результаты расчета вихря Тейлора-Грина по схеме КАБАРЕ имеют приемлемую точность на сетках в 3-4 раза более грубых по каждому направлению, чем DNS

- Неявная фильтрация, основанная на нелинейной коррекции в схеме КАБАРЕ, оказывает влияние на структуры, определенные менее чем на 5-6 узлах сетки.

### **Турбулентный теплоперенос в круглой трубе.**

Рассматривается модель ньютоновской сжимаемой жидкости с постоянными свойствами, описываемая уравнениями

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \partial_t u_i + \operatorname{div}(u_i \mathbf{u}) + \nabla_i P / \rho &= \nu \Delta u_i, \quad i = 1..3, \\ \partial_t T + \operatorname{div}(T \mathbf{u}) &= a \Delta T \end{aligned} \quad (21)$$

с уравнением состояния  $P = c^2 (\rho - \rho_0)$ , где константа  $c$  выбирается из условия слабой сжимаемости  $\delta \rho / \rho_0 : (u/c)^2 : 10^{-2}$ . В качестве теплоносителя выбран свинец с числом Прандтля  $Pr = \nu/a = 1,54 \cdot 10^{-2}$ .

Расчетная область – труба радиуса  $R = 5 \cdot 10^{-3}$  м и длиной  $L$ . В начальный момент времени в трубе задается параболический профиль Пуазейля, возмущенный случайным бездивергентным однородным полем пульсаций малой интенсивности ( $\approx 5\%$ ). Жидкость приводится в движение градиентом давления, который регулируется динамически из условия сохранения потока массы. На боковых поверхностях задаются условия прилипания и постоянный тепловой поток  $q_w = 10^5 \text{ Bm}/\text{m}^2$ . На торцах трубы ставятся периодические граничные условия с заданной среднемассовой температурой на входе  $T_b = 773 \text{ }^\circ\text{K}$ . Расчеты проводились на гексагональных сетках при числах Рейнольдса ( $Re = U_m D / \nu$ ) 5300, 11700, 19000 и 37700. Параметры сеточной модели приведены в табл. 1.

Таблица 1  
Параметры сеточной модели

Re	$L/R$	$N_{cell}$	$N_\phi$	$N_z$	$\Delta r_{min}^+$	$\Delta R \theta_{max}^+$	$\Delta_{center}^+$	$\Delta z^+$
5300	20	$2.98 \times 10^6$	128	440	3,0	8,8	3,1-3,5	8,1
11700	10	$5.22 \times 10^6$	200	320	3,0	11,2	4,4-5,0	11,2
19000	10	$19.52 \times 10^6$	320	500	3,0	10,8	4,4-5,0	11,0
37700	15	$44.16 \times 10^6$	624	1000	3,0	10,1	12,9	15,0

На рис. 15 приведены поля скорости и завихренности в некоторый момент времени. Одним из основных исследуемых характеристик течения является коэффициент гидравлического сопротивления  $C_f = \Delta P / L \cdot 2D / \rho U_m^2$  (рис. 16а, табл. 2) и коэффициент теплоотдачи  $Nu = q_w / (T_w - T_b) \cdot 2D / \lambda$  (рис. 16б, табл. 3). Эмпирическая зависимость для коэффициента сопротивления в трубах для  $5 \cdot 10^3 < Re < 10^5$  хорошо описывается формулой Блазиуса:  $C_f = 0,3164 / \sqrt[4]{Re}$ , а для коэффициента теплоотдачи формулой Субботина  $Nu = 5 + 0,025 \cdot Pe^{0,8}$ .

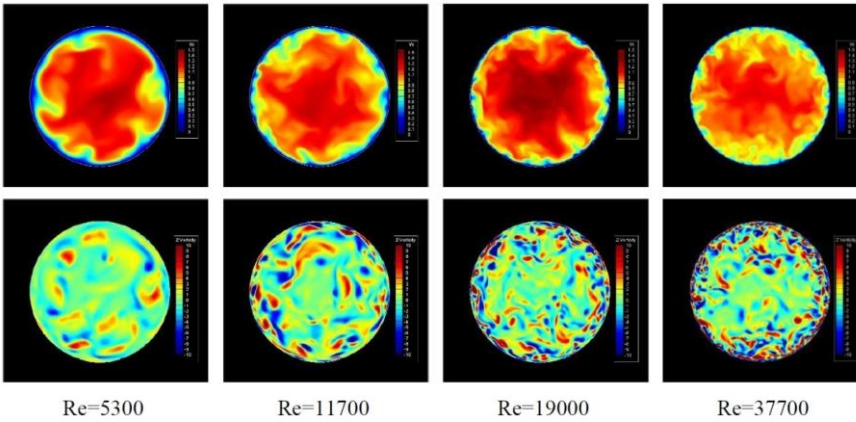


Рис. 15. Поля скорости (сверху) и завихренности (снизу)

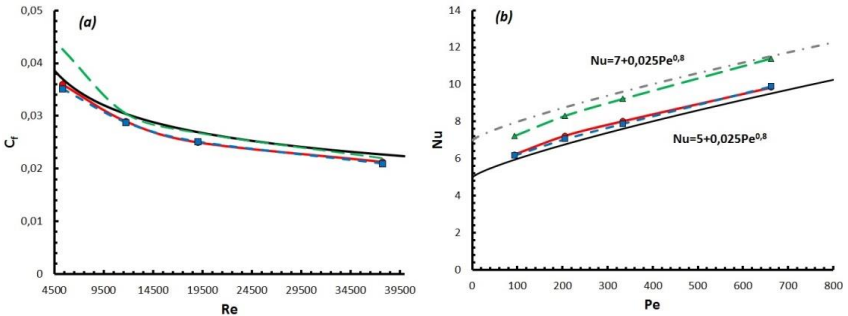


Рис. 16. а - коэффициент гидравлического сопротивления,  
 б - коэффициент теплоотдачи;  
 —, КАБАРЕ; - - -, LES (WALE); - · - ·, RANS (k-ε real).

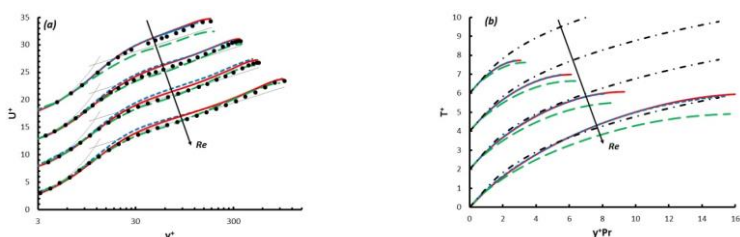
Таблица 2

Коэффициент гидродинамического сопротивления				
Re	Формула Блазиуса	КАБАРЕ	LES (WALE)	RANS (k-e real.)
5300	0,0370	0,0355 (-4,0%)	0,0352 (-5,1%)	0,0427 (+15,4%)
11700	0,0304	0,0289 (-5,0%)	0,0288 (-5,2%)	0,0305 (+0,24%)
19000	0,0269	0,0250 (-7,1%)	0,0251 (-6,7%)	0,0268 (-0,3%)
37700	0,0227	0,0213 (-6,1%)	0,0210 (-7,5%)	0,0220 (-3,3%)

Таблица 3

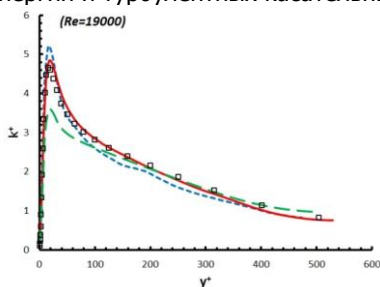
Коэффициент теплоотдачи				
Re	Формула Субботина	КАБАР Е	LES (WALE)	RANS (k-e real.)
5300	5,94	6,22 (+4,8%)	6,18 (+4,0%)	7,22 (+21,5%)
11700	6,77	7,23 (+6,8%)	7,06 (+4,2%)	8,31 (+22,7%)
19000	7,61	8,02 (+5,4%)	7,89 (+3,7%)	9,22 (+21,1%)
37700	9,52	9,83 (+3,3%)	9,90 (+4,0%)	11,39 (+19,7%)

На рис. 17 представлены средние характеристики течения – профиль продольной средней скорости и профиль температуры. Результаты сравниваются с DNS-расчетами, выполненными с помощью метода спектральных элементов высокого порядка (Nek5000, 2013) [9]. Эмпирическая зависимость для профиля температуры взята из [10].

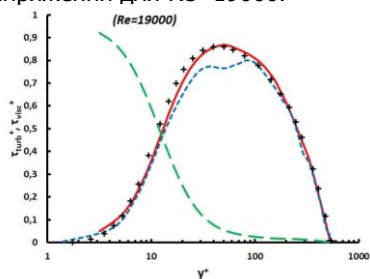


**Рис. 17.** **a** – профиль средней скорости. **b** – профиль средней температуры;  
 ●, DNS [9]; —•—, [10]; —, КАБАРЕ; - - -, LES (WALE); - - - -, RANS (k-e real.)

На рис. 18-19 представлены профили турбулентной кинетической энергии и турбулентных касательных напряжений для  $Re=19000$ .



**Рис. 18.** Кинетическая энергия турбулентности  
 □, DNS [9]; —, КАБАРЕ; - - -, LES (WALE); - - - -, RANS (k-e real.)



**Рис. 19.** Турбулентные касательные напряжения;  
 +, DNS [9]; —, КАБАРЕ; - - -, LES (WALE); вязкие касательные напряжения — - -, КАБАРЕ

**Заключение.** Проведено исследование свойств схемы КАБАРЕ применительно к моделированию в приближении крупных вихрей свободных и пристеночных турбулентных течений в широком диапазоне чисел Рейнольдса. Показано хорошее совпадение ( $\pm 5\%$ ) с DNS-расчетами и справочными данными по всем основным характеристикам течений. Результаты кросс верификации с кодом Star-CCM+ дают основание утверждать, что схема КАБАРЕ, без использования каких-либо полуэмпирических моделей и настроечных параметров, не уступает в точности традиционным подходам для моделирования турбулентности.

### Библиографический список

1. Волков, К.Н. and В.Н. Емельянов, Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. 2008, Москва: ФИЗМАТЛИТ.

2. S. Ghosal, An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence, *J. Comput. Phys.* **125**, 187, (1996)
3. A. G. Kravchenko and P. Moin, On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows, *J. Comput. Phys.* **131**, 310 (1997)
4. Boris J.P., et al., *New Insights into Large Eddy Simulation. Fluid Dynamics Research*, 1992. **10**: p. 199-228.
5. Grinstein, F.F., Margolin L.G., Rider W.J. *Implicit Large Eddy Simulation*. 2007: Cambridge University Press.
6. Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.Ф., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов.. 2013, Москва, издательство Московского университета, 467 стр.
7. Van Rees W.M., Leonard A., Pullin D.I., Koumoutsakos P. A comparison of vortex and pseudo-spectral methods for the simulation of periodic vortical flows at high Reynolds numbers. *J. Comput. Phys.*, 2011, vol. 230, pp. 2794-2805.
8. Brachet, M., Direct simulation of the three-dimensional turbulence in the Taylor-Green vortex. *Fluid Dynamics Research*, 1991. **8**: p. 1-8.
9. Khoury, G.K.E. et al. Direct Numerical Simulation of Turbulent Pipe Flow at Moderately High Reynolds Numbers // *Flow Turbulence Combust* (2013), 2013. **91**: p. 475-495.
10. Кириллов П.Л., Юрьев Ю.С., Бобков В.П. *Справочник по теплогидравлическим расчетам (Ядерные реакторы, теплообменники, парогенераторы)* 1990, Москва: Энергоатомиздат. 360 с.

## METADATA

**Title:** Numerical simulation of turbulent flows with incomplete resolution of turbulent fluctuations spectrum without tuning parameters.

**Authors:** V. M. Goloviznin, A. Yu. Glotov, V. A. Soloviev

**Abstract:** Numerical simulation of the CABARET scheme in the approximation of large-eddy problem of decay the Taylor-Green vortex and turbulent heat transfer in a lead coolant in a circular tube was performed. The good coincidence between the results from DNS calculations by other authors and experimental data was shown.

**Key words:** CABARET scheme, method of large eddies, the Taylor-Green vortex, turbulence.



## СХЕМА КАБАРЕ – АЛГОРИТМ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКЕ

*В.М.Головизнин*

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация:** *Описывается новый подход построению вычислительных алгоритмов нового поколения для задач вычислительной гидродинамики, объединяющий сильные стороны консервативных и характеристических разностных схем.*

**Ключевые слова:** *вычислительная гидродинамика, разностная схема, законы сохранения, характеристическая форма гиперболических уравнений, коррекция потоков, схема КАБАРЕ.*

**Предмет вычислительной гидродинамики.** Под вычислительной гидродинамикой обычно понимают технологию численного решения уравнений Эйлера и Навье-Стокса с учетом сопутствующих физико – химических процессов. В последнее время, однако, этот термин начал приобретать более широкий и глубокий смысл. Наметилась тенденция [1] рассматривать в качестве предмета вычислительной гидродинамики не область приложений, а математическую природу решаемых уравнений, которую определяет, с одной стороны, дивергентный характер законов сохранения, а с другой стороны, свойство гиперболичности, или «почти гиперболичности».

Под «почти гиперболичными» системами уравнений будем понимать линейные или квазилинейные системы законов сохранения с «возмущенной» правой частью, представляющей собой эллиптический или интегральный оператор, умноженный на малый параметр  $\varepsilon$ . Почти гиперболические системы называют еще системами с доминирующей гиперболичностью (доминирующим переносом). При таком расширенном толковании к области вычислительной гидродинамик можно отнести линейную и нелинейную акустику и оптику, уравнения Максвелла, уравнение Больцмана, уравнение конвекции – диффузии с доминирующей конвекцией, уравнения Эйлера, уравнения Навье-Стокса при больших числах Рейнольдса, уравнения МГД с вмороженными или «почти вмороженными» магнитными полями, динамические задачи теории упругости, концентрационную часть уравнений Лаверетта-Бакли, уравнения динамики атмосферы и океана и т.п.

**Проблемы вычислительной гидродинамики.** Гиперболическая природа задач вычислительной гидродинамики определяет их основную особенность, связанную с возможным наличием

слабых и сильных разрывов и, в нелинейных случаях, механизмов их образования в процессе эволюции. Для квазилинейных законов сохранения с доминирующей гиперболичностью также характерна многомасштабность – нелинейное взаимодействие когерентных структур разных размеров - от крупных образований, определяемых размерами области, до самых мелких, лимитируемых параметром возмущения гиперболичности  $\varepsilon$ .

Одной из основных проблем вычислительной гидродинамики в настоящее время является сходимость численного решения к результатам экспериментальных наблюдений при измельчении расчетных сеток. Здесь сложным образом переплетаются две составляющие - проблема адекватности математической модели и непосредственно проблема сеточной сходимости. Можно сказать, что главным вопросом вычислительной гидродинамики на сегодняшний день является вопрос о повышении предсказательной способности расчетов при измельчении расчетных сеток. Для линейных уравнений этот вопрос решается теоретически, для нелинейных – на уровне рецептов.

Применительно к задачам классической гидродинамики основным не текущий момент можно считать вопрос о предсказательной способности методов численного моделирования турбулентных течений при неполном разрешении спектра турбулентных пульсаций.

**Принципы вычислительной гидродинамики.** Количество рецептов в вычислительной гидродинамике постоянно растет. Однако, в их пестром разнообразии намечается тенденция к унификации. Появляются трактовки и подходы, претендующие на универсальность. Прежде всего следует отметить принцип консервативности, согласно которому вычислительные алгоритмы должны на дискретном уровне выражать законы сохранения, заложенные в дифференциальные модели. Важную роль играют принцип сохранения монотонности численного решения и процедуры нелинейной коррекции потоков, его обеспечивающие. Гиперболический характер задач вычислительной гидродинамики находит свое отражение во все более широком применении различных вариантов задачи о распаде произвольного разрыва. На очереди, по всей видимости, более органичное объединение консервативных и характеристических методов.

Можно надеяться, что объединение консервативных и характеристических подходов, последовательно проведенное для всего множества задач вычислительной гидродинамики, позволит существенно улучшить и методы расчета турбулентных течений с неполным разрешением спектра турбулентных пульсаций.

**Консервативность и гиперболичность – от простого к сложному.** Попытки объединения принципов, заложенных в консервативных и характеристических разностных схемах, предпринимались давно. Сильное влияние на вычислительное сообщество оказали работы А.С. Холодова [2] по гибридизации метода характеристик с сеточными методами. Однако этот подход не нашел широкого практического применения, главным образом из-за отсутствия в то время необходимых вычислительных ресурсов. Бурное развитие вычислительной техники породило запрос на новые идеи по объединению консервативности и гиперболичности в рамках единой вычислительной методики, и начало этому было положено в работах по исследованию исчерпывающего множества разностных схем второго порядка для простейшего уравнения переноса (Головизнин В.М., Самарский А.А.) [3-5].

В основу этих работ был положен метод «обратной характеристики», ранее предложенный А.С. Холодовым. Применение этого метода позволило сгенерировать все возможные разностные схемы второго порядка на компактных вычислительных шаблонах. Всего их оказалось 19. Последующий анализ диссипативных и дисперсионных свойств этих схем позволил выявить лучшую из них, получившую название «Схема КАБАРЕ».

В первоначальном варианте схема КАБАРЕ была трехслойной, и как потом выяснилось, совпадала с одним из частных случаев трехслойного семейства разностных схем, рассмотренных ранее в работе И. Айзерлиса [6]. Важным шагом на пути объединения консервативного и характеристического подходов стало преобразование исходной трехслойной схемы в двухслойную посредством введения дополнительных переменных, относящихся к центрам расчетных ячеек и имеющих смысл средних по ячейкам. Новые переменные получили название «консервативных», поскольку они подчиняются уравнению баланса, в котором потоки через границы ячейки вычисляются через узловое значения сеточной функции, получившие название «поточковых». Значения поточковых переменных на новом временном слое определяются, при этом, линейной экстраполяцией через промежуточный временной слой с учетом направления характеристики.

Двухслойная схема КАБАРЕ, записанная в терминах консервативных и поточковых переменных имеет второй порядок аппроксимации, является явной, устойчивой при числах Куранта от нуля до единицы и бездиссипативной. Для ее монотонизации в областях сильных градиентов используется оригинальная процедура нелинейной коррекции потоков, основанная на принципе максимума.

Двухслойная схема КАБАРЕ естественным образом обобщается на все задачи, объединяемые термином вычислительная гидродинамика. При прохождении «развилки» при принятии решений в процессе обобщения исследовались все возможные варианты, из которых выбирался наилучший. Последовательно были разобраны случаи одномерных нелинейных скалярных законов сохранения с выпуклыми и невыпуклыми потоками, одномерных линейных систем гиперболических уравнений (колебания струны), простейшей системы одномерных квазилинейных законов сохранения (уравнения мелкой воды, одномерные системы уравнений газовой динамики в эйлеровых и лагранжевых переменных, уравнения двухслойной мелкой воды), двумерные уравнения конвекции – диффузии с доминирующей конвекцией, двумерные уравнения Эйлера на ортогональных и косоугольных расчетных сетках, двумерные уравнения мелкой воды на сфере, трехмерные уравнения Эйлера и Навье-Стокса на косоугольных гексагональных неструктурированных сетках [7].

**Схема кабаре для уравнений мелкой воды.** Единая консервативно – характеристическая природа схемы КАБАРЕ в полной мере начинает проявляться на системах из двух и более уравнений, когда консервативная и характеристическая формы записи уравнений начинают заметно различаться [8]. Проиллюстрируем это на примере простейшей квазилинейной системы уравнений мелкой воды. Консервативная (дивергентная) форма записи этих уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial Hu}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial Hu}{\partial t} + \frac{\partial Hu^2}{\partial x} + \frac{g}{2} \cdot \frac{\partial H^2}{\partial x} = 0; \quad (22)$$

В характеристической форме они выглядят как:

$$\frac{\partial R}{\partial t} + (u+c) \cdot \frac{\partial R}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial Q}{\partial t} + (u-c) \cdot \frac{\partial Q}{\partial x} = 0; \quad (23)$$

$$c = \sqrt{gH}; \quad R = u + 2c; \quad Q = u - 2c;$$

Вычислительный алгоритм схемы КАБАРЕ включает в себя три фазы. На первой фазе по заданным на текущем временном слое консервативным и потоковым переменным вычисляются консервативные величины на промежуточном временном слое по консервативной разностной схеме:

$$\begin{aligned}
& \frac{H_{i+1/2}^{n+1/2} - H_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \frac{(Hu)_{i+1}^n - (Hu)_i^n}{h} = 0; \\
& \frac{(Hu)_{i+1/2}^{n+1/2} - (Hu)_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \frac{(Hu^2)_{i+1}^n - (Hu^2)_i^n}{h} + \\
& + \frac{g}{2} \cdot \frac{\partial(H^2)_{i+1}^n - (H^2)_i^n}{h} = 0;
\end{aligned} \tag{24}$$

На второй фазе находятся потоковые переменные на новом временном слое. Их вычисление происходит с использованием характеристической формы уравнений. По известным значениям инвариантов Римана на текущем и промежуточном слоях, линейной экстраполяцией с учетом направления характеристик вычисляются их предварительные значения на новом временном слое

$$R_{i+1}^{g+1} = 2 \cdot R_{i+1/2}^{n+1/2} - R_i^n; \quad Q_{i+1}^{g+1} = 2 \cdot Q_{i+1/2}^{n+1/2} - Q_i^n \tag{25}$$

Здесь рассмотрен случай дозвуковых течений, когда  $|u| < c$ .

Далее, эти предварительные значения подвергаются коррекции в соответствии с принципом максимума:

$$R_{i+1}^{n+1} = \begin{cases} R_{i+1}^{g+1} & \text{if } (\max R)_{i+1/2}^n \geq R_{i+1}^{g+1} \geq (\min R)_{i+1/2}^n \\ (\max R)_{i+1/2}^n & \text{if } R_{i+1}^{g+1} > (\max R)_{i+1/2}^n; \\ (\min R)_{i+1/2}^n & \text{if } R_{i+1}^{g+1} < (\min R)_{i+1/2}^n \end{cases} \tag{26}$$

$$Q_{i+1}^{n+1} = \begin{cases} Q_{i+1}^{g+1} & \text{if } (\max Q)_{i+1/2}^n \geq Q_{i+1}^{g+1} \geq (\min Q)_{i+1/2}^n \\ (\max Q)_{i+1/2}^n & \text{if } Q_{i+1}^{g+1} > (\max Q)_{i+1/2}^n; \\ (\min Q)_{i+1/2}^n & \text{if } Q_{i+1}^{g+1} < (\min Q)_{i+1/2}^n \end{cases}$$

где

$$\begin{aligned}
(\max R)_{i+1/2}^n &= \max(R_i^n, R_{i+1/2}^n, R_{i+1}^n); \\
(\min R)_{i+1/2}^n &= \min(R_i^n, R_{i+1/2}^n, R_{i+1}^n); \\
(\max Q)_{i+1/2}^n &= \max(Q_i^n, Q_{i+1/2}^n, Q_{i+1}^n); \\
(\min Q)_{i+1/2}^n &= \min(Q_i^n, Q_{i+1/2}^n, Q_{i+1}^n);
\end{aligned} \tag{27}$$

Новые потоковые переменные находятся затем из решения системы уравнений:

$$u_i^{n+1} + 2\sqrt{gH_i^{n+1}} = R_i^{n+1}; \quad u_i^{n+1} - 2\sqrt{gH_i^{n+1}} = Q_i^{n+1} \quad (28)$$

На третьей, последней фазе, по консервативной разностной схеме вычисляются новые величины консервативных переменных

$$\begin{aligned} \frac{H_{i+1/2}^{n+1} - H_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{(Hu)_{i+1}^{n+1} - (Hu)_i^{n+1}}{h} = 0; \\ \frac{(Hu)_{i+1/2}^{n+1} - (Hu)_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{(Hu^2)_{i+1}^{n+1} - (Hu^2)_i^{n+1}}{h} + \\ + \frac{g}{2} \cdot \frac{\partial(H^2)_{i+1}^{n+1} - (H^2)_i^{n+1}}{h} = 0; \end{aligned} \quad (29)$$

### **Особенности схемы кабаре на многомерных задачах.**

Характеристическая форма уравнений вычислительной гидродинамики позволяет в расчетных ячейках определять локальные римановы инварианты, даже если для течения в целом они не существуют. Процедура экстраполяции этих инвариантов является важнейшим элементом метода. Благодаря ей схема становится обратимой по времени, пока эту обратимость не нарушит нелинейная коррекция потоков.

При обобщении на многомерные случаи удается сохранить все позитивные свойства схемы КАБАРЕ, включая бездиссипативность при расчетах акустических колебаний и вихревых структур, в которых характеристики одного семейства не пересекаются, и процедура нелинейной коррекции не включается.

**Основные свойства схемы кабаре на задачах вычислительной гидродинамики.** К основным свойствам схемы КАБАРЕ можно отнести следующее:

- схема определена на минимально возможном вычислительном шаблоне – одной пространственно – временной расчетной ячейке;
- схема явная, устойчива при числах Куранта, меньших 0.5;
- на нерегулярных косоугольных расчетных ячейках с четным числом граней имеет второй порядок аппроксимации;
- процедура нелинейной коррекции потоков для схемы КАБАРЕ базируется на фундаментальном принципе максимума и не имеет настроечных параметров;
- при отключенной процедуре коррекции потоков схема обладает свойством временной обратимости, т.е. является бездиссипативной;
- схема объединяет достоинства консервативных и характеристических разностных схем и может быть использована для

решения всего множества задач из области вычислительной гидродинамики.

**Практика моделирования турбулентных течений.** С появлением многопроцессорных вычислительных комплексов реальностью становятся расчеты турбулентных течений, обладающие предсказательной способностью – сходимостью к результатам натурных экспериментов при измельчении расчетных сеток. Различают два типа предсказательного моделирования турбулентности: расчеты с полным разрешением спектра турбулентных пульсаций (DNS) и расчеты с неполным разрешением спектра (LES, IMLES, MILES и т.п.).

И те, и другие предъявляют повышенные требования как к вычислительным ресурсам, так и к характеристикам вычислительных алгоритмов. Критической становится проблема зависимости результатов расчетов от настроечных параметров.

Можно сформулировать основные требования к вычислительным алгоритмам нового поколения, нацеленным на решение фундаментальной проблемы предсказательного моделирования турбулентности: полное или неполное разрешение спектра турбулентных пульсаций, отсутствие настроечных параметров, применимость в областях сложной формы, робастность, консервативность, масштабируемость, мультифизичность. Этот перечень, можно расширять, но отказ хотя бы от одного из перечисленных качеств существенно сузит сферу возможного практического применения.

Схема КАБАРЕ в настоящее время реализована в нескольких программных комплексах и успешно используется при решении задач аэроакустики – расчетах звуковых полей, создаваемых турбулентными струями реактивных двигателей. Достаточно большой опыт накоплен также в расчетах турбулентного теплопереноса в ядерных реакторах с жидкометаллическим теплоносителем. Во всех случаях ее использования она демонстрирует все перечисленные выше свойства, предъявляемые к алгоритмам нового поколения.

**Заключение.** Схема КАБАРЕ является эффективным и универсальным инструментом для решения квазилинейных систем законов сохранения гиперболического или почти гиперболического типа. Она удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к идеальным вычислительным алгоритмам для моделирования турбулентных течений с полным и неполным разрешением турбулентных пульсаций.

### Библиографический список

1. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: Физматлит, 2001. – 607 с.
2. Магомедов К.Н., Холодов А.С. Сеточно-характеристические численные методы. –М.: Наука, 1988
3. Головизнин, В.М., Самарский А.А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Математическое моделирование. – 1998. – 10(1). – Р. 86–100.
4. Головизнин В.М., Самарский А.А. Некоторые свойства разностной схемы «КАБАРЕ» //Математическое моделирование. – 1998. – 10(1). – Р. 101–116.
5. Головизнин В.М., Иванов А.В., Соловьева Е.В. Явные разностные схемы второго порядка аппроксимации для простейшего одномерного уравнения переноса на минимальных компактных вычислительных шаблонах. – Препринт ИБРАЭ № IBRAE-2008-09, 2008.
6. Iserles, A. Generalized Leapfrog Methods // IMA Journal of Numerical Analysis. – 1986. – 6(3). – Р. 381–392.
7. Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.Ф., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов.. 2013, Москва, издательство Московского университета, 467 стр
8. Головизнин В.М. Балансно-характеристический метод численного решения одномерных уравнений газовой динамики в эйлеровых переменных // Математическое моделирование. – 2006. – 18(11). – С. 14–30.

### METADATA

**Title:** The CABARET scheme as a new generation algorithm in computational hydrodynamics.

**Authors:** V. M. Goloviznin

**Abstract:** A new approach for developing a new generation computational algorithms of computational hydrodynamics, combining the strengths of conservative and characteristic difference schemes, is described in this paper.

**Key words:** computational hydrodynamics, finite difference scheme, conservation laws, characteristic form of hyperbolic equations, flows correction, CABARET scheme.



## НОВЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ НА СФЕРЕ НА ОСНОВЕ СХЕМЫ КАБАРЕ.

*В.М. Головизнин, В.Б. Залесный, А.В. Соловьев*

**Аннотация.** Рассматривается новый подход к построению вычислительных алгоритмов для задач динамики атмосферы и океана, опирающийся на интегральную форму записи законов сохранения массы и момента количества движения, геодезические расчетные сетки с четырехугольными расчетными ячейками и схему КАБАРЕ, гарантирующую отсутствие вычислительной диссипации на течениях, в которых характеристики одного семейства не пересекаются. Качество нового алгоритма демонстрируется на тестовых и модельных задачах.

**Ключевые слова:** схема КАБАРЕ, сохранение момента количества движения, динамика атмосферы и океана, уравнения мелкой воды на сфере

**Введение.** Одна из базовых задач крупномасштабной динамики атмосферы и океана описывается системой двумерных (однослойных) уравнений мелкой воды (УМВ) на сфере [1, 2]. Она является одним из основных блоков при решении полных бароклинных систем прогностических уравнений и используется для оценки точности и эффективности вычислительных алгоритмов решения прямых и обратных задач. Важными вопросами, возникающими при построении методов решения УМВ, является выбор подходящей формы записи дифференциальных уравнений и поиск эффективных алгоритмов их численного решения. До сих пор они остаются предметом многочисленных исследований метеорологов и океанологов. Одна из возникающих здесь трудностей связана с системой координат на сфере, влияющей на форму записи уравнений и, как следствие, на качество дискретных моделей.

Работа посвящена новому подходу к построению вычислительных алгоритмов для задач динамики атмосферы и океана, опирающемуся на интегральную форму записи законов сохранения массы и момента импульса, геодезические расчетные сетки с четырехугольными ячейками и схему КАБАРЕ, обеспечивающую временную обратимость на течениях, в которых характеристики одного семейства не пересекаются.

**Интегральная форма уравнения мелкой воды на сфере.** Рассмотрим сферу радиуса  $R$  с центром в начале декартовой системы координат. Пусть  $H(\vec{r}, t) = R$  - толщина слоя жидкости в точке сферы  $\vec{r}$ ,  $g$  - гравитационное ускорение. Уравнения, описывающие динамику такого тонкого слоя, выводятся из фундаментальных законов

сохранения. На сфере такими законами являются закон сохранения массы и момента количества движения.

Баланс массы произвольной области  $G$  на поверхности сферы описывается интегральным уравнением:

$$\iint_G \frac{\partial H}{\partial t} dS + \oint_{\partial G} H (\vec{w} \cdot \vec{n}) dL = 0; \quad (30)$$

где  $\vec{w}$  - вектор скорости,  $\vec{n}$  - единичный вектор внешней нормали,  $dS$  - элемент площади сферы,  $dL$  - элемент длины границы на сфере.

Интегральное уравнение баланса момента импульса для этой же области имеет вид:

$$\begin{aligned} \rho_0 \iint_G \frac{\partial}{\partial t} [H (\vec{r} \times \vec{w})] dS + \rho_0 \oint_{\partial G} H (\vec{r} \times \vec{w}) (\vec{w} \cdot \vec{n}) dL + \\ + \frac{\rho_0 g}{2} \oint_{\partial G} H^2 (\vec{r} \times \vec{n}) dL = 0; \end{aligned} \quad (31)$$

здесь  $\rho_0$  - плотность жидкости.

### Особенности метода контрольного объема на сфере.

Выберем на сфере четыре точки, не лежащие на одной дуге большой окружности. Обозначим их цифрами 1,2,3,4 и соединим геодезическими дугами таким образом, чтобы они образовали сферический четырехугольник  $G_c = G_{1,2,3,4}$  (расчетную ячейку) с направлением обхода границы против часовой стрелки. Координаты этих точек обозначим как  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4$ . Ниже, при суммировании по сторонам ячейки, точку  $\vec{r}_1$  так же будем обозначать еще и как  $\vec{r}_5$ , а сами стороны ячейки нумеровать наименьшим из индексов вершин так, что сторона  $L_m, m=1...4$  опирается на точки  $m$  и  $m+1$ .

Для ячейки  $G_c$  закон сохранения массы примет вид:

$$\iint_{G_c} \frac{\partial H}{\partial t} ds + \sum_{m=1}^4 \int_m^{m+1} H (\vec{w} \cdot \vec{n}) dl = 0 \quad (32)$$

Здесь  $\vec{n}$  - единичный вектор, перпендикулярный к большому кругу  $\vec{r}_m, \vec{r}_{m+1}$  и являющийся внешним, по отношению к ячейке  $G_c$ ,  $\vec{r}$  - вектор, лежащий в плоскости большого круга и касательный к геодезической окружности  $\vec{L}_m$ . Для каждой стороны  $L_m$  будем предполагать  $H = H_m = const$ ,  $w^n = w_m^n = (\vec{w} \cdot \vec{n})_m = const$ ,  $w^x = w_m^x = const$ , где  $\vec{w} = w^n \cdot \vec{n} + w^x \cdot \vec{r}$ , что соответствует методу прямоугольников второго

порядка точности при аппроксимации интегралов по границам ячейки. Аппроксимируем (32) следующим образом:

$$\frac{\partial H_c}{\partial t} + \frac{1}{\Delta S} \sum_{m=1}^4 H_m (\vec{r} \cdot \vec{n})_m \Delta L_m = \frac{\partial H_c}{\partial t} + \frac{1}{\Delta S} \sum_{m=1}^4 H_m w_m^n \Delta L_m = 0 \quad (33)$$

где  $H_c$  - среднее значение глубины по области  $G_c$ ,  $H_m \cdot w_m^n \cdot \Delta L_m$ ,  $m=1, \dots, 4$  - аппроксимации интегралов по сторонам ячейки,  $\Delta L_m$  - длина геодезической дуги  $L_m$ .

Аппроксимацию закона сохранения момента импульса на основе интегрального закона (31) осуществим в несколько этапов. Учтем равенство

$$\int_m^{m+1} (\vec{r} \times \vec{n}) dL = (\vec{r}_m \times \vec{r}_m) \Delta L_m, \quad (34)$$

где  $\vec{r}_m$  - координата середины дуги  $L_m$ ,  $\Delta L_m = |\vec{r}_{m+1} - \vec{r}_m|$  - длина хорды сферы. Тогда момент силы давления (третье слагаемое в (31)) аппроксимируем следующим образом:

$$\frac{g}{2} \oint_{\partial G} H^2 (\vec{r} \times \vec{n}) dL; \quad \frac{g}{2} \sum_{m=1}^4 H_m^2 \int_m^{m+1} (\vec{r} \times \vec{n}) dL = \frac{g}{2} \sum_{m=1}^4 H_m^2 (\vec{r}_m \times \vec{n}_m) \Delta L_m \quad (35)$$

Второе слагаемое в уравнении (31) можно аппроксимировать в два этапа:

$$\begin{aligned} \oint_{\partial G} H (\vec{r} \times \vec{w}) (\vec{r} \cdot \vec{n}) dL &= \sum_{m=1}^4 \left[ \int_m^{m+1} H w^n (\vec{r} \times \vec{n}) (\vec{r} \cdot \vec{n}) dL + \int_m^{m+1} H w^t (\vec{r} \times \vec{t}) (\vec{r} \cdot \vec{n}) dL \right]; \\ &; \sum_{m=1}^4 H_m \left[ w_m^n w_m^n \int_m^{m+1} (\vec{r} \times \vec{n}) dL + w_m^t w_m^t \int_m^{m+1} (\vec{r} \times \vec{t}) dL \right] \end{aligned} \quad (36)$$

Для первого интеграла справедливо соотношение (34). Для второго:

$$\int_m^{m+1} (\vec{r} \times \vec{t}) dL = (\vec{r}_m \times \vec{t}_m) \Delta L_m \quad (37)$$

Окончательно, подставляя (34) и (37) в (36):

$$\oint_{\partial G} H (\vec{r} \times \vec{w}) (\vec{r} \cdot \vec{n}) dL; \quad \sum_{m=1}^4 H_m w_m^n \left[ w_m^n (\vec{r}_m \times \vec{n}_m) \Delta L_m + w_m^t (\vec{r}_m \times \vec{t}_m) \Delta L_m \right] \quad (38)$$

Первый интеграл в (31) заменим квадратурой:

$$\iint_{S_c} \frac{\partial}{\partial t} [H(\vec{r} \times \vec{w})] dS; \frac{\partial}{\partial t} [H(\vec{r} \times \vec{w})]_C \Delta S_C =$$

$$= \left[ \left( \vec{r} \times \frac{\partial H \cdot \vec{w}}{\partial t} \right)_C + H_C \left( \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \times \vec{w} \right)_C \right] \Delta S_C \quad (39)$$

где величины, помеченные нижним индексом  $C$ , относятся к центру ячейки. Если сфера вращается с угловой скоростью  $\Omega$ , то

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{r} \cdot \Omega \cdot \sin \theta;$$

$$H_C \left( \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \times \vec{w} \right)_C = H_C \cdot \Omega \cdot \sin \theta_c \cdot (\vec{r} \times \vec{w})_C \quad (40)$$

Окончательно, аппроксимация уравнения (31) имеет следующий вид:

$$\left( \vec{r} \times \frac{\partial H \cdot \vec{w}}{\partial t} \right)_C S_C + \sum_{m=1}^4 H_m w_m^n [w_m^n (\vec{r}_m \times \vec{n}_m) \Delta L_m + w_m^r (\vec{r}_m \times \vec{r}_m) \Delta L_m] +$$

$$+ \frac{g}{2} \sum_{m=1}^4 H_m^2 (\vec{r}_m \times \vec{n}_m) \Delta L_m = -H_C \cdot \Omega \cdot \sin \theta_c \cdot (\vec{r} \times \vec{w})_C \quad (41)$$

Формулы (33), (41) представляют собой замкнутую систему дифференциально – разностных уравнений, аппроксимирующих законы сохранения массы и момента количества движения в приближении однослойной мелкой воды на сетках с четырехугольными ячейками на гладкой вращающейся сфере.

Здесь следует учесть особенность, заключающуюся в том, что хотя скорости в системе уравнений (33), (41) являются трехмерными векторами, момент импульса описывается только двумя независимыми компонентами. Для сторон ячейки это проекция на вектор, нормальный к плоскости большого круга, проходящего через вершины стороны, и проекция на вектор, касательный к середине стороны и лежащий в плоскости большого круга. Для центра ячейки – проекциями на два произвольных вектора, касательных к сфере.

### **Технологии построения четырехугольных сеток на сфере.**

Для построения на сфере расчетных сеток с четырехугольными ячейками наиболее широко используются два метода. Первый из них базируется на первоначальном разбиении сферы на двадцать равносторонних сферических треугольников и последующем их объединении в 10 сферических четырехугольников. Затем, каждый из геодезических отрезков, образующих четырехугольник, делится на  $N$  равных частей, и точки деления на противоположных отрезках соединяются

геодезическими прямыми. Пересечения двух семейств геодезических образуют квазирегулярную расчетную сетку.

Второй способ, приводящий к т.н. «кубосферическим» расчетным сеткам заключается в центральном проектировании четырехугольной сетки, заданной на гранях описывающего сферу куба, на поверхность сферы. Квазирегулярности такой сетки можно добиться посредством специального выбора первичной сетки на гранях куба.

**Схема КАБАРЕ.** Схема КАБАРЕ строится на четырехугольных геодезических расчетных сетках. Начальные данные по скоростям и высоте свободной поверхности задаются как в центрах расчетных ячеек, так и в серединах их граней. Таким образом, число переменных в схеме КАБАРЕ оказывается в три раза больше, чем в классических методиках. Переменные, относящиеся к центрам ячеек, называются консервативными и представляют собой средние значения соответствующих величин по ячейкам. Переменные, задаваемые в серединах граней, называются потоковыми и определяют конвективные потоки. Расчетные сетки с описанным распределением переменных ранее в задачах динамики атмосферы и океана не встречались и не включены в широко известную классификацию Аракавы. [3]. Будем называть их G-сетками.

Вычислительная процедура в схеме КАБАРЕ включает три фазы. На первой фазе по явным разностным схемам, полученным выше методом контрольного объема, находят значения консервативных переменных на промежуточном временном слое:

$$\begin{aligned} & \frac{H_C^{t+1/2} - H_C^t}{\tau/2} + \frac{1}{\Delta S} \cdot \left\{ \sum_{m=1}^4 H_m w_m^n \Delta L_m \right\}^t = 0 \\ & \bar{r}_C \times \frac{[H \cdot \bar{w}]_C^{t+1/2} - [H \cdot \bar{w}]_C^t}{\tau/2} \cdot \Delta S_C + \\ & + \left\{ \sum_{m=1}^4 H_m w_m^n [w_m^n (\bar{r}_m \times \bar{n}_m) \Delta L_m + w_m^r (\bar{r}_m \times \bar{\tau}_m) \Delta L_m] \right\}^t + \\ & + \frac{g}{2} \left\{ \sum_{m=1}^4 H_m^2 (\bar{r}_m \times \bar{n}_m) \cdot \Delta L_m \right\}^t = -H_C^{t+1/2} \cdot \sin \theta_C \cdot \Omega \cdot (\bar{r} \times \bar{w})_C^{t+1/2} \cdot \Delta S_C; \end{aligned}$$

На второй фазе на следующем,  $t+1$  временном слое находятся потоковые переменные. Эта часть алгоритма является наиболее специфичной, отличающей схему КАБАРЕ от всех других схем, и ее подробное описание не укладывается в формат данной публикации. Отметим лишь, что на второй фазе используется процедура линейной экстраполяции локальных римановых инвариантов и процедура

нелинейной коррекции их новых значений на основе принципа максимума. Все это подробно описано в монографии [4].

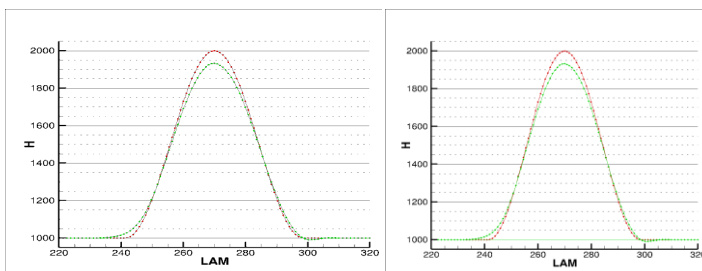
На третьей, последней фазе, по найденным новым потоковым переменным определяются новые величины консервативных переменных:

$$\begin{aligned} & \frac{H_C^{t+1} - H_C^{t+1/2}}{\tau/2} + \frac{1}{\Delta S} \cdot \left\{ \sum_{m=1}^4 H_m w_m^n \Delta L_m \right\}^{t+1} = 0 \\ & \vec{r}_C \times \frac{[H \cdot \vec{w}]_C^{t+1} - [H \cdot \vec{w}]_C^{t+1/2}}{\tau/2} \cdot \Delta S_C + \left\{ \sum_{m=1}^4 H_m w_m^n \left[ w_m^n (\vec{r}_m \times \vec{n}_m) \Delta L_m + w_m^r (\vec{r}_m \times \vec{r}_m) \Delta L_m \right] \right\}^{t+1} + \\ & + \frac{g}{2} \left\{ \sum_{m=1}^4 H_m^2 (\vec{r}_m \times \vec{n}_m) \cdot \Delta L_m \right\}^{t+1} = \\ & = -\sin \theta_c \cdot \Omega \cdot \left[ H_C^t \cdot (\vec{r} \times \vec{w})_C^t + H_C^{t+1} \cdot (\vec{r} \times \vec{w})_C^{t+1} - H_C^{t+1/2} \cdot (\vec{r} \times \vec{w})_C^{t+1/2} \right] \cdot \Delta S_C; \end{aligned}$$

**Примеры тестовых расчетов.** Рассмотрим первую задачу из набора тестов [5]. На полной сфере радиуса  $6.37122 \times 10^6$  метров решается только уравнение неразрывности, а поле скоростей зафиксировано и не меняется во времени. Начальное возмущение находится на экваторе, поле скоростей подобрано так, чтобы в аналитическом случае не искажать форму переносимого возмущения. После одного оборота вокруг сферы, который происходит за 12 суток, форма возмущения сравнивается с исходной. Рассматривается несколько ориентаций течения по наклону к экватору. Начальное возмущение представляет собой косинусообразный колокол:

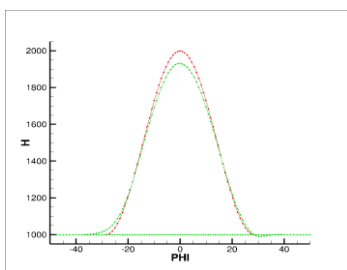
$$h(\lambda, \phi) = \begin{cases} h_0 \left( 1 + \cos \frac{\pi r}{r_0} \right) / 2 & \text{if } r < r_0, \\ 0 & \text{if } r \geq r_0 \end{cases},$$

где  $r_0$  - радиус возмущения,  $r$  - расстояние от центра возмущения,  $h_0 = 1000$ . Расчет проводился на «кубосферической» сетке с числом ячеек  $90 \times 90 \times 6$ . Ниже, для 4 случаев течений приведены сечения начального и конечного профиля:

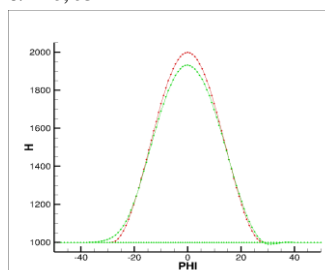


$\alpha = 0$

$\alpha = 0,05$



$\alpha = \pi / 2 - 0,05$



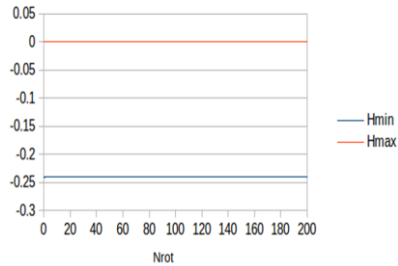
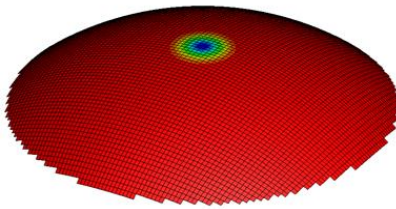
$\alpha = \pi / 2$

Как видно из приведенных результатов, падение амплитуды возмущения составляет 7-8 процентов для всех направлений течения.

Во второй задаче используется полная система уравнений. На участке неподвижной сферы задается круговое течение

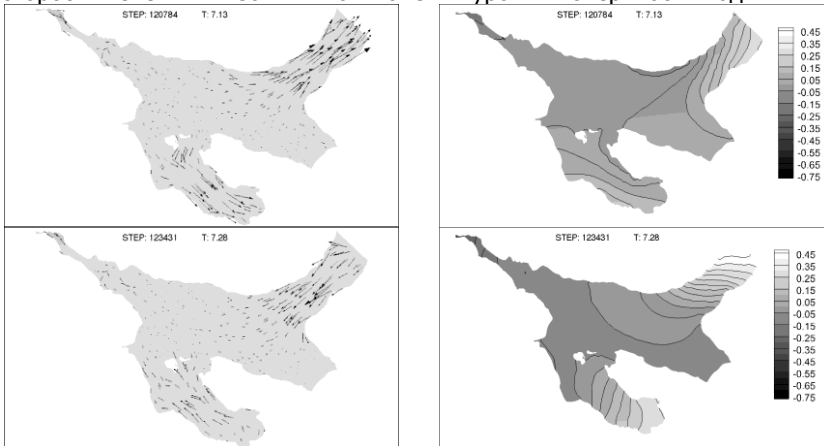
$$H = H_0 - \frac{\Theta^2}{4g\beta}, u = \Theta \cdot \frac{\phi - \phi_0}{r_0}, v = -\Theta \cdot \frac{\lambda - \lambda_0}{r_0}, \Theta = \alpha \cdot \exp \left[ \beta \left( 1 - \frac{r^2}{r_0^2} \right) \right]$$

где  $(\lambda_0, \phi_0)$  - центр вихря,  $r_0$  - радиус вихря,  $r$  - расстояние до центра,  $\alpha = 40$ ,  $\beta = 0,3$  - параметры вихря. Такое течение является стационарным. Расчет течения проводился до 200 оборотов вихря. На рисунке приведена сетка (часть кубосферы) и начальное распределение параметра  $H$  на ней, а также график зависимости  $H_{\min}$  и  $H_{\max}$  (на рисунке это - отклонение от фонового значения  $H_0$ ) от расчетного времени, для наглядности заданного числом оборотов вихря.



Видно, что интенсивность вихря не изменяется.

Третья задача посвящена моделированию приливного течения в Белом море в приближении однослойной мелкой воды. Использована криволинейная нерегулярная четырехугольная сетка, число ячеек составляет 12455. Береговая линия и глубины взяты из модели ТОР01 [6]. Использовано линейное трение с небольшим коэффициентом. На береговой линии задана нулевая скорость, в Горле Белого моря – высота уровня воды и скорость считались известными в каждый момент времени и взяты из приливной модели [7]. Реализация соответствующих граничных условий описана в [4]. На рисунках ниже приведены векторы скорости течения и изолинии отклонения уровня поверхности воды.



Полученный характер течения в целом соответствует результатам, полученным по другим расчетным моделям. В частности, сделанные расчеты позволили смоделировать амфидромическую точку в юго-восточной части Горла.



**Заключение.** Методом контрольного (конечного) объема на G-сетке получена система дифференциально – разностных (дифференциальных по времени и разностных по пространству) уравнений (ДРУ), аппроксимирующих на сфере систему интегральных уравнений закона сохранения массы и момента количества движения в приближении однослойной мелкой воды. Используемый при этом подход представляет самостоятельный интерес, поскольку может быть использован для конструирования различных вычислительных алгоритмов, в том числе и на треугольных сетках.

Для описания векторных переменных не требуется введения глобальной параметризации на всей сфере, чем решается проблема особых точек в полюсах. Скорости характеризуются двумя компонентами, появление компоненты, нормальной к поверхности сферы, исключено. Балансные уравнения записаны через потоки, определенные на гранях; полученные ДРУ, являющиеся по построению консервативными, использованы в качестве основы (фаза 1 и фаза 3) для реализации схемы КАБАРЕ на сфере.

Схема КАБАРЕ на сфере сохраняет все свои отличительные черты: она определена на минимально возможном вычислительном шаблоне, является явной, бездиссипативной, условно устойчивой. Схема устойчива при выборе величины шага по времени из условия  $\tau \leq CFL \cdot \min\{d/c\}$ , где  $c = \sqrt{gH}$  - локальная скорость звука,  $d$  - характерный размер расчетной ячейки. Минимум берется по всем расчетным ячейкам,  $CFL \leq 0.5$ .

Бездиссипативность схемы проявляется в том, что акустические возмущения не затухают и неподвижные вихри с эффективным радиусом большим трех ячеек не диссипируют.

Приведены результаты тестовых и модельных расчетов, иллюстрирующие свойства схемы на сфере.

### **Библиографический список**

1. Ф. Мезингер, А. Аракава. Численные методы, используемые в атмосферных моделях. Т.1, - Ленинград, Гидрометеоиздат, 1979г.
2. Марчук Г.И. Численное решение задач динамики атмосферы и океана. Ленинград, Гидрометеоиздат, 1974
3. Arakawa A., Lamb V.R. Computational design of basic dynamical processes of the ULCA general circulation models. Methods of Computational Physics, vol. 17, General circulation of the atmosphere, ed. By J.Chang, Fcfademic Press, New York, 1977, p. 173-265
4. Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.А., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для

многопроцессорных вычислительных комплексов. 2013, Москва, из-во Московского университета, 467 с

5. Williamson, D. L., J. B. Drake, J. J. Hack, R. Jakob, and P. N. Swarztrauber, 1992: A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry. *Journal of Computational Physics*, 102, 211-224.

6. Smith, W. H. F., and D. T. Sandwell, Global seafloor topography from satellite altimetry and ship depth soundings, *Science*, v. 277, p. 1957-1962, 26 Sept., 1997

7. Gary D. Egbert and Svetlana Y. Erofeeva, 2002: Efficient Inverse Modeling of Barotropic Ocean Tides. *J. Atmos. Oceanic Technol.*, 19, 183204.

## METADATA

**Title:** A new algorithm for solving the shallow water equations on the sphere based on the cabaret scheme.

**Authors:** V. M. Goloviznin, V. B. Zalesny, A.V. Soloviev

**Abstract:** A new approach to the developing computational algorithms for problems of atmosphere and ocean dynamics, based on the inteintegral form of conservation mass laws and momentum, geodetic computational grid with quadrangular cells and designing the CABARET scheme, which is guaranteed the absence of computing dissipation in flows, in which the characteristics of single family are not crossed. The quality of the new algorithm is demonstrated on test and model problems.

**Key words:** CABARET scheme, the conservation of movement moment, dynamics of atmosphere and ocean, shallow water equations on the sphere.

## ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ СЕЙСМИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ОТ КЛАСТЕРА ФЛЮИДОНАСЫЩЕННЫХ МАКРОТРЕЩИН ДЛЯ ЗАДАЧ УПРУГОЙ МИГРАЦИИ<sup>††</sup>

В.И. Голубев, И.Б. Петров  
Московский физико-технический институт,  
г. Долгопрудный, Россия

**Аннотация.** В работе рассматривается задача распространения сейсмических волн в слоистых геологических средах, содержащих трещиноватые включения. Актуальность данного направления связана с бурным развитием технологий разведки нетрадиционных месторождений нефти и газа. Важным этапом решения обратной задачи при этом является расчёт волнового поля в геологическом массиве.

Авторами использован подход, основанный на решении гиперболической системы уравнений явным сеточно-характеристическим методом на гексаэдральных расчётных сетках. Он позволяет в явном виде задать произвольную структуру трещиноватого кластера.

**Ключевые слова:** сейсмическая разведка; сеточно-характеристический метод; математическое моделирование; упругая среда.

В настоящее время нефть и природный газ являются основными источниками энергии. В виду значительного истощения открытых ранее месторождений актуальной задачей является поиск новых запасов, а также уточнение структуры уже разрабатываемых залежей. Для решения этих задач активно используется сейсмическая разведка, которая способна дать не только информацию об акустических или упругих характеристиках подповерхностного пространства, но и оконтурить залежь (сейсмическая миграция).

В данной работе исследовался процесс распространения сейсмической волны от точечного источника в трёхслойной трещиноватой геологической среде (рис. 1). Упругие характеристики модели приведены в табл. 1. Во втором слое располагались вертикальные флюидонасыщенные трещины протяжённостью 100 м. Рассматривались случаи: отсутствие трещин, расстояние 50 м между трещинами, расстояние 100 м между трещинами. Использовалось 2D приближение. Расчётная область представляла собой прямоугольник размерами 8000 x 3200 м. Пункт взрыва задавался на оси симметрии на заглублении 5 м. Пункты приёмников задавались на дневной поверхности с шагом 25 м по всей области интегрирования (321 сейсмоприёмник). В

---

<sup>††</sup> Работа выполнена в рамках проекта РНФ №14-11-00263 на базе МФТИ.

качестве временной зависимости источника использовался импульс Рикера с частотой 35 Гц. При численном решении использовалась квадратная расчётная сетка 1601 x 641 узел с шагом 5 м. При этом шаг по времени составлял 0,4 мс, а общее число шагов – 6000. Границы геологических слоёв выделялись явно на этапе построения расчётной сетки [1].

Таблица 1  
Упругие характеристики модели

Номер слоя	Толщина, м	$C_p$ , м/с	$C_s$ , м/с	Плотность, кг/м <sup>3</sup>
1	2000	5000	2500	2500
2	200	5500	2250	2500
3	1000	5000	2500	2500

Динамическое состояние линейно-упругой среды описывается определяющей системой уравнений в частных производных вида [2]:

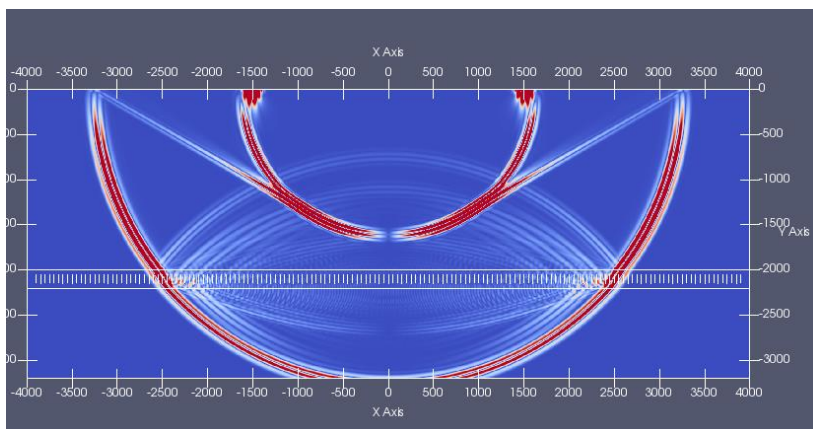
$$\rho \dot{v}_i = \nabla_j \sigma_{ij},$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = q_{ijkl} \dot{\varepsilon}_{kl}.$$

Здесь  $\rho$  – плотность среды,  $v_i$  – компоненты вектора скорости смещения,  $\sigma_{ij}$  и  $\varepsilon_{ij}$  – компоненты тензоров напряжений Коши и деформации,  $\nabla_j$  – ковариантная производная по  $j$ -й координате. Вид компонент тензора 4-го порядка  $q_{ijkl}$  определяется реологией среды. Для линейно-упругого изотропного случая они имеют вид:

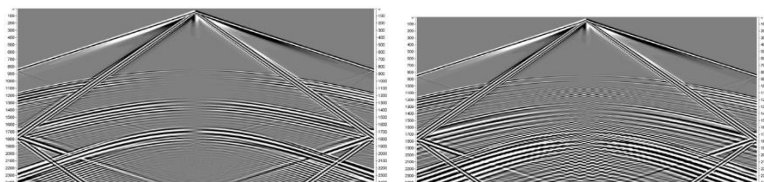
$$q_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}).$$

В этом соотношении, которое обобщает закон Гука,  $\lambda$  и  $\mu$  – параметры Ламе, а  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера. В настоящей работе данная система уравнений решалась на гексаэдральных расчётных сетках сеточно-характеристическим методом [3]. Для описания отклика от флюидонасыщенных геологических трещин использовалась двухбереговая модель трещины [4]. При этом плоскость каждой трещины проходила через ряд узлов расчётной сетки, в каждом из которых вводился дополнительный узел. В процессе расчёта значения тензора напряжений и вектора скорости в основном и дополнительном узлах корректировались для обеспечения свободного скольжения двух бортов трещины вдоль её плоскости (акустическое приближение для материала заполнителя трещины).



**Рис. 1.** Волновая картина (распределение модуля скорости) в слоистом геологическом массиве. Расстояние между трещинами 50 м

На рис. 2 представлены сейсмограммы, построенные по результатам проведённых расчётов. На них чётко прослеживаются продольная объёмная волна от источника и следующая за ней поверхностная волна Рэля. Основные отклики от границ раздела геологических слоёв регистрируются на временах порядка 1, 1,5 и 2 с. При этом в случае наличия трещиноватого пласта основной сигнал сопровождается высокочастотной компонентой на временах порядка 1,2 – 1,3 с, обусловленной межтрещинным взаимодействием. По-видимому, его пространственная частота связана с расстоянием между ближайшими трещинами, а протяжённость отклика – с их длиной.



**Рис. 2.** Сейсмограммы, построенные по вертикальной составляющей вектора скорости. Вверху – при отсутствии трещин, внизу – при расстоянии 100 м между трещинами

Отметим также, что использованный в настоящей работе подход на основе модели двухбереговой трещины может быть применён для решения обратной задачи сейсмической разведки – построения

миграционного изображения. В работе [5] предложен метод, основанный на решении присоединённой задачи и позволяющий включить априорные знания о трещиноватом характере вмещающего массива в фоновую модель среды. Использование двухбереговой модели трещин и прямоугольной расчётной сетки для случая наклонных геологических трещин позволит существенно снизить вычислительную сложность задачи, по сравнению с использованием криволинейных расчётных сеток.

### **Библиографический список**

1. Голубев В.И., Петров И.Б. Опыт расчёта сейсмических откликов от криволинейных геологических границ на основе их явного выделения // Технологии Сейсморазведки, 2016. Т. 4. С. 45-50.
2. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Том 1. – М.: Наука, 1970, 492 с.
3. Магомедов К.М., Холодов А.С. Сеточно-характеристические численные методы. – М.: Наука, 1988, 288 с.
4. Григорьевых Д.П., Хохлов Н.И., Петров И.Б. Математическое моделирование трещин в твердых деформируемых телах с использованием гексаэдральных сеток // Труды МФТИ, 2015. Т. 7, № 4. С. 28-37.
5. Голубев В.И., Войнов О.Я., Журавлёв Ю.И. О построении миграционных изображений трещиноватых геологических сред // Доклады Академии Наук, 2017. Т. 476, № 1. С. 1-3.

### **METADATA**

**Title:** Numerical calculation the seismic response from fluid-filled cluster of macro cracks detection for problems of elastic migration

**Authors:** V.I. Golubev, I.B. Petrov

**Abstract:** The problem of seismic waves propagation in layered geological medium with fractured inclusions is investigated. The relevance of this direction is related to the rapid development of exploration technologies for non-traditional oil and gas fields. An important stage in the solution of the inverse problem is the calculation of the wave field in the geological medium.

the explicit grid-characteristic method on hexahedral meshes is used for solving hyperbolic system of equations. It allows to set the arbitrary internal structure of the fractured cluster.

**Key words:** seismic survey; grid-characteristic method; mathematical simulation; elastic medium.

## АЛГОРИТМЫ МИНИМИЗАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ\*\*

Л.В. Еникеева<sup>2</sup>, И.М. Губайдуллин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт нефтехимии и катализа РАН,

<sup>2</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет  
г. Уфа, Россия

**Аннотация:** Работа посвящена сравнению различных алгоритмов оптимизации, которые применяются для решения обратных задач химической кинетики. В качестве алгоритмов оптимизации выбраны два алгоритма – генетический алгоритм и метод имитации отжига. Рассмотрены задачи нахождения оптимальных кинетических параметров низкотемпературной паровой конверсии метан-пропановой смеси и реакции гибели 2,4-диметоксифенилнитрозооксида при комнатной температуре.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, химическая кинетика, обратные задачи, глобальная минимизация, генетический алгоритм, алгоритм имитации отжига, нитрозооксиды, паровая конверсия.

**Введение.** Одной из важнейших задач химической кинетики является установление механизмов протекания сложных химических реакций посредством решения обратной задачи химической кинетики. Обратной задачей химической кинетики называется восстановление на основе экспериментальных данных вида кинетической модели реакции и ее параметров [1]. Процедура решения обратной задачи состоит в поиске констант скоростей стадий, минимизирующих функционал отклонения между расчетными и экспериментальными значениями концентраций веществ, то есть в решении экстремальной задачи, а именно задачи глобальной оптимизации. Моделирование сложных химических процессов, содержащих более одной элементарной стадии реакции, зачастую приводит к задачам, имеющих несколько минимумов. Оптимизационные алгоритмы, основанные на традиционных градиентных методах, сходятся к некоторому локальному минимуму. Сложностью данных алгоритмов является нахождение начального приближения, сходящемуся к глобальному минимуму.

---

\*\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 14-33-50945 мол\_нр «Исследование кинетических особенностей низкотемпературной паровой конверсии смесей легких углеводородов: влияние температуры и давления» и № 15-07-01764 "Оптимальное управление химическими реакциями металлокомплексного катализа")

Решение обратной кинетической задачи сводится к минимизации невыпуклой функции. Характерной особенностью невыпуклых целевых функций является сложный рельеф с наличием нескольких локальных экстремумов, поэтому задачи невыпуклого программирования называют *многоэкстремальными*. Любая релаксационная процедура выпуклой оптимизации в лучшем случае сойдется к одному из них, при этом нет гарантии, что найденный локальный экстремум является глобальным. Общего алгоритма решения многоэкстремальных задач не существует, все предлагаемые подходы являются эвристическими, пригодными для того или иного класса целевых функций. Поэтому единственным доступным способом исследования является вычислительный эксперимент.

В данной статье на примере двух химических реакций проведем сравнение решений, полученных генетическим алгоритмом и методом имитации отжига, относящимся к алгоритмам случайного поиска [2]. Ранее авторами статьи проводилось сравнение данных алгоритмов при построении кинетической модели реакции окисления 4-трет-бутилфенола [3]. Генетический алгоритм описан в статье [4]. Метод имитации отжига (simulated annealing) подражает физическим процессам, происходящим в металлическом изделии в процессе нагревания и медленного охлаждения. При этом происходит упорядочение кристаллической решетки и уменьшение внутренней энергии вещества, отождествляемой с целевой функцией. Метод имитации отжига показал высокую эффективность и включен в некоторые пакеты оптимизации.

Рассмотрены задачи нахождения оптимальных кинетических параметров низкотемпературной паровой конверсии (НПК) метан-пропановой смеси и реакции гибели 2,4-диметоксифенилнитрозооксида (ДМФНО) при комнатной температуре.

Первый рассматриваемый в статье химический процесс – реакция низкотемпературной паровой конверсии метан-пропановой смеси. Математическая модель реакции подробно рассматривается в работах [5-7].

Второй химический процесс – реакция гибели ДМФНО при комнатной температуре, экспериментальная и теоретическое изучение описано в статье [8].

Для данных химических процессов оптимизационная задача формулируется следующим образом:

$$F(Y_1, K, Y_n) \rightarrow \min,$$

где  $Y_1, K, Y_n$  – оптимизируемые параметры, энергии Гиббса для реакции гибели ДМФНО и энергии активации и предэкспоненциальные множители



для реакции НПК метан-пропановой смеси;  $F$  – минимизируемая функция. Для реакции НПК метан-пропановой смеси этот функционал имеет вид:

$$F = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N (x_{ij}^{\text{exp}} - x_{ij}^{\text{calc}})^2,$$

где  $M$  – количество наблюдаемых веществ в ходе эксперимента,  $N$  – количество точек эксперимента,  $x$  – концентрации веществ, участвующих в реакции, индекс «exp» относится к экспериментально полученным концентрациям, «calc» – вычисленным в ходе расчета.

Для задачи гибели ДМФНО функционал  $F$  был выбран следующим:

$$F = \sum_{j=1}^N \left| \frac{x_j^{\text{exp}} - x_j^{\text{calc}}}{x_j^{\text{exp}}} \right|,$$

где  $x^{\text{exp}}$  – экспериментально наблюдаемые эффективные константы гибели изомеров,  $x^{\text{calc}}$  – полученные в ходе расчета.

Вычисление функционала  $F$  и тем самым получение значений  $x^{\text{calc}}$  происходит путем решения прямой кинетической задачи – решением системы дифференциальных уравнений для обеих задач.

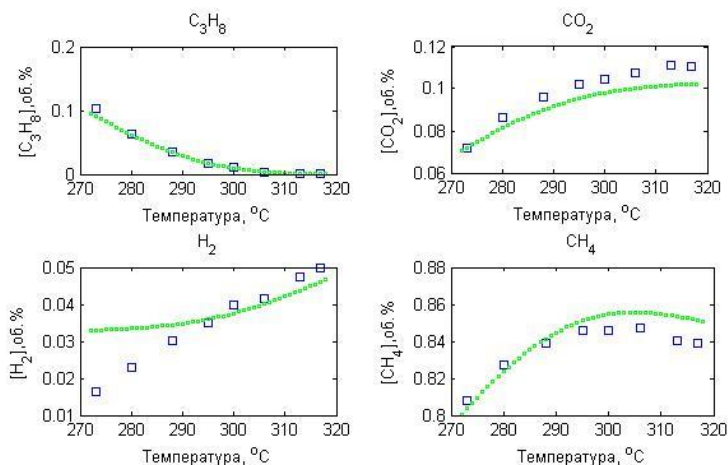
**Результаты и их обсуждение.** Генетический алгоритм.  
Результаты работы генетического алгоритма приведены в табл. 1.

Таблица 1		
Задача	$\delta$ , %	Время работы алгоритма
реакции НПК метан-пропановой смеси	12,3	~10 мин
гибель ДМФНО	3.5	~ 190 мин

Примечание:  $\delta$  – относительная погрешность, %.

Применялись следующие параметры генетического алгоритма: численность популяции – 40; набор генов – два числовых гена, соответствующих координатам точки; способ выбора родителей – панмиксия; тип рекомбинации – промежуточная; тип селекции – стохастическая.

Следует также указать, что в задаче оптимизации кинетических параметров реакции гибели ДМФНО в качестве начального приближения (начальной популяции) использовался набор энергий, полученных квантовохимическими методами, вследствие этого получено достаточно точное совпадение экспериментальных и расчетных данных. На рис. 1 и 2 показаны расчетные и экспериментальные кинетические кривые.



**Рис. 1.** Экспериментальные и расчетные кинетические кривые для задачи низкотемпературной паровой конверсии метан-пропановой смеси

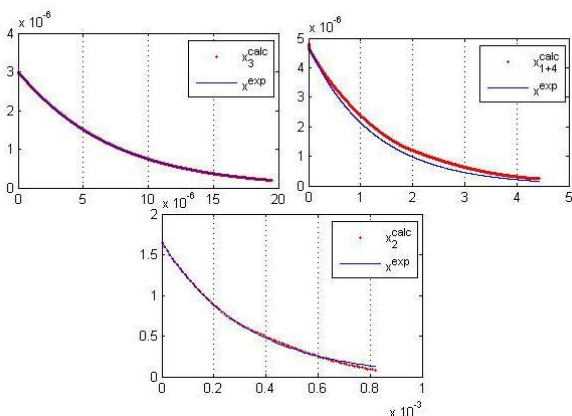
Метод имитации отжига. Метод имитации отжига требует начальное приближение. Для задачи НПК метан-пропановой смеси выберем середины интервалов.

$$120 \leq x_1 \leq 145, 5 \leq x_2 \leq 14, 20 \leq x_3 \leq 40, 4 \leq x_4 \leq 8.$$

Результаты работы метода имитации отжига приведены в табл. 2.

Таблица 2

Задача	$\delta$ , %	Время работы алгоритма
реакции НПК метан-пропановой смеси	12,1	~10 мин
гибель ДМФНО	13,2	~ 400 мин



**Рис. 2.** Экспериментальные и расчетные кинетические кривые для задачи гибели 2,4-диметоксифенилнитрозооксида при комнатной температуре

Таким образом, если для задачи гибели ДМФНО генетический алгоритм находит качественно более точное решение, то для реакции НПК метан-пропановой смеси оба алгоритма демонстрируют примерно равное относительное отклонение расчета от эксперимента. Можно сделать вывод о том, что в задачах химической кинетики разные алгоритмы ведут себя по-разному, и не существует алгоритма, дающего всегда самое наилучшее решение. Необходимо пробовать различные алгоритмы, варьировать их параметры, а иногда и комбинировать их, чтобы добиться положительного эффекта.

### Библиографический список

1. Сайфуллина Л.В., Губайдуллин И.М., Еникеев М.Р. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики: Учебное пособие. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2011.–90 с.
2. Гладких Б. А. Методы оптимизации и исследование операций для бакалавров информатики. Ч. II. Нелинейное и динамическое программирование: учебное пособие. – Томск: Изд-во НТЛ, 2011. – 264 с.
3. Gubaydullin I., Enikeeva L., Naik L.R. Software module of Mathematical Chemistry web-laboratory for studying the kinetics of oxidation of 4-tert-butyl-phenol by aqueous solution of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> in the presence of titanosilicates // Engineering Journal, V. 20(5), P. 263-270.

4. Еникеева Л.В. Оптимизация кинетических параметров низкотемпературной паровой конверсии метан-пропановой смеси // Вестник Башкирского университета. 2017. Т. 22. № 2. С. 386-390.

5. S.I. Uskov, L.V. Enikeeva, D.I. Potemkin, V.D. Belyaev, P.V. Snytnikov, I.M.Gubaidullin, V.A. Kirillov, V.A. Sobyenin Kinetics of Low-Temperature Steam Reforming of Propane in a Methane Excess on a Ni-Based Catalyst // Catalysis in Industry, 2017, Vol. 9, No. 2, pp. 104–109.

6. С.И. Усков, Л.В. Еникеева, Д.И. Потемкин, В.Д. Беляев, П.В. Снытников, И.М. Губайдуллин, В.А. Кириллов, В.А. Собынин Кинетика мягкого парового риформинга пропана в избытке метана на Ni-содержащем катализаторе // Катализ в промышленности. - 2017. - Т. 17, № 1. - С. 11-17.

7. Ахмадуллина Л. Ф., Еникеева Л.В., Губайдуллин И.М., Снытников П.В., Потемкин Д.И. Математическое моделирование процесса низкотемпературной паровой конверсии пропана в присутствии метана на никелевом катализаторе // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18 № 3. – с. 117-126.

8. Ekaterina M. Chainikova, Alfia R. Yusupova, Sergey L. Khursan, Aigul N. Teregulova, Alexander N. Lobov, Marat F. Abdullin, Leniza V. Enikeeva, Irek M. Gubaydullin, Rustam L. Safiullin Interplay of Conformational and Chemical Transformations of Ortho-Substituted Aromatic Nitroso Oxides: Experimental and Theoretical Study // J. Org. Chem., 2017, 82 (15), pp. 7750–7763.

## METADATA

**Title:** Minimization algorithms in the inverse problem of chemical kinetics.

**Authors:** L.V. Enikeeva, I.M. Gubaydullin

**Abstract:** The paper covers the comparison of various optimization algorithms that are used to solve inverse problems of chemical kinetics. As algorithms for optimization, two algorithms have been chosen – the genetic algorithm and the simulation annealing method. The following problems are considered: finding the optimal kinetic parameters of the low-temperature steam conversion of the methane-propane mixture and of the decay reaction of 2,4-dimethoxyphenyl nitroside at room temperature.

**Key words:** mathematical modeling, chemical kinetics, inverse problems, global minimization, genetic algorithm, annealing simulation algorithm, nitrosooxides, steam conversion.

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ КОРРОЗИИ, КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КОРРОЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЯ

М.Р. Еникеев<sup>1</sup>, И.М. Губайдуллин<sup>1,2</sup>, Л.В. Еникеева<sup>2</sup>, М.А. Малеева<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт нефтехимии и катализа РАН,

<sup>2</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет,

<sup>3</sup> Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН  
г. Уфа, Россия

**Аннотация:** Работа посвящена проблеме идентификации коррозии и количественной оценке коррозионного поражения. Цель работы – разработка методики проведения эксперимента и комплекса параллельных программ для оценивания и прогнозирования коррозионных процессов на поверхности алюминия. Данная методика рассматривается на примере обработки данных процесса коррозии алюминия с водородной деполяризацией. Результаты работы могут быть использованы для исследования коррозионных процессов и их механизмов на основе визуального анализа эксперимента.

**Ключевые слова:** коррозия металлов; компьютерное зрение; параллельные вычисления.

Коррозионное разрушение металла – одна из существенных причин снижения долговечности и потери работоспособности металлических конструкций. Больше всего от коррозии страдают железо и его сплавы, а также алюминий. Металлические конструкции подвержены в основном электрохимической коррозии, возникающей при соприкосновении металлов с электролитами. Выявление повреждений на ранних стадиях или предпосылок к ним (*диагностика*), а также предвидение их развития (*прогнозирование*) позволяют правильно оценивать условия эксплуатации аппаратов, машин и оборудования, определять эффективность применения методов и средств защиты, а также принимать решение об их совершенствовании.

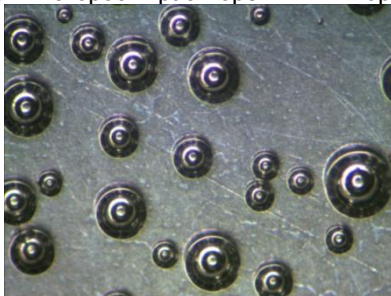
Лаборатория коррозии металлов в природных условиях Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук специализируется на изучении коррозии различных металлов в естественных средах. Имеется огромный опыт в исследовании механизма локальной и равномерной коррозии металлов с использованием математических и статистических методов для описания сложных процессов.

Большая часть работ, связанных с обнаружением коррозионных эффектов, основанных на методах компьютерного зрения, анализирует трещины, и в некоторой степени питтинги (углубления на поверхности

металла). Многие из этих изысканий успешно решили задачу автоматизации обнаружения и измерения дефектов. Одним из первых опытов использования компьютерного зрения для исследования коррозии металлов является изучение точечной коррозии нержавеющей стали в растворе  $\text{FeCl}_3$  [1]. Эксперимент проводился следующим образом: по фотографиям процесса коррозии определялось отношение площади коррозионных ямок к общей площади изображения. Заслуживает внимание изучение коррозии как трехмерного объекта, то есть определение глубины и формы ямки методами компьютерного зрения [2]. В работе [3] представлен другой метод идентификации коррозионного разрушения металла по минимуму расстояния между объектами распознавания.

Разработка математической модели, позволяющей количественно описывать процессы на межфазных границах в широком ряду испытательных сред и металлов и основанной на обработке изображений прокорродировавшей поверхности, даст возможность более полного использования методов визуального контроля и более глубокого понимания механизмов реакций на межфазных границах. Системой, реализующей такую модель, может служить система компьютерного зрения.

**Коррозия алюминия с водородной деполяризацией.** На рис. 1 представлено изображение поверхности алюминия при коррозии в 0,1 М NaCl (pH 11). Процесс сопровождается интенсивным выделением водорода. На изображении видны пузырьки выделяющегося водорода. Задача поиска объектов на изображении заключалась в обнаружении пузырьков выделяемого водорода, а по серии снимков необходимо было определить кинетику его выделения [4]. По объему выделившегося водорода оценивается скорость катодной реакции, которая равна скорости анодной, а значит скорости растворения или коррозии.



**Рис. 1.** Изображение поверхности алюминия при потенциале коррозии в 0,1 М NaCl (pH 11)

**Исследование механизма коррозионных реакций с помощью подходов компьютерного зрения.** Используемыми методами обработки информации при исследовании коррозионных реакций являются методы обработки изображения, фрактальный анализ, контурный анализ, поиск объекта по шаблону. В первую очередь математическая обработка экспериментальных данных заключается в работе с изображением  $f$ , которое является матрицей  $f(M, N)$ :

$$f(x, y) = \begin{bmatrix} f(0,0) & f(0,1) & \dots & f(0,N-1) \\ f(1,0) & f(1,1) & \dots & f(1,N-1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f(M-1,0) & f(M-1,1) & \dots & f(M-1,N-1) \end{bmatrix}.$$

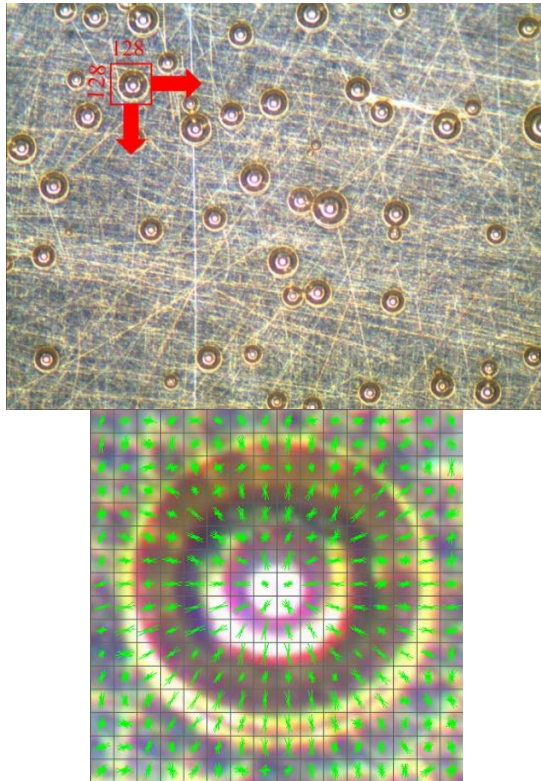
Данное представление изображения является его математической моделью. Каждый элемент такой матрицы называется элементом изображения или пикселем.

Основными операциями, производимыми при проведении операции распознавания, являются: 1) предварительная обработка изображения – сглаживание, фильтрация помех, повышение контраста; 2) бинаризация изображения и выделение контуров объектов; 3) методы обработки изображения, начальная фильтрация контуров по периметру, площади, коэффициенту формы, фрактальности и так далее.

Эти операции специфичны для каждой задачи, рассматриваемой при обработке в компьютерном зрении. Разработка и использование моделей, пригодных для эффективного решения задачи обнаружения соответствующих объектов, в значительной степени остается на грани науки и искусства, то есть требует особого ноу-хау или, другими словами, знания предметной области, отражающего многолетний опыт исследования по решению частных задач. Более подробно эти операции рассмотрены в работе [5].

Для поиска пузырька на изображении воспользуемся методом Histogram of Oriented Gradients (HOG, гистограмма ориентированных градиентов [6]) для описания признаков пузырька на изображении. Это метод, основанный на оценке нормированных гистограмм градиентов яркости изображения. Изображение делится на небольшие прямоугольные области, в каждой из которых вычисляется градиент яркости. Для совокупности полученных градиентов строится гистограмма, которая является дескриптором. Для увеличения точности локальные гистограммы подвергаются нормализации по контрасту. Для этого вычисляется мера интенсивности на большем фрагменте изображения, который называется блоком, и полученное значение используется для нормализации. Нормализованные дескрипторы

обладают лучшей инвариантностью по отношению к освещению. В силу своей локальности метод HOG устойчив к поворотам.



**Рис. 2.** Визуализация работы «скользящего окна» на примере изображения из набора данных эксперимента коррозии алюминия с водородной деполяризацией и пример построения гистограмм ориентированных градиентов для пузырька на поверхности алюминия

Будем искать «пузырек» на изображении с помощью «скользящего окна» размером  $128 \times 128$  пикселей. Разобьем его на блоки размером  $8 \times 8$ . Тогда одно окно размером  $128 \times 128$  пикселей будет содержать 256 блоков. В каждом блоке посчитаем гистограмму ориентаций градиентов с 8 ячейками. Таким образом, получаем  $8 \times 256 = 2048$  признаков. На рис. 2 представлена визуализация работы данного метода, изображение пузырька имеет размер  $128 \times 128$  пикселей и разделено на 256 блоков. В

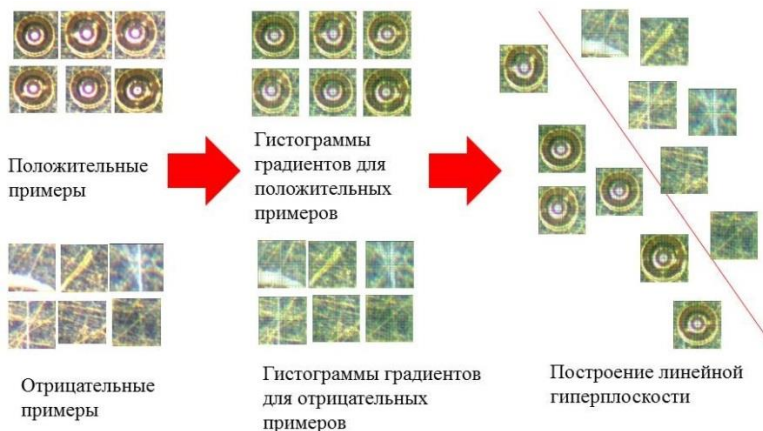


данном случае для наглядности представлена масштабированная модель. Такое количество признаков невозможно учитывать без использования машинного обучения. Эффективным средством решения данной задачи является метод опорных векторов (SVM) [7].

Решение задачи бинарной классификации при помощи метода опорных векторов заключается в поиске некоторой линейной функции, которая правильно разделяет набор данных на два класса. Рассмотрим задачу классификации, где число классов равно двум.

Задачу можно сформулировать как поиск функции  $y(x)$ , принимающей значения больше нуля для векторов одного класса (для изображений пузырьков) и меньше нуля – для векторов другого класса (фон). В качестве исходных данных для решения поставленной задачи, т. е. поиска классифицирующей функции  $y(x)$ , дан тренировочный набор векторов пространства, для которых известна их принадлежность к одному из классов. Семейство классифицирующих функций можно описать через функцию  $y(x)$ . Гиперплоскость определена вектором  $a$  и значением  $b$ , т.е.  $y(x) = ax + b$ . В результате решения задачи, т.е. построения

SVM-модели, найдена функция, принимающая значения меньше нуля для векторов одного класса и больше нуля – для векторов другого класса. Для каждого нового объекта отрицательное или положительное значение определяет принадлежность объекта к одному из классов.



**Рис. 3.** Последовательность действий для обучения линейного классификатора SVM

Предложим последовательность действий для обучения линейного классификатора SVM (рис. 3): 1) Соберем обучающую выборку фрагментом изображения с пузырьками и без; 2) Для каждого фрагмента посчитаем вектор из 2048 признаков; 3) На полученной обучающей выборке обучим линейный классификатор SVM.

После того как найдены объекты на изображении, в данном случае пузырька, произведем расчет его площади. Так как контур пузырька представляет собой окружность, то, используя метод наименьших квадратов для окружности, найдем необходимые значения радиуса и центра пузырька.

**Параллельные вычисления в задаче анализа механизма коррозионного процесса.** Существуют разные способы организации параллельных вычислений. Наиболее простым и широко распространенным является распараллеливание по экспериментальной базе, т.е. организация однотипных вычислений для разных наборов начальных данных. Лучше всего подходят для распараллеливания задачи, обладающие внутренним параллелизмом. Наиболее эффективным и трудоемким способом является распараллеливание численных методов решения задач [8, 9].

Рассматриваемый процесс обладает внутренним параллелизмом, который заключается в том, что большинство методов обработки изображения можно выполнять не по всему изображению целиком, а разбив его на части, учитывая граничные пересечения.

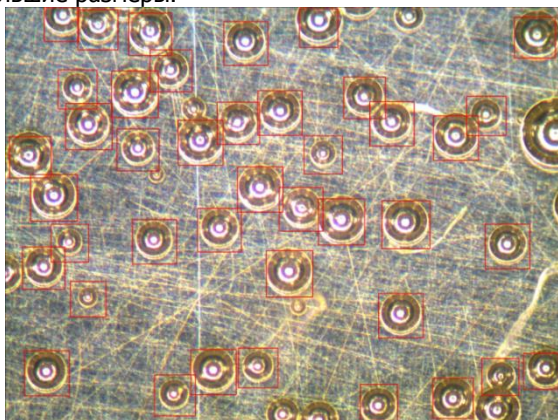
Распараллеливание вычислительного процесса по экспериментальной базе осуществляется по принципу «мастер – рабочие», при котором один процессор (мастер) считывает данные и распределяет их между процессорами-рабочими, а затем собирает результат вычислений и заносит его в базу. Так как при решении данных задач один эксперимент включает в себя порядка 200 фотографий, то даже распределение вычислений между 4 процессорами уже дает значительный прирост скорости вычислений.

Распараллеливание численного метода заключалось в решении задачи классификации методом опорных векторов. Эта задача была реализована с использованием библиотеки OpenCV.

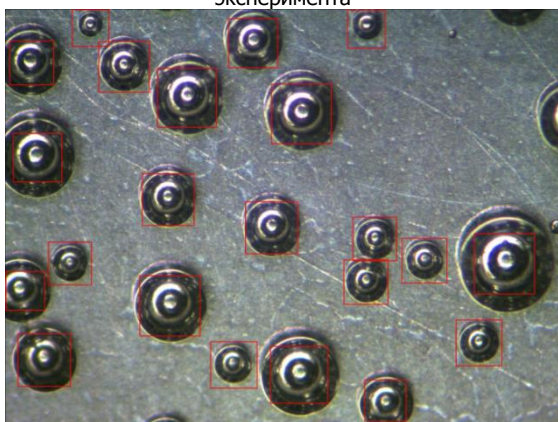
**Результаты анализа эксперимента.** Программный комплекс, реализующий ИВАС КорОценка, был написан на языке C++ в среде Qt SDK с использованием библиотеки OpenCV, в качестве СУБД использовалась SQLite.

Для решения задачи анализа коррозии на поверхности алюминия была создана выборка, состоящая из ста положительных и отрицательных примеров.

На полученной выборке был обучен линейный классификатор SVM. Из рис. 4 следует, что классификатор неудовлетворительно справляется с пузырьками, которые частично попадают в кадр либо имеют небольшие размеры.



**Рис. 4.** Результат линейного классификатора на данных первоначального эксперимента



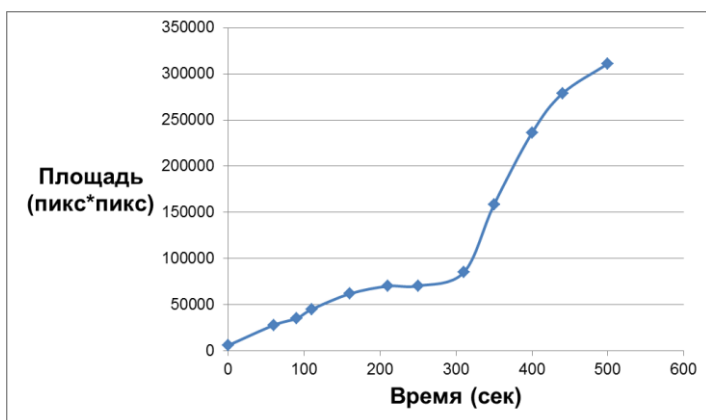
**Рис. 5.** Результат линейного классификатора на данных альтернативного эксперимента

Для получения общей картины изменения площади наблюдаемых пузырьков данным эффектом можно пренебречь.

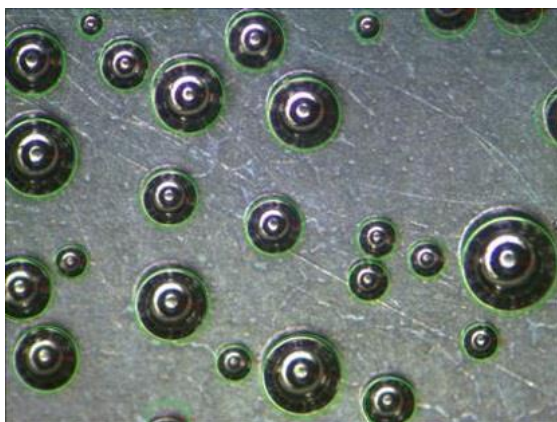
Для проверки эффективности работы классификатора его работы была проверена на наборе данных другого эксперимента, происходящего

в других условиях. Результат обработки данных эксперимента представлен на рис. 5. Несмотря на то, что классификатор был обучен на данных первого эксперимента, он показал хорошую работоспособность и на альтернативном наборе данных.

Использование параллельной реализации обучения SVM превосходно сказалось на времени выполнения расчета. В целом для задачи идентификации пузырьков на изображении ускорение составило более 15 раз.



**Рис. 6.** Изменение размеров пузырьков относительно времени



**Рис. 7.** Работа детектора пузырьков на поверхности металла

Была получена зависимость изменения общей площади пузырьков со временем (рис. 6). Также реализована возможность поиска пузырьков методами контурного анализа, но эта операция требует от пользователя введения параметров бинаризации, шумоподавления, морфологического анализа и других (рис. 7).

**Выводы.** В работе рассмотрены основные аспекты обработки и анализа изображений в задаче исследования механизма коррозионных поражений:

- исследованы методы компьютерного зрения и обработки изображения в контексте использования в задаче поиска интересных объектов на изображении;
- определена общая закономерность проведения обработки данных химического эксперимента коррозии на поверхности металла;
- создана параллельная версия программы с использованием библиотеки OpenCL и технологии CUDA;
- описанные алгоритмы применены для детектирования и распознавания коррозионного поражения для образца алюминия посредством наблюдения за интенсивностью образования пузырьков водорода. Обученный классификатор удачно применен для изучения нескольких экспериментов процесса коррозии поверхности алюминия.

#### **Библиографический список**

1. *Itzhar D., Dinstein I., Zilberberg T.* Pitting corrosion evaluation by computer image processing // *Corrosion Science*, 1981. Vol. 21. No. 1. P. 17–22.
2. *Quinn M. J., Bailey M. G., Ikeda B. M., Shoesmith D. W.* Image-analysis techniques for investigating localized corrosion processes. – Atomic Energy of Canada Limited, 1993. 52 p.
3. *Yan Y. H., Gao J. H., Liu Y., Lei S. C.* Recognition and classification of metal fracture surface models based on wavelet transform // *Acta Metallurgica Sinica – Chinese Edition*, 2002. Vol. 38. No. 3. P. 309–314.
4. *Сайфуллина Л.В., Губайдуллин И.М., Еникеев М.Р.* Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики: Учебное пособие. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2011.–90 с.
5. *Еникеев М. Р., Малеева М. А., Губайдуллин И. М.* Компьютерное зрение в задаче исследования механизма развития коррозионных поражений // *Системы управления и информационные технологии*, 2015. Т. 59. № 1.1. С. 198–204.
6. *Dalal N., Triggs B.* Histograms of Oriented Gradients for Human Detection // *Proceedings of the 2005 IEEE Computer Society Conference on*

Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR'05). – IEEE, 2005. Vol. 1. P. 886–893.

7. *Vapnik V. N.* An Overview of Statistical Learning Theory // IEEE Transactions on Neural Networks, 1999. Vol. 10. No. 5. P. 988–999.

8. *Губайдуллин И. М., Линд Ю. Б., Коледина К.Ф.* Методология рас-параллеливания при решении многопараметрических обратных задач химической кинетики // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2012. Т. 13. № 2 (26). С. 28-36.

9. *Ахметов И.В., Губайдуллин И.М.* Разработка кинетических моделей с использованием параллельных вычислений на многоядерных системах // Вестник Омского университета. 2012. № 2 (64). С. 172-174.

## METADATA

**Title:** Corrosion identification, quantitative estimation and forecasting of corrosion processes on the surface of aluminum.

**Authors:** M.R. Enikeev, I.M. Gubaydullin, L.V. Enikeeva, M.A. Maleeva.

**Abstract:** The paper covers the problem of corrosion identification and quantitative evaluation of corrosion damage. The purpose of the work is to develop a methodology for conducting an experiment and a set of parallel programs for estimating and predicting corrosion processes on the aluminum surface. This technique is considered on the example of processing data of the corrosion process of aluminum with hydrogen depolarization. The results can be used to research the corrosion processes and their mechanisms on the basis of a visual analysis of experiment.

**Key words:** metal corrosion, computer vision; parallel computing.

## **БАЗОВАЯ СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ (БСМ): КОНЦЕПЦИЯ, АРХИТЕКТУРА И МЕТОДОЛОГИЯ<sup>§§</sup>**

*В.П. Ильин<sup>1,2</sup>, В.С. Гладких<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Институт вычислительной математики и  
математической геофизики СО РАН,

<sup>2</sup>Новосибирский Государственный Университет,  
г. Новосибирск, Россия

**Аннотация.** Рассматриваются архитектура и основные компоненты базовой системы моделирования (БСМ), являющейся высокопроизводительной вычислительной средой разработки для решения прямых и обратных задач на много-процессорных системах (МВС) с распределенной и иерархической общей памятью. Модули системы БСМ содержат средства геометрического и функционального моделирования, генерации сетки, аппроксимаций высокого порядка, быстрых алгебраических решателей и т.д. Эффективное распараллеливание достигается за счет использования гибридных программных средств: MPI, OpenMP; векторизации кода, вычислительных библиотек для графических ускорителей.

**Ключевые слова:** Базовая система моделирования; среда разработки высокопроизводительных математических приложений; поддержка крупномасштабного вычислительного эксперимента.

**Введение.** Настоящая ситуация и мировые тренды развития математического моделирования имеют три главные особенности. Первая – это бурный рост суперкомпьютерных мощностей с грядущим появлением в ближайшие годы эксафлопсника ( $10^{18}$  операций в секунду и до  $10^9$  расчетных устройств) предоставляя необозримые пока до конца вычислительно-информационные возможности. Данная эволюция неизбежно сопровождается усложнением архитектуры многопроцессорных вычислительных систем с распределенной и иерархической общей памятью, со сложной организацией многопоточковых и векторизованных операций, с применением различного типа ускорителей и облачных вычислений, без эффективного использования которых не может быть обеспечена общая высокая производительность.

Вторым моментом является резко возросший уровень требований к полноте изучаемых моделей, требующих решения междисциплинарных прямых и обратных начально-краевых задач, описываемых нелинейными

---

<sup>§§</sup> Работа поддержана грантами РФФИ №14-11-00485П и РФФИ №16-29-1512 офи\_м

системами дифференциальных и интегральных уравнений в классических или обобщенных вариационных постановках с реальными данными, включающими сложные конфигурации многомерных расчётных областей с многосвязными кусочно-гладкими граничными поверхностями, многомасштабными геометрическими деталями и контрастными материальными свойствами сред. Крупномасштабный машинный эксперимент для обеспечения эффективного прогностического моделирования предполагает использование иерархии физико-математических моделей для достижения, с одной стороны, высокого разрешения и адекватности численных результатов, а с другой – оперативного и наглядного получения основных свойств исследуемых объектов.

Третий важный аспект текущей исторической ситуации заключается в чрезвычайно активном развитии самой математики: теоретической, прикладной и вычислительной, – а также технологий программирования и искусственного интеллекта. Здесь следует отметить следующие знаковые тенденции: переход к алгоритмам, обладающим законами сохранения субстанции (в том числе на основе гамильтонова формализма) и высокими порядками точности, быстрые методы решения задач вычислительной алгебры сверхбольшой размерности, масштабируемый параллелизм на различных стадиях вычислительного процесса, поддерживающий высокую производительность расчётов средствами гибридного программирования, автоматизация построения алгоритмов с целью повышения производительности труда программистов-математиков.

Совокупный потенциал математического моделирования делает его, наряду с теоретическими изысканиями и натурными экспериментами, основным орудием получения фундаментальных знаний, а также проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР) во всевозможных производственных отраслях. Однако, чтобы эти ожидания осуществились, необходимо провести огромный объём работ по созданию программного обеспечения нового поколения, которое должно довести вычислительно-информационные технологии до уровня профессиональных инструментов для широкого круга пользователей.

Традиционными формами создаваемого прикладного программного обеспечения являются открытые (Open Source) или коммерческие пакеты прикладных программ (ППП), ориентированные на решение определенного класса задач, среди огромного разнообразия которых мы приведем только две популярные разработки – ANSYS [1] и Fenics [2]. Имеется также большое количество методо-ориентированных



библиотек программ (NETLIB [3], MKL [4] и многие другие), которые представляют полезный, но вспомогательный материал для решения конкретных задач.

Альтернативной тенденцией, проявляющейся в последние десятилетия, является создание интегрированных программных окружений, открытых для участия в их развитии различных групп разработчиков всевозможных приложений. Примерами таких проектов являются OpenFoam [5], DUNE (Distributed Unified Environment [6]) и MATLAB [7]. В ИВМ и МГ СО РАН в течение ряда лет ведутся исследования по разработке концепции, архитектуры и методологии базовой системы моделирования (БСМ [8], [9]), ориентированной на согласованную поддержку всех основных технологических этапов крупномасштабного вычислительного эксперимента. Целью данной работы является описание общей структуры, компонентов функционального наполнения и принципов построения БСМ.

**Функциональное наполнение основных стадий моделирования.** Концепция БСМ заключается в создании интегрированной вычислительной среды, состоящей из достаточно автономных компонентов, или блоков, каждый из которых обеспечивает соответствующую технологическую стадию моделирования и взаимодействует с остальными блоками посредством согласованных структур данных. Совокупность этих компонентов образует инструментальное ядро БСМ, главным назначением которого является сборка, или формирование, для каждой решаемой задачи необходимой конфигурации ППП (а при необходимости – и его выполнение), рассчитанного на эффективную реализацию конкретного класса приложений. И вычислительный сеанс состоит из последовательного или циклического выполнения следующих этапов.

*Геометрическое и функциональное моделирование.* Содержание данной стадии заключается в описании заданной математической модели поставленной задачи для последующего автоматизированного формирования вычислительно-информационной модели, которая в дальнейшем представляется исходным или исполняемым программным кодом. Характерные геометрические объекты – это подобласти, граничные поверхностные сегменты, ребра и вершины, а типичные действия над ними включают сдвиг, поворот, сжатие (растяжение), а также теоретико-множественные операции, связанные в том числе с изменением топологии. В области аналитической и дифференциальной геометрии имеется много красивых результатов, которые ещё ждут своего программного воплощения: здесь и аппарат R-функций харьковской школы В. Л. Рвачева [10], и дифференциальные или

дискретные формы на многообразиях, и оптимизация геометрических структур [11]. С другой стороны, значительный объем геометрических технологий заложен в САПР-овских продуктах (CAD, CAE, CAM, PLM, см. [12]), имеющих широкое мировое распространение и с которыми БСМ должна, естественно, иметь тесное информационное согласование. В частности, здесь таким партнером выбран отечественный проект ГЕРБАРИЙ [13]. Результатом выполнения геометрического моделирования является геометрическая структура данных (ГСД) [14].

Функциональными объектами математической модели являются типы и коэффициенты решаемых уравнений, начальные и краевые условия и другие данные, которые составляют в совокупности функциональную структуру данных (ФСД), отображающую совместно с ГСД всю постановку задачи.

*Построение сеток* является самостоятельной наукоемкой проблемой, решению которой посвящено огромное количество публикаций, специальных конференций и программных продуктов - общедоступных или коммерческих, например, NETGEN [15] и GMESH [16]. Наиболее распространенными являются адаптивные сетки, подстраивающиеся под геометрические особенности расчетной области и дифференциальные свойства искомого решения. В практических задачах такие сетки являются неструктурированными, в которых свойства соседства узлов могут быть указаны только перечислением. В работе [17] описаны основные характеристики библиотеки DELAUNAY, представляющие собой интегрированное окружение для генерации квазиструктурированных сеток, в которых сеточная расчетная область может состоять из подобластей со своими различными типами подсеток. Функциональное наполнение библиотеки включает как оригинальные алгоритмы, так и согласованное использование внешних генераторов сеток. Итогом работы DELAUNAY является сеточная структура данных (ССД), которая с учетом ГСД и ФСД полностью определяет дискретизированную постановку задачи. Отметим такой важный технологический аспект, что для эффективного масштабируемого распараллеливания на базе декомпозиции областей именно на данном этапе необходимо проводить формирование сеточных подобластей и соответствующих распределенных по процессорам ССД, в соответствии с априорной оценкой трудоемкости вычислений в каждой подобласти.

*Аппроксимация исходных уравнений* в теоретическом плане составляет наиболее ответственную стадию моделирования. Самые распространенные здесь подходы – это методы конечных объемов (МКО [18]), конечных элементов (МКЭ [19]) и разрывные алгоритмы Галеркина различных порядков точности, которые все имеют

универсальную технологическую базу – параллельные поэлементные принципы вычисления локальных матриц и сборки глобальных матриц в типовых разреженных форматах. Результирующие алгебраические структуры данных (АСД) для больших задач формируются распределенными по сеточным подобластям и по соответствующим процессорам. В БСМ вся реализация аппроксимационных методологий осуществляется библиотекой CHEBYSHEV [20].

*Решение алгебраических задач* – это наиболее ресурсоемкий вычислительный этап, реализуемый в БСМ с помощью библиотеки KRYLOV [21]. Современные подходы к реализации больших разреженных СЛАУ базируются на двухуровневых предобусловленных итерационных методах сбалансированной декомпозиции областей в подпространствах Крылова, ускоряемых с помощью методов грубосеточной коррекции, наименьших квадратов, агрегации, дефляции и малоранговой аппроксимации исходных матриц, а также путём оптимизации параметров пересечения подобластей и интерфейсных условий на их внутренних границах. Масштабируемый параллелизм достигается средствами гибридного программирования, путем использования моделей MPI, OpenMP, графических ускорителей и векторизации вычислений, а также с помощью буферизации данных для минимизации коммуникационных потерь между подобластями. Эффективная реализация алгоритмов на основе АСД, представляемой с помощью сжатых разреженных форматов типа CSR (Compressed Sparse Row) с активным использованием функций библиотеки Sparse BLAS. Архитектура библиотеки KRYLOV поддерживает взаимодействие с внешними программными продуктами типа PETSc.

**Общие принципы и технические требования к построению БСМ.** Концептуальные принципы построения БСМ исходят из определения её как открытого методо-ориентированного интегрированного вычислительно-информационного окружения для решения широкого класса задач математического моделирования, ориентированного на длительный жизненный цикл с активным применением различными группами разработчиков и конечных пользователей. На основе такой общей формулировки можно определить следующие технические требования, которые должны обеспечить успешность рассматриваемого программного проекта.

- Гибкая расширяемость состава моделей решаемых междисциплинарных проблем, а также методов решения прямых и обратных задач, без программных ограничений на число степеней свободы и на количество используемых вычислительных процессоров и ядер.

- Адаптируемость к эволюции компьютерных архитектур. Компонентные технологии обеспечения согласованности внутренних и внешних межмодульных интерфейсов.

- Гибкие расширяемые структуры данных, согласованные с имеющимися распространенными форматами и поддерживающие возможности переиспользования внешних программных продуктов.

- Многоязыковость и кросс-платформенность программного функционального наполнения, открытость к согласованному участию в проекте различных групп разработчиков.

- Высокая производительность программного кода с масштабируемым параллелизмом на основе средств гибридного программирования на гетерогенных МВС с распределенной и иерархической общей памятью.

- Наличие разнообразных пользовательских интерфейсов с ориентацией на широкое применение в различных производственных сферах.

Принципы и требования к БСМ сформировались из опыта воплощения новых математических методик в виде ППП для применения в практических задачах. Возрастающие требования к детальности математических моделей и скорости их реализации в программном коде привели к тому, что увеличение эффективности труда оказалось в фокусе мирового внимания, а создание на основе накопленного опыта инструментария является важной задачей текущего столетия. Особо отметим, что одним из факторов дальнейшего успеха проекта является формирование сообщества разработчиков и пользователей, обеспечивающего дальнейшее аккумулирование опыта и ускорение развития среды разработки.

### **Библиографический список**

1. ANSYS. URL: [www.ansys.com](http://www.ansys.com) (дата обращения: 31.07.2017)
2. FEniCS. URL: <http://fenicsproject.org/> (дата обращения: 31.07.2017)
3. Netlib. URL: <http://www.netlib.org/> (дата обращения: 31.07.2017)
4. Intel ®.Mathematical Kernel Library. URL: <http://software.intel.com/en-us/intel-mkl> (дата обращения: 31.07.2017)
5. OpenFOAM. URL: <http://www.openfoam.com> (дата обращения: 31.07.2017)
6. DUNE. <http://www.dune-project.org> (дата обращения: 31.07.2017)
7. MATLAB. URL: <https://www.mathworks.com/products/matlab.html> (дата обращения: 31.07.2017)

8. Ильин, В.П. О производительности и интеллектуальности суперкомпьютерного моделирования. / Ильин В.П., Скопин И.Н. // Программирование. – 2016. – № 1. – С. 10-25.

9. Ильин, В.П. Фундаментальные вопросы математического моделирования./ Ильин В.П. // Вестник РАН. – 2016. – т. 86. – № 4. – С. 26-36.

10. Кравченко, В.Ф. Алгебра логики, атомарные функции и вейвлеты в физических приложениях / Кравченко В.Ф., Рвачев В.Л. // М.: Физматлит, 2006.

11. Delfour, M. Metrics, Analysis, Differential Calculus, and Optimization. / Delfour M., Zolesio J. Shapes and Geometries. // Philadelphia: SIAM – 2011.

12. Ушаков, Д.М. Введение в математические основы САПР. / Ушаков Д.М. // Новосибирск: Изд-во ЗАО "ЛЕДАС". – 2008.

13. «Гербарий». URL: <http://tflex.ru/about/publications/detail/index.php?ID=3846> (дата обращения: 31.07.2017)

14. Голубева, Л.А. О программных технологиях в геометрических аспектах математического моделирования / Голубева Л.А., Ильин В.П., Козырев А.Н. // Вестник НГУ. Серия "Информационные технологии". – 2012. – Т. 10. – С. 25-33.

15. Schoberl J. Netgen – an advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules / Schoberl J. // Computing and Visualization in Science. 1997. – V.1. – P. 41-52.

16. GMSH. URL: <http://gmsh.info/> (дата обращения: 31.07.2017)

17. Ильин, В.П. DELAUNAY:технологическая среда генерации сеток / Ильин В.П. // СибЖИМ. – 2013. – Т. 16. – С. 83-97.

18. Ильин, В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. / Ильин В.П. // Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН. – 2001.

19. Ильин В.П. Методы и технологии конечных элементов. / Ильин В.П. // Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН. – 2007.

20. Бутюгин, Д.С. Chebyshev:принципы автоматизации построения алгоритмов в интегрированной среде для сеточных аппроксимаций начально-краевых задач. / Бутюгин Д.С., Ильин В.П. // Труды Международной Конференции ПАВТ-2014. Челябинск: Изд-во ЮУрГУ. – 2014. – С. 42-50.

21. Бутюгин, Д.С. Функциональность и технологии алгебраических решателей в библиотеке Krylov. / Бутюгин Д.С., Гурьева Я.Л., Ильин В.П. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия "Вычислительная математика и информатика". – 2013. – Т. 2. – С. 92-105.

22. Ильин, В.П. О проблемах решения больших СЛАУ. / Ильин В.П. // Записки научных семинаров ПОМИ РАН – 2015 – т.439 – С. 112-127.

23. Ильин, В.П. О численном решении прямых и обратных задач электромагнитной электроразведки / Ильин В.П. // Сибирский журнал вычислительной математики – 2003 – Т. 6 – С. 381-391

24. Ильин, В.П. О компонентных технологиях высокопроизводительного математического моделирования. / Ильин В.П. // Труды Междунар. конф. ПАВТ-2015. Екатеринбург:УФУ,ИММ УрО РАН – 2015 – С. 166-171.

## METADATA

**Title:** Basic modeling system (BMS): the concept, architecture and methodology.

**Authors:** V.P. Il'in, V.S. Gladkih.

**Abstract:** The paper covers the architecture and main functional components of the basic system of modeling (BSM), as the integrated high-performance computational framework to solve interdisciplinary direct and inverse problems on the multi-processor computational system (MCS) with distributed and shared hierarchical memory. BSM subsystems support the stages of geometric and functional modelling, grid generation, high orders approximations, fast algebraic solutions, etc. The scalable parallelism is provided by means of hybrid programming models: MPI, OpenMP, computational libraries for graphic accelerators and vectorization. The BSM main principles are discussed to have wide applications and long life cycle.

**Key words:** Basic modelling system; framework for high-performance computation; large-scale computational experiment.

## ЭФФЕКТИВНЫЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА РАЗРЫВНЫМ МЕТОДОМ ГАЛЕРКИНА\*\*\*

*М.М. Краснов, П.А. Кучугов, М.Е. Ладонкина, В.Ф. Тишкин*  
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,  
Г. Москва, Россия

**Аннотация.** Реализованы алгоритмы решения уравнения Навье-Стокса на трехмерной тетраэдральной сетке методом Галеркина с разрывными базисными функциями. При создании программного кода использован новый подход к программированию задач математической физики, позволяющий компактно записывать и эффективно реализовывать математические формулы, в частности, за счет введения понятия «сеточного оператора», аналогичного математическому, единообразно реализовывать подход на разных типах сеток и для различных вычислительных архитектур. Исследуется эффективность созданного программного кода.

**Ключевые слова:** уравнения Навье-Стокса, разрывный метод Галеркина, параллельное программирование, шаблонное метапрограммирование

В настоящее время, для решения ряда прикладных задач математической физики необходимо использовать численные методы высокой точности. Это особенно актуально для решения сложных разномасштабных задач, в которых получить решение только измельчением сетки и методами первого порядка точности недостаточно. Примером метода, обеспечивающего высокую точность, является метод Галеркина с разрывными базисными функциями (PMГ) [1] или Discontinuous Galerkin Method (DGM), который хорошо зарекомендовал себя для решения широкого класса задач математической физики. Данный метод обладает рядом достоинств, присущих как конечно-элементным, так и конечно-разностным аппроксимациям. В частности, он обеспечивает заданный порядок точности, может использоваться для сеток произвольной структуры и теоретически обоснован [1-5]. Разрывный метод Галеркина, при всех своих достоинствах, обладает существенной вычислительной сложностью, поэтому вопрос о максимально эффективном использовании всех возможностей современной вычислительной техники стоит очень остро. Динамика развития высокопроизводительной вычислительной техники диктует создание программных комплексов, сравнительно легко адаптируемых

---

\*\*\* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 16-11-10033)

для работы на различных гибридных параллельных архитектурах. Для этого, при создании расчетных модулей, необходимо использовать новые подходы к программированию. При создании программ, основанных на численных методах высокой точности, таких как РМГ, необходимо использовать новые возможности современных языков программирования. Так, с появлением шаблонов в новых версиях языка С++ стало возможным уменьшение объема вычислений путем переноса части вычислений на стадию компиляции и как следствие, ускорение вычислений. Кроме того, шаблонное метапрограммирование позволяет упростить алгоритм за счет его обобщения [6].

**Структура программного кода DG3D.** Рассмотрим трехмерное уравнение Навье-Стокса, записанное в консервативной форме и дополненное подходящими начально-краевыми условиями.

$$\partial_t U + \nabla \cdot \mathbf{F}(U) - \nabla \cdot \mathbf{G}(U, \boldsymbol{\tau}) = 0,$$

$$\boldsymbol{\tau} = \left( \lambda - \frac{2}{3} \mu \right) (\operatorname{div} \mathbf{v}) + 2\mu S(\mathbf{v}), \quad (1)$$

$$S(\mathbf{v}) = \frac{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^*}{2}, \quad q(U) = -k \nabla T,$$

где  $U$  – вектор консервативных переменных,  $\mathbf{F}(U)$ ,  $\mathbf{G}(U, \boldsymbol{\tau})$  – функции невязкого и вязкого потока соответственно,  $\mathbf{v}$  – вектор скорости,  $\mu$  – коэффициент динамической вязкости,  $\lambda$  – объемная вязкость,  $\boldsymbol{\tau}$  – тензор вязких напряжений.

Полагаем, что жидкость подчиняется произвольным уравнениям состояния.

Для применения разрывного метода Галеркина покроем область  $\Omega$ , на которой ищется решение, тетраэдральной сеткой  $T_h$ . На каждом элементе  $T_j$  приближенное решение системы уравнений (1) будем искать в виде полиномов  $P(x)$  степени  $p$  с зависящими от времени коэффициентами. В данной работе в качестве базисных функций используется базис Тейлора.

Как принято при решении уравнений второго порядка разрывным методом Галеркина, в данной работе уравнения Навье-Стокса записаны в виде системы уравнений первого порядка и решение происходит в два этапа [1, 7]. На первом этапе вычисляются компоненты тензора вязких напряжений, и компоненты вектора градиента температуры, аппроксимация которых, как и аппроксимация решения, в пределах ячейки сетки находится в виде полиномов степени  $p$  с зависящими от



времени коэффициентами, на следующем этапе определяются компоненты вектора консервативных переменных.

В ходе решения данной системы необходимо правильно определять потоковые функции, вычисленные на границе элемента. Невязкие потоки могут быть рассчитаны при помощи различных вариантов точного или приближенного решения задачи Римана. В разработанном программном комплексе создана библиотека программных реализаций этих аппроксимаций [8-10]. В настоящий момент используются различные дискретные аппроксимации как для вязких [7, 11, 12], так и невязких потоковых членов.

Для обеспечения монотонности решения, полученного методом Галеркина с разрывными базисными функциями, необходимо вводить так называемые ограничители наклона, или лимитеры, в особенности для случаев, когда решение содержит сильные разрывы. В данной работе используется классический лимитер Кокбуерна [1, 13-15], который надежен в работе и легко реализуется в трехмерном случае на сетках произвольной структуры.

При создании программного комплекса, реализующего разрывный метод Галеркина на неструктурированных тетраэдральных сетках [16] использовался принципиально новый подход к программированию задач математической физики, позволяющий компактно записывать и эффективно реализовывать математические формулы, в частности, за счет введения понятия «сеточного оператора», аналогичного математическому, единообразно реализовывать подход на разных типах сеток и для различных вычислительных архитектур. Сеточно-операторный подход к программированию реализуется в виде библиотеки классов для языка C++. Основной инструмент языка C++, используемый при реализации данного подхода – шаблонное метапрограммирование. С помощью данного инструмента реализуется проблемно-ориентированный язык (DSL) для манипулирования сеточными функциями. С помощью этого языка из сеточных функций можно строить сеточные выражения любой сложности, которые могут включать арифметические операции со скобками, а также применение сеточных операторов к сеточным выражениям. Эти сеточные выражения можно присваивать сеточным функциям, причем сами вычисления в соответствии с заданным выражением запускаются только в момент присваивания. До этого цепочка вычислений только запоминается. Реализуется концепция так называемых «отложенных» вычислений. Это позволяет, в частности, избавиться от дополнительных массивов для хранения промежуточных результатов.

Для реализации сеточно-операторного подхода к программированию, в ИГМ им. М.В. Келдыша РАН создана библиотека gridmath. Данная библиотека реализует сетки, сеточные функции, сеточные вычислители, арифметику вычисляемых объектов и сеточных операторов, распараллеливание вычислений на общей памяти с помощью OpenMP или CUDA.

**Анализ эффективности программного кода.** Согласно закону Амдала ускорение при распараллеливании вычислений на  $p$  процессов ограничено долей  $\alpha$  от объёма вычислений, которая может быть получена только последовательными расчётами. Доля вычислений, которая может быть распараллелена идеально, в этом случае составляет  $1 - \alpha$  и может быть ускорена в  $p$  раз. Тогда ускорение, которое может быть получено на вычислительной системе из  $p$  процессоров, по сравнению с однопроцессорным решением не будет превышать величины

$$S_p = \frac{1}{\alpha + \frac{1-\alpha}{p}}$$

Если число  $\alpha$  мало, то приближённо можно записать

$$S_p = \frac{p}{\alpha p + 1}$$

Из этой формулы следует, что идеальное ускорение (в  $p$  раз) можно получить только в том случае, если доля последовательных вычислений равна нулю. А, например, в случае, если доля последовательных вычислений составляет половину, при любом количестве процессов ускорение не может быть больше двух. Таким образом, с ростом  $p$  ускорение асимптотически приближается к числу  $1/\alpha$ .

В хорошо масштабируемых программах число  $\alpha$  определяется, прежде всего, обменами границами между процессами и зависит от отношения числа граничных ячеек к общему числу ячеек сетки, но вычислить его заранее трудно. Но при готовой конфигурации распределения сетки по процессам, его можно экспериментально оценить. Если известно ускорение на  $p$  процессорах, то число  $\alpha$  можно оценить, как

$$\alpha = \frac{p - S_p}{(p - 1) \cdot S_p}$$

Или, приближённо, для  $p \gg 1$

$$\alpha = \frac{p - S_p}{p \cdot S_p}$$

После этого, зная  $a$ , можно оценить ускорение для других  $p$ , и, самое главное, понять, до какой степени данная задача масштабируема и на каком числе процессов её имеет смысл запускать.

Рассмотрим дополнительное ускорение при удвоении числа процессов (воспользуемся приближённой формулой):

$$\frac{S_{2p}}{S_p} = \frac{2(\alpha p + 1)}{2\alpha p + 1} = 1 + \frac{1}{2\alpha p + 1}$$

Выберем в качестве максимального такое  $p$ , при котором удвоение числа процессов ускоряет вычисления не более, чем на 20%:

$$2\alpha p + 1 = 5; p = 2 / a.$$

Для оценки эффективности программного комплекса рассмотрим решение задачи об обтекании твердого тела разрывным метод Галёркина на нерегулярной сетке содержащей  $3 \cdot 10^6$  ячеек.

Вычисления проводились на кластерах К-100 и К-60. Кластер К-100 состоит из 64 вычислительных узлов, каждый узел содержит по 2 CPU Intel Xeon X5670 по 6 ядер на процессор, всего 12 вычислительных ядер и 96 Гбайт оперативной памяти, а также по 3 графических карты nVidia Fermi C2050 с 2,8 Гбайт оперативной памяти на каждой. Кластер К-60 состоит из 66 вычислительных узлов. Каждый узел представляет собой двухпроцессорный сервер Intel Xeon E5-2690 v4 с оперативной памятью 256GB. Результаты расчетов на кластере К-60 приведены в таблице 1, на кластере К-100 – в таблице 2,  $p$  – количество процессов,  $t$  – время в секундах,  $S_p$  – ускорение,  $E_p = S_p / p$  – эффективность,  $a$  – доля последовательных вычислений.

Таблица 1

$p$	$t1, c$	$S_{p1}$	$E_{p1}, \%$	$a1$	$t2, c$	$S_{p2}$	$E_{p2}, \%$	$a2$
1	1015,05	1,00			1012,68	1,00		
2	508,00	2,00	100	0,0009	504,00	2,01	100	-
4	264,13	3,84	96	0,0136	257,50	3,93	98	0,0057
8	149,49	6,79	85	0,0255	139,01	7,28	91	0,0140
16	83,80	12,11	75	0,0214	69,92	14,48	90	0,0070
32	54,69	18,56	58	0,0234	35,43	28,58	90	0,0039
64	42,95	23,63	37	0,0271	17,41	58,17	91	0,0016
128	41,61	24,39	20	0,0334	8,35	121,28	95	0,0004
256	49,73	20,41	8	0,0453	3,92	258,34	101	0,0000

Таблица 2

p	t1,c	S <sub>p1</sub>	E <sub>p1</sub> ,%	a1	t2,c	S <sub>p2</sub>	E <sub>p2</sub> ,%	a2
1	582,57				35,2			
2	302,85	1,9	96	0,0198	18,16	1,9	97	0,0159
4	150,6	3,9	97	0,0085	10,49	3,3	84	0,0480
8	80,61	7,2	90	0,0134	5,47	6,4	80	0,0304
12	55,55	10,5	87	0,0120	3,76	9,3	78	0,0235
16	42,16	13,8	86	0,0098	2,91	12,1	76	0,0202
32	22,51	25,9	80	0,0074	1,54	22,8	71	0,0125

В табл. 1 в первой серии расчетов, помеченной цифрой «1» учитывалось полное время выполнения программы с момента инициализации и запись результатов расчета в файл. Так как результаты записываются в единый файл последовательно со всех процессов, то эффективность падает до 8%. Это не совсем корректная оценка эффективности программы, так как реальное расчетное время на несколько порядков выше, а время записи в файл – остается прежним. Оценка эффективности непосредственно расчетной части программы приведена во второй части табл. 1. Наиболее достоверные цифры оценки эффективности находятся в районе 90%. Дальнейший рост  $E_p$  можно объяснить ускорением вычислений, проходящих в быстрой памяти, а также быстрыми обменами.

Рассмотрим вычисления на графических ускорителях с использованием CUDA. Результаты расчета приведены в табл. 2 во второй части и обозначены цифрой «2». Несмотря на падение эффективности с ростом количества процессов относительно расчетов, выполненных с использованием библиотек MPI и OpenMP, скорость вычисления на графических ускорителях превышает в 15 и более раз скорость выполнения программы без использования CUDA. Кроме того, данные расчеты позволяют оптимально подобрать конфигурацию для расчета конкретной задачи. В этом случае при  $p=12$  и выше  $a \approx 0,02$ . Это даёт максимальное разумное  $p = 2 / a = 100$ . На относительно хорошее масштабирование можно рассчитывать примерно до  $p=128$ .

Таким образом, проведя серию расчетов на небольшом количестве процессов можно оценить динамику масштабируемости расчета и подобрать оптимальную конфигурацию для запуска программного комплекса.

### Библиографический список

1. Cockburn B. An Introduction to the Discontinuous Galerkin Method for Convection – Dominated Problems, Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations // Lecture Notes in Mathematics, 1998,

v.1697, pp.151-268.

2. A.K. Pany and S.Yadav. An hp-Local Discontinuous Galerkin method for Parabolic Integro-Differential Equations, OCCAM, Report N 09/30.

3. Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тишкин В.Ф., Утиралов Д.И. Реализация граничных условий прилипания для разрывного метода Галеркина // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2014, 032, 16 с.

4. Ладонкина М.Е., Тишкин В.Ф. О методах типа Годунова высокого порядка точности // Доклады академии наук, 2015, Т.461, № 4. С. 390-393.

5. Ладонкина М.Е., Тишкин В.Ф. Обобщение метода Годунова, использующее кусочно-полиномиальные аппроксимации // Дифференциальные уравнения, 2015, Т. 51, № 7. С. 899-907.

6. Краснов М.М. Операторная библиотека для решения трёхмерных сеточных задач математической физики с использованием графических плат с архитектурой CUDA // Математическое моделирование, 2015, Т.27, № 3. С.109-120.

7. Bassi F., Rebay S. A High-Order Accurate Discontinuous Finite Element Method for the Numerical Solution of the Compressible Navier-Stokes Equations // Journal of Computational Physics, 1997, 131, pp.267-279.

8. Годунов С.К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Матем. сб., 1959. 47(89):3, С. 271-306.

9. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями. // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1961. Т.I, №2. С. 267-279.

10. Lax P.D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1954,7, №1, pp. 159 -193.

11. Arnold D.N., Brezzi F., Cockburn B., Marini L.D. Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems. // SIAM Journal on Numerical Analysis, 2002, 29, pp. 1749-1779.

12. A.K. Pany and S.Yadav An hp-Local Discontinuous Galerkin method for Parabolic Integro-Differential Equations, OCCAM, Report N 09/30

13. М.Е. Ладонкина, О.А. Неклюдова, В.Ф. Тишкин. Исследование влияния лимитера на порядок точности решения разрывным методом Галеркина // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша, 2012, № 34, С. 31.

14. М.Е. Ладонкина, О.А. Неклюдова, В.Ф. Тишкин. Исследование влияния лимитера на порядок точности решения разрывным методом Галеркина // Мат. модел., 2012, Т.24, №12. С. 124-128.

15. М.Е. Ладонкина, О.А. Неклюдова, В.Ф. Тишкин. Лимитер повышенного порядка точности для разрывного метода Галеркина на

треугольных сетках // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша, 2013, № 53, 26с.  
16. Краснов М.М., Кучугов П.А., Ладонкина М.Е., Тишкин В.Ф. Разрывный метод Галеркина на трехмерных тетраэдральных сетках. Использование операторного метода программирования. // Математическое моделирование, 2017 г., т. 29, № 2, С. 3-22.

## METADATA

**Title:** Efficient parallel software system for solving Navier-Stokes equations by the discontinuous Galerkin method.

**Authors:** M.M. Krasnov, P.A. Kochugov, M.E. Ladonkina, V.F. Tishkin.

**Abstract:** Algorithms for solving the Navier-Stokes equations on a three-dimensional tetrahedral grid by the Galerkin method with discontinuous basis functions were realized. Under the code development a new approach to programming problems of mathematical physics was used which allows one compactly write and effectively implement mathematical expressions in particular due to introduction of the concept of «grid operator» similar to mathematical one and uniformly realize algorithms for various grid types and computing architectures. The efficiency of this numerical code is investigated.

**Key words:** Navier-Stokes equations, discontinuous Galerkin method, parallel programming, templated meta-programming.

## РАСПАРЛЛЕЛИВАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПРИ ОПТИМИЗАЦИИ УСЛОВИЙ ПРОВЕДЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

К.Ф. Коледина<sup>1,2</sup>, С.Н. Коледин<sup>2</sup>, И.М. Губайдуллин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа РАН

<sup>2</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет  
г. Уфа, Россия

**Аннотация.** В работе приведены модели распараллеливания вычислительного процесса при оптимизации условий проведения химических реакций. Определена эффективность применения островной модели распараллеливания. Решена задача оптимизации условий проведения реакции спиртов с диметилкарбонатом в присутствии  $W(CO)_6$ , определены оптимальные значения времени проведения реакции и начального количества катализатора.

**Ключевые слова.** Моделирование сложных химических реакций; кинетическая модель; островная модель; оптимизация условий проведения химических реакций.

Результатом моделирования сложных химических реакций является определение оптимальных условий их проведения. Основой оптимизации химических реакций является детальная кинетическая модель, определяющая значения кинетических параметров, уравнения скоростей отдельных стадий и физико-химические закономерности протекания реакции [1]. В основе кинетической модели лежит математическая модель кинетики химических реакций, представляющая собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ), как правило, большой размерности, жесткой [2].

Постановка задачи оптимизации предполагает наличие целевых функций, варьируемых параметров и некоторых ограничений на варьируемые параметры [3, 4]. При решении задачи оптимизации происходит последовательный перебор по некоторому алгоритму большого количества узлов, причем в каждом решается прямая задача для СОНДУ кинетики химических реакций. Что, как правило, занимает продолжительное время. Поэтому возникает необходимость проведения распараллеливания вычислительного процесса решения задачи оптимизации условий проведения химических реакций.

При небольшой размерности задачи возможно применение сеточного алгоритма, предполагающего разбиение области определения варьируемых параметров на сетку с заданным шагом. Использование параллельной реализации сеточного алгоритма при определении области достижимости за счет распределения подобластей по процессорам позволяет эффективно использовать имеющиеся ресурсы (при

использовании 4 ядер время вычисления сокращается в 4 раза, соответственно).

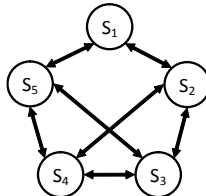
Однако, при больших размерностях области определения, применяются популяционные алгоритмы решения задачи оптимизации и соответствующие модели их распараллеливания [5]. Применение генетического алгоритма [6] решения задачи оптимизации предполагает применение моделей распараллеливания[7]:

1) Островная модель (Island Model)

Создается мультипопуляция, состоящая из числа субпопуляций (островов), равного числу используемых процессоров  $S = \bigcup_{i=1}^{|P|} S_i$ ;

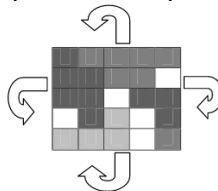
$|S| = \bigcup_{i=1}^{|P|} |S_i|$  (где  $S$  – мультипопуляция,  $S_i$  – субпопуляции (острова),

$|P|$  – число используемых процессоров) (рис. 1). Каждый остров обрабатывает свой процессор системы. То есть на каждом острове обрабатывается своя часть исходной популяции. Сначала, в течение заданного периода, субпопуляции развиваются независимо, а затем для синхронизации островов используют дополнительный процесс, который осуществляет обмен данными.



**Рис. 1.** Островная модель распараллеливания популяционных алгоритмов

2) Клеточная модель (Cellular Model)



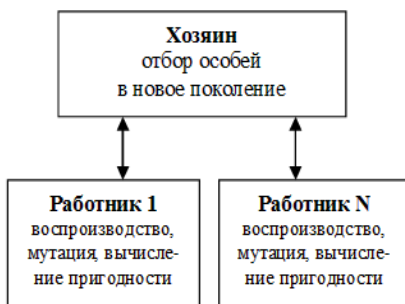
**Рис. 2.** Клеточная модель распараллеливания популяционных алгоритмов

Пусть дано 2500 процессоров, расположенных на сетке размером 50×50 ячеек, замкнутой, как показано на рис. 2. (левая сторона



замыкается с правой, верхняя с нижней, получается тор). Каждый процесс может взаимодействовать только с четырьмя своими соседями (сверху, снизу, слева, справа). В каждой ячейке находится ровно одна особь. Каждый процесс будет выбирать лучшую особь среди своих соседей, скрещивать с ней особь из своей ячейки и одного полученного ребенка помещать в свою ячейку вместо родителя. По мере работы такого алгоритма возникают эффекты, похожие на островную модель. Сначала все особи имеют случайную приспособленность (на рис. 2. она определяется по цвету). Спустя несколько поколений образуются небольшие области похожих особей с близкой приспособленностью. По мере работы алгоритма эти области растут и конкурируют между собой.

3) Глобальная модель «Хозяин – Работник» (Global model Worker/Farmer)



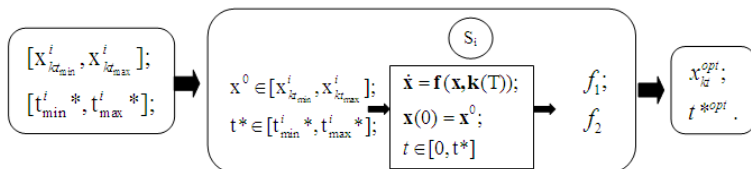
**Рис. 3.** Глобальная модель «Хозяин – Работник» распараллеливания популяционных алгоритмов

Рабочие станции «Работники» отвечают за процессы воспроизводства, мутации и вычисления функции пригодности особей для их отбора в новое поколение. Все созданные и оцененные «Работники» особи поступают на рабочую станцию «Хозяина», которая затем проводит отбор особей согласно оценке их пригодности в новую популяцию. Отобранные особи передаются «Хозяином» к рабочим станциям «Работникам» (рис. 3).

В работах [8, 9] приведена детальная кинетическая модель химической реакции спиртов с диметилкарбонатом в присутствии катализатора  $W(CO)_6$ . Для оптимизации условий проведения реакции был применен генетический алгоритм решения задачи оптимизации с островной моделью распараллеливания вычислительного процесса [10].

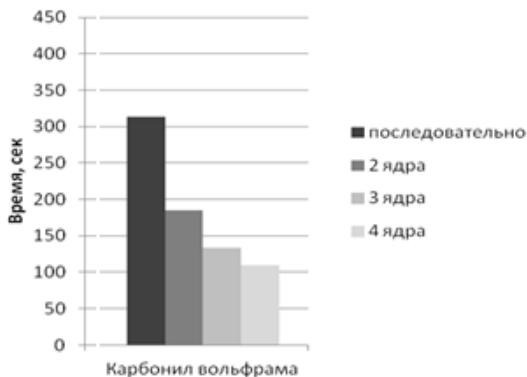
При этом каждый процессор на входе получает свой локальный интервал изменения варьируемых параметров, а на выходе выдает оптимальные значения варьируемых параметров из заданного интервала.

При этом выбираются значения из заданного интервала и в них происходит расчет прямой задачи решения СОНДУ с определением значений целевых функций. И те значения варьируемых параметров, которые доставляют экстремум целевым функциям выделяются как оптимальные для данного локального интервала процессора (рис. 4).



**Рис. 4.** Обработка субпопуляций в каждом процессоре островной модели распараллеливания

Для задачи расчета оптимальных значений времени проведения реакции и начального количества катализатора для реакции спиртов с диметилкарбонатом в присутствии  $W(CO)_6$  была применена островная модель распараллеливания, проведена оценка времени вычислительного эксперимента (рис. 5) (Расчеты проводились на персональном 4-ядерном компьютере Intel Core I5) [11].

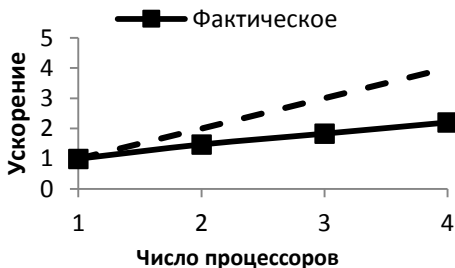


**Рис. 5.** Время проведения вычислительного эксперимента с использованием генетического алгоритма

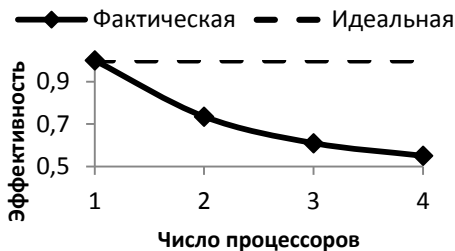
Ускорение, получаемое при использовании параллельного алгоритма для  $P$  процессоров, по сравнению с последовательным вариантом выполнения вычислений определяется величиной [12]:

$$S_p = T_1 / T_p,$$

т.е. как отношение времени решения задач на скалярной ЭВМ к времени выполнения параллельного алгоритма (рис. 6).



**Рис. 6.** Ускорение параллельной программы для генетического алгоритма

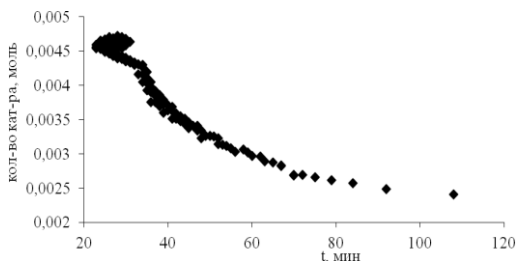


**Рис. 7.** Эффективность выполнения параллельной программы для генетического алгоритма

Эффективность использования параллельным алгоритмом процессоров при решении задачи определяется соотношением

$$E_p = S_p / p,$$

т.е. как средняя доля времени выполнения алгоритма, в течение которой процессоры реально задействованы для решения задачи (рис. 7). Эффективность распараллеливания для рассматриваемых реакций составила 60%. Не достигается идеальная эффективность распараллеливания, по-видимому, в связи с затратами времени на синхронизацию данными между островами.



**Рис. 8.** Оптимальные условия проведения каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом

На рис. 8 приведены значения варьируемых параметров – время проведения реакции и начальное количество катализатора, обеспечивающие достижение экстремальных значений критериев оптимизации- выхода целевого продукта и рентабельности процесса, реакции спиртов с диметилкарбонатом в присутствии  $W(CO)_6$ .

Таким образом, распараллеливание вычислительного процесса позволяет снизить временные затраты на определение оптимальных условий проведения химических реакций.

### Библиографический список

1. Koledina K.F., Koledin S.N., Schadneva N.A., Mayakova Y.Y., Gubaydullin I.M. Kinetic model of the catalytic reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence  $CO_2(CO)_8$  AND  $W(CO)_6$  // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2017. С. 1-14.
2. Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитических реакций гидроалюминирования олефинов алюминийорганическими соединениями // Журнал физической химии. 2016. Т. 90. № 5. С. 671-678.
3. Коледин С.Н., Коледина К.Ф. Планирование экономически оптимального химического эксперимента на основе кинетической модели каталитической реакции взаимодействия спиртов с диметилкарбонатом // Журнал Средневолжского математического общества. 2015. Т. 17. № 2. С. 43-50.
4. Коледин С.Н., Коледина К.Ф. Оптимальное управление и чувствительность оптимума в задачах химической кинетики // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18. № 3. С. 137-144.
5. Панченко Т.В. Генетические алгоритмы // Астрахань: издательский дом «Астраханский университет», 2007. 87 с.

6. Гольдштейн, А.Л. Оптимизация в среде MATLAB: учебное пособие. // Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2015. 192с.
7. Коледина К.Ф. Последовательно-параллельное определение кинетических параметров при моделировании детального механизма гидроалюминирования олефинов // дисс. на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук . Башкирский государственный университет. Уфа, 2011
8. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Щаднева Н.А., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журнал физической химии. 2017. Т. 91. № 3. С. 422-428.
9. Коледин С.Н., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Определение оптимальных условий каталитических процессов на основе экономических критериев // Химическая промышленность сегодня. 2016. № 10. С. 24-35.
10. Спивак С.И., Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Информационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов // Прикладная информатика. 2017. Т. 12. № 1 (67). С. 39-49.
11. К.Ф. Коледина, С.Н. Коледин, И.М. Губайдуллин, А.П. Карпенко Многоцелевая параллельная задача нелинейной оптимизации условий проведения каталитических процессов // Сборник трудов международной конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2017)». 2017. С. 377-385.
12. Карпенко, А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учебное пособие. // Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2014. 446 с.

## METADATA

**Title:** Parallelization of computational process in the optimization of conditions of chemical reactions.

**Authors:** K. F. Koledina, S. N. Koledin, I. M. Gubaydullin

**Abstract:** In this paper, parallelization models of computational process are presented for optimizing conditions of chemical reactions. The efficiency of the island parallelization model is determined. The problem of optimizing the reaction conditions for alcohols with dimethylcarbonate was solved in the presence of  $W(CO)_6$ , the optimal values of the reaction time and the initial amount of the catalyst were determined.

**Key words:** modeling complex chemical reactions; kinetic model; island model; optimization of chemical reaction conditions.

## **КОМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД КЛАССИФИКАЦИИ СЛОЕВ И КЛЕТОК КОРТЕКСА МОЗГА МЫШИ, ОКРАШЕННЫХ ПО НИССЛЮ, НА ОСНОВЕ ПОСЛОЙНОЙ СТАТИСТИКИ ДЕСКРИПТОРОВ КЛЕТОК<sup>+++</sup>**

*С.А. Носова, В.Е. Турлапов*

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского  
Нижний Новгород, Россия

**АННОТАЦИЯ.** Предложен комплексный метод для автоматического детектирования и классификации слоев коры и клеток мозга по изображениям срезов кортекса мыши, окрашенных по Нисслю. Построена таблица значений 11 дескрипторов 4 типов клеток мозга для каждого слоя кортекса, иллюстрирующая зависимость их значений от слоя. Метод начинается с реконструкции границ слоев для регистрации слоя каждой клетки. Регистрация далее определяет границу клетки, комбинируя метод Саппу, лучевой метод, матморфологическое открытие. Классификация астроцитов и 3 типов нейронов происходит по значениям дескрипторов текущего слоя.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** обработка изображений; оптическая микроскопия; окрашивание по Нисслю; кортекс мозга мыши; сегментация; слои по Бродману; классификация; нейрон; астроцит; метод Саппу; лучевой метод

**Актуальность.** Популярность окрашивания по Нисслю (Nissl) в исследовании мозга методами оптической микроскопии делает актуальной автоматизацию обработки изображений для этих исследований, и эта актуальность растёт, вместе с интенсивностью исследований и многообразием методов, по мере накопления данных, остающихся необработанными или недоисследованными, вплоть до последних лет. Так в статье [1], посвященной сегментации пирамидальных нейронов, используется метод водораздела. В [2] сегментация клеток осуществляется на основе машинного обучения методом случайного леса. В [3] описан алгоритм, основанный на нормализованном разрезе графа. В [4] предложен метод ANRA, который основан на методах машинного обучения и имеет хорошую точность. Задача детектирования границ слоев решается в работах [5] и [6] как отдельная задача на основании атласов мозга мыши.

Целью данной работы является создание и тестирование комплексного метода классификации клеток мозга, учитывающего в явном виде реальные связи некоторых возможных дескрипторов клеток

---

<sup>+++</sup> Работа поддержана Федеральной целевой программой Министерства образования и науки РФ, контракт 14.581.21.0016 (RFMEFI58115X0016)

со слоем, в котором они расположены. Данные микроскопии предоставлены и размечены Нижегородской государственной медицинской академией (НижГМА).

**Послойная статистика дескрипторов клеток кортекса мыши.** По Бродману, кортекс мыши состоит из 6 слоев (слои 2 и 3 считаются неразделимыми). Для решения задачи классификации клеток (нейронов и астроцитов) собрана статистика об их форме и распределению плотности внутри клетки (на основании разметки специалистом, рис. 4(2)). В табл. 1. приведены характеристики различных клеток мозга в зависимости от слоя. На рис. 1 – 3 приведены нормализованные гистограммы интенсивностей изображения для размеченных областей астроцитов, пирамидальных и звездчатых нейронов в зависимости от слоя кортекса.

**Детектирование границ слоев кортекса.** Для предобработки данных используется алгоритм выравнивания гистограммы, описанный в [7], - получаем изображение  $EQ_I$ . Результат применения этого алгоритма приведен на рис. 4(4).

Таблица 1  
Характеристики (дескрипторы) формы клеток в зависимости от слоя  
(Астр. – астроциты, ПН – пирамидальные нейроны, ЗН – звездчатые нейроны;  
НМС – нейроны молекулярного слоя)

Слой	Тип клетки	Площадь	Периметр	Протяженность	Главная диагональ	Побочная диагональ	Ориентация	Соотношение диагоналей	Компактность	Заполненность	Выпуклость	Эквивалентный диаметр
I	Астр.	139,00	55,80	0,70	17,60	11,29	97,01	1,58	0,58	0,91	0,86	13,29
	НМС	419,25	88,58	0,67	32,18	19,52	90,22	1,65	0,66	0,92	0,95	22,96
	ЗН											
II-II	Астр.	278,30	65,60	0,71	25,41	16,09	113,06	1,68	0,74	0,94	0,96	18,50
	ПН	781,02	118,60	0,72	43,18	25,37	81,54	1,74	0,70	0,94	0,95	31,38
	ЗН	1171,25	134,18	0,77	42,55	35,55	115,94	1,20	0,81	0,96	0,94	38,48
IV	Астр.	369,92	79,51	0,72	29,60	17,63	98,15	1,72	0,75	0,95	0,96	21,63
	ПН											
	ЗН	793,38	111,30	0,75	38,29	26,79	85,39	1,45	0,78	0,96	0,95	31,33
V	Астр.	340,56	72,74	0,73	26,65	17,59	102,02	1,53	0,76	0,95	0,96	20,78
	ПН	1456,23	165,32	0,68	56,61	37,75	89,80	1,55	0,66	0,92	0,94	42,44

	ЗН	1375,8 3	146,1 4	0,7 6	48,8 9	36,3 9	85,55	1,3 8	0,7 9	0,9 7	0,9 5	41,4 9
<b>VI</b>	Астр	322,85	70,33	0,7 1	25,6 3	16,9 7	89,75	1,5 5	0,7 5	0,9 5	0,9 6	19,6 1
	ПН											
	ЗН	1786,9 8	169,2 4	0,7 5	55,3 1	42,5 8	93,00	1,3 1	0,7 8	0,9 6	0,9 4	47,2 4

Таблица 3

Отношение толщины слоев кортекса к толщине кортекса в целом

<b>I</b>	<b>II-III</b>	<b>IV</b>	<b>V</b>	<b>VI</b>
0,09	0,25	0,08	0,22	0,36

Мы вычисляем функцию плотности для изображения  $DL(i, j)$ , нормализованную функцию плотности  $NDL(i, j)$ , находим среднее значение функции плотности, используя следующие формулы:

$$DL(i, j) = \frac{1}{\min(M-1, j+k) - \max(0, j-k) + 1} \sum_{y=\max(0, j-k)}^{\min(M-1, j+k)} EQ\_I(i, y),$$

$0 \leq i \leq N-1, 0 \leq j \leq M-1, 0 < k \leq N-1; k$  – настраиваемый параметр,

$$NDL(i, j) = \frac{DL(i, j)}{\sum_{i=0}^{N-1} DL(i, j)} \quad \overline{NDL}(j) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} NDL(i, j).$$

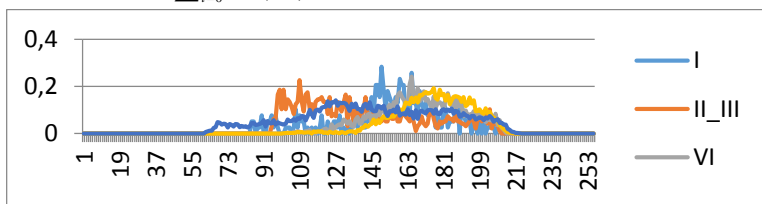


Рис. 2. Нормализованные гистограммы астроцитов в зависимости от слоя кортекса

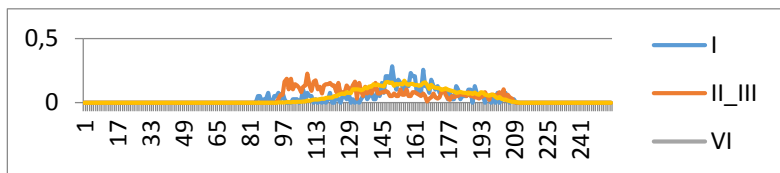
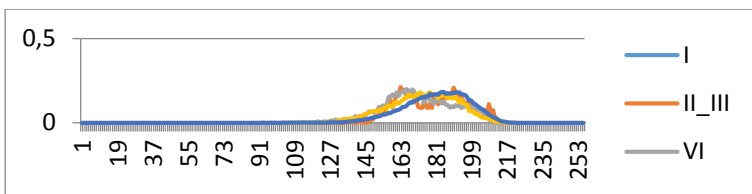
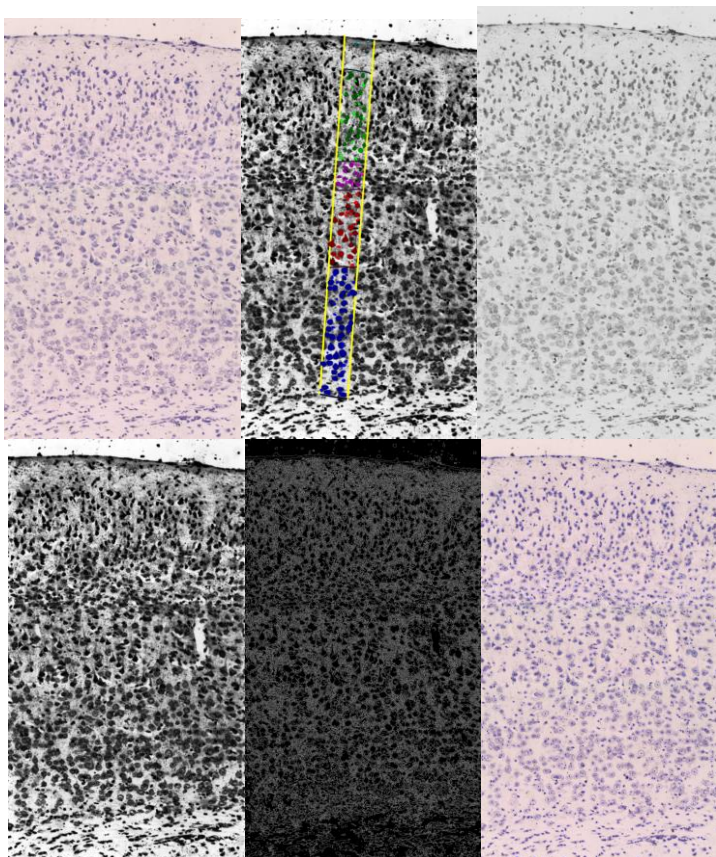


Рис. 3. Нормализованные гистограммы пирамидальных нейронов для слоев кортекса





**Рис. 4.** Нормализованные гистограммы звездчатых нейронов для слоев кортекса



**Рис. 5.** Слева направо, сверху вниз: 1 – исходное изображение, 2 – размеченные данные, 3 – изображение в оттенках серого, 4 – увеличение контраста исходного изображения, 5 – результат детектирования границ методом Canny, 6 – результат детектирования точек

Верхняя и нижняя границы кортекса в каждом столбце пикселей вычисляются следующим образом:

$$upperBorder(j) = \min_{0 \leq i \leq N-1} i, NDL(i, j) > \overline{NDL}(j) + k1,$$

$$lowerBorder(j) = \max_{0 \leq i \leq N-1} i, NDL(i, j) > \overline{NDL}(j) + k2,$$

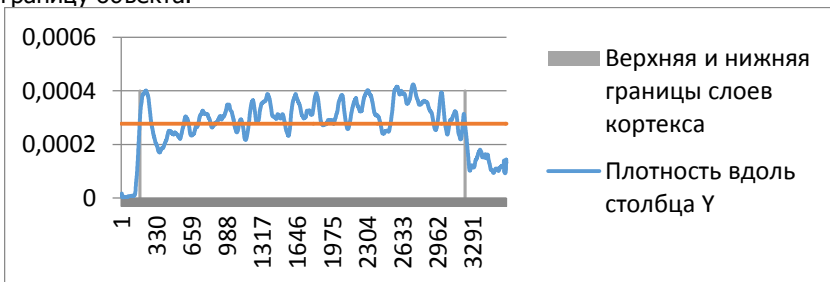
$0 \leq j \leq M - 1$ ;  $k1$  и  $k2$  – настраиваемые параметры.

Таким образом,  $upperBorder(j)$ ,  $lowerBorder(j)$  однозначно определяют нахождение верхней и нижней границы слоев кортекса по Бродману (рис.5). Разделители между промежуточными слоями рассчитываются на основании статистики, приведенной в табл. 2. Итоговое разделение на слои приведено на рис. 7.

**Детектирование всех клеток как нейронов.** Детектирование состоит в нахождении центров клеток и оценке радиуса клеток. Алгоритм детектирования всех клеток как нейронов опубликован в [8].

**Регистрация всех клеток как нейронов.** На данном этапе у нас есть точки  $p(l)$  (все детектированы пока как нейроны) и оценки радиусов полученных клеток  $r(l)$ . Алгоритм сегментации на основе лучевых методов состоит из следующих шагов (выполнить для каждого  $l$ ):

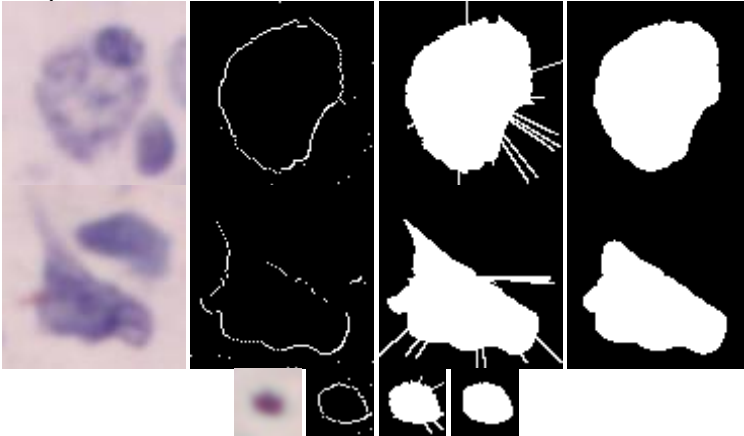
1. Сформировать на изображении  $Canny\_I(i, j)$  квадрат  $rect(l)$  с центром в  $p(l)$  стороной  $1.5 * r(l)$ .
2. Сгенерировать набор лучей из  $p(l)$  к границам  $rect(l)$ .
3. Для каждого луча:
  - а. Найти ближайшее к центру  $rect(l)$  пересечение луча с границей на  $Canny\_I(i, j)$  или с границей  $rect(l)$ . Отметить полученную точку как границу объекта.



**Рис. 6.** Функция плотности изображения для одного из столбцов изображения, ее среднее значение, положение верхней и нижней границ слоев кортекса

На рис. 6 видно, что границы получаются рваными. Для того, чтобы получить сглаженную границу клетки, применяется операция

математической морфологии «открытие» с радиусом инструмента равным 5. В результате получаем клетку с гладким контуром (рис. 6, правая колонка).



**Рис. 7.** Примеры определения границы клеток (слева направо): исходное изображение клеток; найденные границы; регион, заполненный по найденным границам; заполненный регион после применения операции морфологического открытия ( $r=5$ )

**Классификация нейронов.** Мы исследуем формы наших объектов по 11 параметрам формы и по гистограмме (для изображения в оттенках серого). Для вычисления коэффициента схожести мы используем следующую формулу:

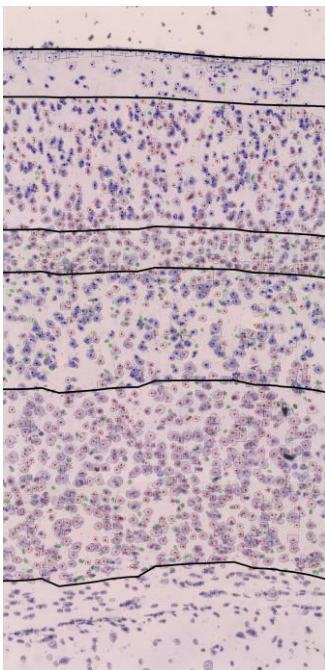
$$similarity(j) = \alpha \sum_{k=0}^{10} coef(k) * \min \left( \frac{model\_shape(j,k)}{object\_shape(k)}, \frac{object\_shape(k)}{model\_shape(j,k)} \right) + \beta \left( 1 - \frac{\sum_{k=0}^{255} |model\_hist(j,k) - object\_hist(k)|}{\sum_{k=0}^{255} |model\_hist(j,k) + object\_hist(k)|} \right),$$

где  $similarity(j)$  – степень схожести объекта с клетками класса  $j$ ;  $model\_shape$  – параметры форм клеток различных классов (см. табл.1);  $object\_shape$  – параметры формы объекта;  $model\_hist$  – гистограммы для клеток различных классов (см. рис.1,2,3);  $object\_hist$  – гистограмма объектов;  $\alpha, \beta, coef(k)$  – настроечные параметры, благодаря которым можно варьировать важность того или иного признака.

Для каждого региона клетки  $reg(i)$  в том случае, если он находится в одном из слоев кортекса, вычисляем:

1. номер слоя, к которому принадлежит  $reg(i)$ .

2. дескрипторы табл.1 и меру похожести (*similarity*) региона клетки с классами клеток данного слоя.



**Рис. 8.** Результат работы алгоритма

Классифицируем регион к тому классу, степень похожести с которым больше.

**Заключение.** Предложен комплексный метод, который начинает решение задачи автоматической сегментации и классификации срезов мозга мыши, окрашенного по Ниссля, с детектирования границ слоев кортекса. При этом детектируются внешние границы слоев и используется статистика соотношения ширины слоев в кортексе (табл. 2).

В части задачи определения границ слоев алгоритм имеет результаты сравнимые с алгоритмами, построенными на основе атласов мозга мыши [5,6] и использовании методов машинного обучения [9].

В классификации клеток мозга выделена фаза их детектирования (определение положения и размера), имеющая принципиальное значение для алгоритмизации метода. Дальнейшая классификация

клеток основана на детектировании их контура, расчете 11 дескрипторов для клетки с заданным контуром и использовании классификационной таблицы значений дескрипторов астроцита и 3 типов нейронов для каждого из слоев кортекса (см. табл. 1), полученной путем статистической обработки данных срезов, размеченных специалистом-морфологом. Результат работы метода показан на рис. 7.

В качестве следующего шага полезно расширить объем экспериментального материала, на котором проверен метод и показанная в работе статистика.

### **Библиографический список**

1. Kolodziejczyk A., Habrat (Ladniak) M., Piorkowski A. Constructing software for analysis of neuron, glial and endothelial cell numbers and density in histological Nissl-stained rodent brain tissue. *Journal of medical informatics & technologies*, Vol. 23, pp. 77-86, 2014.
2. Das S., Keyser J., Choe Y. Random-forest-based automated cell detection in Knife-Edge scanning Microscope rat Nissl data. *Proceedings of the International Joint Conference On Neural Networks*. 2015. DOI:10.1109/IJCNN.2015.7280852
3. He Y., et al. ICut: An integrative cut algorithm enables accurate segmentation of touching cells. *Scientific Reports* 5(12089), DOI: 10.1038/srep12089, 2015.
4. Inglis A., et al. Automated identification of neurons and their locations. *J. Microsc.*, 2008 June. 230(Pt 3), pp. 339–352., 2008.
5. Allen Brain Atlas. Data Portal, 2004-2006. (<http://mouse.brain-map.org/>)
6. Brain maps, 2005 (<http://brainmaps.org>)
7. Сайт документации библиотеки OpenCV (<http://docs.opencv.org>)
8. Nosova, S., Snopova, L., Turlapov, V.. Automatic detection of neurons, astrocytes, and layers for Nissl staining mouse cortex. *Journal of WSCG*, Vol.25, No.2, pp. 143-150, 2017,
9. Senyukova, O.V., Lukin, A.S. & Vetrov, D.P. Automated atlas-based segmentation of NISSL-stained mouse brain sections using supervised learning. *Programming and Computer Software*, Vol. 37, No. 5, pp.245–251, 2011.

## METADATA

**Title:** Comprehensive method for classification of layers and Nissl-stained cells of mice brain cortex on the basis of layered statistics of cells descriptors.

**Authors:** S.A. Nosova, V.E. Turlapov

**Abstract:** A comprehensive method for automatic detection layers of the cortex and brain cells from images of mouse cortex sections stained according to Nissl is proposed. A table is given linking the values of 11 descriptors of 4 types of brain cells with the number of the cortex layer. Since the reconstruction of the boundaries of layers, the method allows to detect astrocytes and 3 types of neurons. After cell localization, which plays of importante role for algorithmization, the segmentation procedure defines the cell boundary via the Canny method and uses the descriptors' values for the layer.

**Key words:** image processing, optical microscopy, nissl-staining, mouse brain cortex, segmentation, layers by Broadman, classification, neuron, astrocyte, Gauss-filtering, math morphology, Canny method, ray-method.

## МАКРОЭКОНОМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, УЧИТЫВАЮЩАЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКТОР И ВЛОЖЕНИЕ ИНВЕСТИЦИЙ

М.Н. Павлова<sup>1</sup>, Т.А. Бедная<sup>1</sup>, Е.В. Назарова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Политехнический институт (филиал) ДГТУ в г. Таганроге, Россия

<sup>2</sup> Азово-Черноморский инженерный институт-филиал ФГБОУ ВО Донской ГАУ в г. Зернограде, Россия

**Аннотация.** В статье рассматривается нелинейная балансовая модель, учитывающая утилизацию, переработку вредных отходов, а также вложение инвестиций. Для модели, которая описывается системой дифференциальных уравнений, устанавливаются условия, при которых она имеет единственное решение. Полученное решение должно быть неотрицательное, притом, что исходные данные могут принимать отрицательные значения.

**Ключевые слова:** выделение отходов, переработка отходов, монотонные операторы, нелинейная модель, пространство конусов, условие Липшица.

Макроэкономические модели описывают экономику как единое целое, связывая между собой укрупненные материальные и финансовые показатели: потребление, инвестиции, занятость и др. [1-2]

В процессе борьбы с загрязнением внешней среды часть вредных отходов может подвергаться утилизации и переработке. В итоге из вредных отходов за счет соответствующих технологических решений могут выделяться полезные ингредиенты. С усилением требований на ограничение выбросов вредных отходов переработка отходов становится актуальной и, соответственно, это влечет увеличение вложений инвестиции в их переработку.

Предложенная в статье модель, учитывает эти факторы.

Как правило, производственный цикл равен году, поэтому традиционно итоги хозяйственной деятельности подводят за год. Поэтому модель, учитывающая утилизацию, переработку, а также вложение инвестиций можно представить следующим образом:

$$\begin{cases} x_{t+h} = A_{11}x_{t+h} + (A_{12}^{(1)} + A_{12}^{(2)})y_{t+h} + B_{11}\frac{x_{t+h} - x_t}{h} + (B_{12}^{(1)} + B_{12}^{(2)})\frac{y_{t+h} - y_t}{h} + f_{1,t+h} \\ y_{t+h} = A_{21}x_{t+h} + A_{22}y_{t+h} + B_{21}\frac{x_{t+h} - x_t}{h} + B_{11}\frac{y_{t+h} - y_t}{h} - f_{2,t+h} \end{cases} \quad (1)$$

где  $h$  – период отчетного времени;  $x_{t+h}$  – вектор валового выпуска полезного продукта, достигаемый к моменту времени  $t+h$ ;  $y_{t+h}$  – вектор вредных отходов в окружающей среде, возникающих в процессе производства и подлежащих уничтожению в момент времени  $t+h$ ;  $f_{1,t+h}$  – вектор чистого выпуска полезного продукта в момент времени

$t+h$ ;  $f_{2,t+h}$  – вектор остаточного уровня вредных отходов в момент времени  $t+h$ ;  $A_{11}$  –  $(n \times n)$  технологическая матрица;  $A_{12}^{(1)}$  – такая  $(n \times m)$  матрица, что  $A_{12}^{(1)}y$  – вектор полезного продукта, возникающий при переработке вредных отходов в объеме вектора  $y$ ;  $A_{12}^{(2)}y$  – вектор полезных продуктов, затрачиваемых на переработку вектора  $y$  вредных отходов (утилизация отходов);  $A_{21}$  – такая  $(m \times n)$  матрица, что  $A_{21}x$  – вектор вредных отходов, создаваемых при выпуске полезного продукта в объеме вектора  $x$ ;  $A_{22}$  – такая  $(m \times m)$  матрица, что при уничтожении вектора  $y$  вредных отходов в окружающую среду выделяется вредных отходов в объеме вектора  $A_{22}y$ ;  $B_{11}$  – матрица, характеризующая инвестиции части созданного в момент времени  $t$   $i$ -го продукта на создание дополнительного резерва производства для выпуска продукции в момент времени  $t+h$ ;  $B_{12}^{(1)}$  – матрица инвестиций, идущих на подавление вредных отходов, возникающих при создании дополнительного резерва производства;  $B_{12}^{(2)}$  – вектор инвестиций, высвобождаемых за счет утилизации вредных отходов.  $B_{21}$  – матрица, характеризующая количество выделяемых единиц вредных отходов при увеличении производства полезного продукта на единицу за промежуток времени  $h$ ;

$B_{22}$  – матрица, характеризующая количество выделяемых вредных отходов, при подавлении вредных отходов, выделяющихся при увеличении годового производства продукта  $x$  на единицу.

Исходя из жизненного опыта и особенностей технологических процессов, значительно удобнее считать, что время непрерывно. Осуществив переход от модели с дискретным временем к модели с непрерывным временем. Уменьшая, насколько возможно, величину отрезка времени  $h$ , получим

$$\frac{x_{t+h} - x_t}{h} \approx \lim_{h \rightarrow 0} \frac{x_{t+h} - x_t}{h} \quad \text{и} \quad \frac{y_{t+h} - y_t}{h} \approx \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y_{t+h} - y_t}{h},$$

т.е. в модели (1) в качестве  $\frac{x_{t+h} - x_t}{h}$  и  $\frac{y_{t+h} - y_t}{h}$  можно рассматривать первые производные непрерывных функций  $x(t)$  и  $y(t)$  соответственно. Возникающей при этом погрешностью можно пренебречь. Тогда модель (1) примет вид:



$$\begin{cases} x(t) = A_{11}x(t) + (A_{12}^{(1)} + A_{12}^{(2)})y(t) + B_{11}x(t) + (B_{12}^{(1)} + B_{12}^{(2)})x(t) + f_1(t) \\ y(t) = A_{21}x(t) + A_{22}y(t) + B_{21}x(t) + B_{11}x(t) - f_2(t) \end{cases} \quad (2)$$

$$x(t) \geq 0, y(t) \geq 0, x(t) \geq 0, y(t) \geq 0, t \in [0, h].$$

$$\text{Обозначим: } z = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}; \quad \mathcal{X} = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}; \quad A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12}^{(1)} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & A_{12}^{(2)} \\ 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12}^{(1)} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & B_{12}^{(2)} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad f = \begin{pmatrix} f_1(t) \\ -f_2(t) \end{pmatrix}.$$

В этом случае, система (2) переписывается следующим образом:

$$z = Az + B\mathcal{X} + f$$

Выразим из операторного уравнения  $z$ . Если существует обратная матрица  $(E - A)^{-1}$ , то

$$z = (E - A)^{-1} \cdot B\mathcal{X} + (E - A)^{-1} \cdot f$$

$$\text{или } z = C\mathcal{X} + g, \text{ где } C = (E - A)^{-1} \cdot B, \quad g = (E - A)^{-1} \cdot f$$

Модель (2) перепишем в виде [1]:

$$\begin{cases} x(t) = \frac{d}{dt} C_{11}x(t) + \frac{d}{dt} C_{12}^{(1)} y(t) - \frac{d}{dt} C_{12}^{(2)} y(t) + g_1(t) \\ y(t) = \frac{d}{dt} C_{21}x(t) + \frac{d}{dt} C_{22} y(t) - g_2(t) \end{cases}$$

$$\text{или при } C_{ij}(x) = \frac{d}{dt} C_{ij} x(t) \text{ и } C_{ij}(y) = \frac{d}{dt} C_{ij} y(t), \quad i, j = 1, 2$$

$$\begin{cases} x = C_{11}(x) + C_{12}^{(1)}(y) - C_{12}^{(2)}(y) + f_1 \\ y = C_{21}(x) + C_{22}(y) - f_2 \end{cases}$$

(3)

где  $C_{ij}(x)$ ,  $C_{ij}(y)$ ,  $i, j = 1, 2$  – монотонные операторы.

Проведем исследование полученной модели.

Определим функции  $\overline{x(t)}$ ,  $\overline{y(t)}$  – как убывающие функции, ограниченные сверху,  $\underline{x(t)}$ ,  $\underline{y(t)}$  – возрастающие функции, ограниченные с низу и таких, что

$$u_1 \leq \overline{x(t)}, \quad v_1 \leq \overline{y(t)}, \quad \underline{x(t)} \leq u_2, \quad \underline{y(t)} \leq v_2 \quad (4)$$

Поэтому при наличии одного из дополнительных условий: конус  $K$  нормальный, операторы  $C_{ij}$  вполне непрерывны, каждая из этих функций имеет соответствующий предел  $\underline{x}$ ,  $\underline{y}$ ,  $\overline{x}$ ,  $\overline{y}$ .

Пусть операторы  $C_{ij}$  удовлетворяют условиям Липшица:

$$\|C_{ij}(u) - C_{ij}(v)\| \leq q_{ij} \|u - v\|, \quad i, j = 1, 2.$$

где  $q_{ij}$  - константа Липшица, а так же существуют элементы  $u_1, u_2, v_1, v_2$ , удовлетворяющие условиям:  $\theta \leq u_1 \leq u_2, \quad \theta \leq v_1 \leq v_2$  и

$$\begin{cases} u_1 \leq C_{11}(u_1) + C_{12}^{(1)}(v_1) - C_{12}^{(2)}(v_2) + f_1 \\ y \leq C_{21}(u_1) + C_{22}(v_1) - f_2 \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} u_2 \geq C_{11}(u_2) + C_{12}^{(1)}(v_2) - C_{12}^{(2)}(v_1) + f_1 \\ y \geq C_{21}(u_2) + C_{22}(v_2) - f_2 \end{cases}, \quad (6)$$

то существует единственное решение модели (3), причем  $u_1 \leq x^* \leq u_2, v_1 \leq y^* \leq v_2$

Рассмотрим в соответствии с (3) и (4) системы:

$$\begin{cases} \underline{x} = C_{11}(\underline{x}) + C_{12}^{(1)}(\underline{y}) - C_{12}^{(2)}(\bar{y}) + f_1 \\ \underline{y} = C_{21}(\underline{x}) + C_{22}(\underline{y}) - f_2 \end{cases}, \quad (7)$$

$$\begin{cases} \bar{x} = C_{11}(\bar{x}) + C_{12}^{(1)}(\bar{y}) - C_{12}^{(2)}(\underline{y}) + f_1 \\ \bar{y} = C_{21}(\bar{x}) + C_{22}(\bar{y}) - f_2 \end{cases}. \quad (8)$$

При выполнении (4), (5), (6) имеем

$$\begin{cases} \bar{x} = C_{11}(\bar{x}) + C_{12}^{(1)}(\bar{y}) - C_{12}^{(2)}(\underline{y}) + f_1 \leq C_{11}(u_2) + C_{12}^{(1)}(v_2) - C_{12}^{(2)}(v_1) + f_1 \leq u_2 \\ \bar{y} = C_{21}(\bar{x}) + C_{22}(\bar{y}) - f_2 \leq C_{21}(u_2) + C_{22}(v_2) - f_2 \leq v_2 \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \underline{x} = C_{11}(\underline{x}) + C_{12}^{(1)}(\underline{y}) - C_{12}^{(2)}(\bar{y}) + f_1 \geq C_{11}(u_1) + C_{12}^{(1)}(v_1) - C_{12}^{(2)}(v_2) + f_1 \geq u_1 \\ \underline{y} = C_{21}(\underline{x}) + C_{22}(\underline{y}) - f_2 \geq C_{21}(u_2) + C_{22}(v_2) - f_2 \geq v_1 \end{cases} \quad (10)$$

итак,  $u_1 \leq \bar{x}(t), \quad v_1 \leq \bar{y}(t), \quad \underline{x}(t) \leq u_2, \quad \underline{y}(t) \leq v_2$ .

Проведем дополнительные исследования чтобы доказать разрешимость нелинейной системы.

Рассмотрим сначала первые уравнения систем (9) и (10)

$$\begin{aligned} \|\underline{x} - \bar{x}\| &= \|C_{11}(\underline{x}) - C_{11}(\bar{x}) + C_{12}^{(1)}(\underline{y}) - C_{12}^{(1)}(\bar{y}) - C_{12}^{(2)}(\bar{y}) + C_{12}^{(2)}(\underline{y})\| \leq \\ &\leq \|C_{11}(\underline{x}) - C_{11}(\bar{x})\| + \|C_{12}^{(1)}(\underline{y}) - C_{12}^{(1)}(\bar{y})\| + \|C_{12}^{(2)}(\underline{y}) - C_{12}^{(2)}(\bar{y})\| \leq \quad, \quad (11) \\ &\leq q_{11} \|\underline{x} - \bar{x}\| + q_{12}^{(1)} \|\underline{y} - \bar{y}\| + q_{12}^{(2)} \|\underline{y} - \bar{y}\| = q_{11} \|\underline{x} - \bar{x}\| + q_{12} \|\underline{y} - \bar{y}\| \end{aligned}$$

где  $q_{12} = q_{12}^{(1)} + q_{12}^{(2)}$ .

Аналогично поступаем со вторыми уравнениями систем (9) и (10)

$$\begin{aligned} \|\underline{x} - \bar{x}\| &\leq q_{11}\|\underline{x} - \bar{x}\| + q_{12}\|\underline{y} - \bar{y}\| \\ \|\underline{y} - \bar{y}\| &\leq q_{21}\|\underline{x} - \bar{x}\| + q_{22}\|\underline{y} - \bar{y}\| \end{aligned} \quad (12)$$

Пусть  $\bar{a} = \langle \|\underline{x} - \bar{x}\|, \|\underline{y} - \bar{y}\| \rangle$ , где  $\langle \|\underline{x} - \bar{x}\|, \|\underline{y} - \bar{y}\| \rangle = \max\{\|\underline{x} - \bar{x}\|, \|\underline{y} - \bar{y}\|\}$  тогда система неравенств (12) запишется в виде:  $\bar{a} \leq Q \cdot \bar{a}$ ,  $\bar{a} \geq \theta$ .

Пусть для некоторого элемента  $x_0 \in E$ ,  $x_0 = u - v$ ,  $u, v \in K$ ,  $-x_0 \notin K$  выполняется неравенство  $Ax_0 \geq \gamma x_0$ , тогда  $\rho(A) \geq \gamma$  [2]. Тогда

$$r(Q) \geq 1 \quad (13)$$

$$Q = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12}^{(1)} + q_{12}^{(2)} \\ q_{21} & q_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{pmatrix} \quad (14)$$

Из неравенства (13) следует (теорема об оценке снизу спектрального радиуса положительного оператора), что в случае, когда  $\bar{a} \neq \theta$ ,  $r(Q) \geq 1$ , где  $r(Q)$  – спектральный радиус матрицы  $Q$ , это вытекает из теоремы об оценке спектрального радиуса положительного оператора по его поведению на фиксированном ненулевом элементе конуса  $K$ . Следовательно, если  $r(Q) < 1$ , то  $\bar{a} = \theta$ , а это значит, что  $\underline{x} = \bar{x}$ ,  $\underline{y} = \bar{y}$ , т.е.  $u_1 \leq x \leq u_2$ ,  $v_1 \leq y \leq v_2$ .

Докажем единственность.

Доказательство будем вести от противного.

Пусть система (3) имеет два решения  $(x_1, y_1)$  и  $(x_2, y_2)$ . Тогда они удовлетворяют системе (3)

$$\begin{cases} x_1 = C_{11}(x_1) + C_{12}^{(1)}(y_1) - C_{12}^{(2)}(y_1) + f_1 \\ y = C_{21}(x_1) + C_{22}(y_1) - f_2 \end{cases} \quad (15)$$

$$\begin{cases} x_2 = C_{11}(x_2) + C_{12}^{(1)}(y_2) - C_{12}^{(2)}(y_2) + f_1 \\ y = C_{21}(x_2) + C_{22}(y_2) - f_2 \end{cases} \quad (16)$$

Из (15) и (16) путем почленного вычитания, учитывая условия Липшица, получим следующие неравенства:

Рассмотрим сначала первые уравнения систем (15) и (16)

$$\begin{aligned} |x_1 - x_2| &= |C_{11}(x_1) - C_{11}(x_2) + C_{12}^{(1)}(y_1) - C_{12}^{(1)}(y_2) - C_{12}^{(2)}(y_1) + C_{12}^{(2)}(y_2)| \leq \\ &\leq |C_{11}(x_1) - C_{11}(x_2)| + |C_{12}^{(1)}(y_1) - C_{12}^{(1)}(y_2)| - |C_{12}^{(2)}(y_1) - C_{12}^{(2)}(y_2)| \leq \\ &\leq y_{11}|x_1 - x_2| + y_{12}^{(1)}|y_1 - y_2| + y_{12}^{(2)}|y_1 - y_2| = y_{11}|x_1 - x_2| + y_{12}|y_1 - y_2| \end{aligned}$$

где  $y_{12} = y_{12}^{(1)} + y_{12}^{(2)}$ .

Аналогично для вторых уравнений системы, т.е.

$$\begin{aligned} |x_1 - x_2| &\leq y_{11}|x_1 - x_2| + y_{12}|y_1 - y_2| \\ |y_1 - y_2| &\leq y_{11}|x_1 - x_2| + y_{12}|y_1 - y_2| \end{aligned} \quad (17)$$

Пусть вектор  $\bar{a} = (|x_1 - x_2|, |y_1 - y_2|)$ , тогда неравенства запишутся  $\bar{a} \leq Q \cdot \bar{a}$ ,  $\bar{a} \geq \theta$ , следовательно,

$$r(Q) \geq 1 \quad (18)$$

$$Q = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12}^{(1)} + q_{12}^{(2)} \\ q_{21} & q_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Из неравенства (18) следует (теорема об оценке снизу спектрального радиуса положительного оператора), что в случае, когда  $\bar{a} \neq \theta$ ,  $r(Q) \geq 1$ , где  $r(Q)$  – спектральный радиус матрицы  $Q$ , это вытекает из теоремы об оценке спектрального радиуса положительного оператора по его поведению на фиксированном ненулевом элементе конуса  $K$ . Следовательно, если  $r(Q) < 1$ , то  $\bar{a} = \theta$ , а это значит, что  $x_1 = x_2$ ,  $y_1 = y_2$ , т. е. система (3) имеет единственное решение.

Таким образом, найдены условия, при которых при наличии отрицательных параметров в системе дифференциальных уравнений, описывающих эколого-экономическую модель, которая учитывает вложенные инвестиции, система имеет неотрицательные решения, а также даны оценки решения. Балансовый метод позволяет анализировать многосторонние внутренние связи [6-9], существующие между отдельными отраслями народного хозяйства, и обеспечивать согласованное развитие различных частей национальной или региональной экономики, при этом, динамика инвестиций определяет динамику величин основного капитала, что, в свою очередь, является важнейшим фактором изменения объема выпуска.

### Библиографический список

1. Karlin S. Positive operators // T. Math. Mech. – 1995. – №8. – P. 907–938.
2. Торопцев Е.Л. Моделирование процессов экономической динамики макросистем. Монография. – СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского государственного университета экономики и финансов, 2001. – 135 с.
3. Павлова М.Н., Е.М. Петлина Е.М. Динамические балансовые модели с непрерывным временем с учетом экологического фактора и

вложения инвестиций в развитие производства. Монография. - Ростов-на-Дону - ДГТУ, 2012.-100 с.

4. Павлова М.Н., Борисова А.А., Черникова Н.В. Нелинейная балансовая модель, учитывающая переработку вредных отходов. Научно-технический журнал МОНИТОРИНГ. Наука и Технологии (рецензируемый, реферируемый, включен в перечень ВАК) - №4(29)-2016.

5. Стеценко В.Я., Галкина И.А. Элементы теории полуупорядоченных пространств. Приближенное решение операторных уравнений. Учебное пособие. – Ставрополь. - СГУ,1998.-168 с.

6. Sukhinov A. I., Sidoryakina V. V., Sukhinov A.A. Sufficient convergence conditions for positive solutions of linearized two-dimensional sediment transport problem // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 21-35.

7. Petrov Igor B. Application of grid-characteristic method for numerical solution of deformable solid mechanics dynamical problems // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 1-20.7.

8. Nikitina A.V., Semenyakina A.A. Mathematical modeling of eutrophication processes in Azov Sea on supercomputers // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp 82-101.

9. Chistyakov A.E., Protsenko E.A., Timofeeva E.F. Mathematical modeling of oscillatory processes with a free boundary // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 102-112.

## METADATA

**Title:** Macroeconomic model considering the ecological factor and investments.

**Authors:** M.N. Pavlova, T.A. Bednaya, E.V. Nazarova

**Abstract:** The article covers the nonlinear balance model taking into account recycling, recycling hazardous waste, and investments. For the model, described by a system of differential equations, the conditions are defined when the system of differential equations has only one solution. The obtained solution must be non-negative though the initial data may be negative.

**Key words:** waste production, waste recycling, monotone operators, nonlinear model, cone space, the Lipschitz condition.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЛАПСА КАК СЦЕНАРИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНОЙ ДИНАМИКИ ПРОМЫСЛОВЫХ ПОПУЛЯЦИЙ\*

А.Ю. Переварюха

Санкт-Петербургский институт информатики и автоматизации РАН,  
г. Санкт-Петербург, Россия

**Аннотация.** Режим перехода популяций в интервалы экстремальных значений численности представляет актуальную проблему и плохо описывается традиционными в математической биологии системами дифференциальных уравнений трофических связей. Предложен метод формирования непрерывно-дискретных вычислительных структур, учитывающий пороговые эффекты и факторы регуляции эффективности воспроизводства рыб только в узком диапазоне состояния запаса. Триггерный функционал позволит внести локальное стохастическое возмущение траектории. Развитие экстремальных ситуаций имеет вариативный и эколого-специфический характер. Рассмотрен сценарный подход к анализу экологической ситуации с организацией серий управляемых имитационных вычислительных экспериментов. Модель резкой деградации биоресурсов рассмотрена на примере коллапса трески Северной Атлантики и сопоставлена с ранее изученной нами динамикой истощения осетровых рыб Каспийского моря. Коллапс реализуется в форме граничного кризиса интервального притягивающего множества, где граница области притяжения аттрактора, существующего для диапазона низкой численности, незначительно удалена от критического диапазона.

**Ключевые слова:** непрерывно-дискретные вычислительные структуры, репродуктивный потенциал, истощение биоресурсов, гидрология, регуляция воспроизводства.

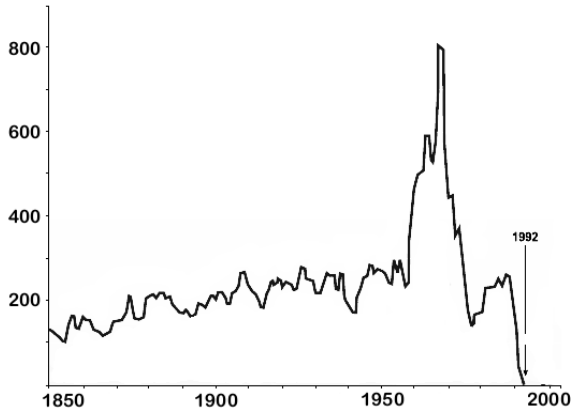
**Введение.** В современной англоязычной научной литературе для непредвиденных последствий чрезмерной эксплуатации используется заимствованный из астрофизики термин «коллапс», отличающийся от явлений перелова (overfishing) или истощения (depletion). Коллапс может угрожать ранее многочисленным промысловым популяциям крупных морских рыб, способным, казалось бы, десятилетиями выдерживать значительное изъятие. Среди разнородной ретроспективной информации о причинах остановки промысла можно выделить характерные особенности развития событий, интерпретируемые в терминах динамических систем.

**Проблема потери промысла трески.** В 1992 г. произошел самый масштабный по последствиям коллапс из состояния, оцененного как благополучное – прекращен промысел атлантической трески *Gadus*

---

\* Исследования проведены в рамках проекта РФФИ: №15-07-01230.

*morhua* побережья Ньюфаунленда (рис. 1). Промысел трески показал максимальные результаты на рубеже 1970-х гг., но далее не удержался на среднемноголетнем уровне. Как мы видим, неотвратимое истощение последовало не сразу вслед за годами рекордных уловов. Первичное падение приостановилось. Перед крахом наблюдалось десятилетие (1981-1990) не обильных, но приемлемых колеблющихся объемов вылова и оптимистичных ожиданий по его дальнейшему наращиванию.



**Рис. 1.** Коллапс атлантической трески *Gadus morhua* у побережья Канады

В [1] развитие событий объяснялось тем, что естественный тренд снижения численности трески мог совпасть с увеличением реальной промысловой смертности из-за системной переоценки ее запасов. В результате введенный изначально 2-летний мораторий на вылов превратился в 23-летнее вынужденное прекращение промысла трески. Проблема коллапса не исчерпывается своевременным выявлением его признаков. За развитием событий скрыты нетривиальные особенности репродуктивного процесса. Популяция после значительного перелома восстанавливается не так быстро, как должно следовать из анализа прежней промысловой статистики.

**Непрерывно-дискретная модель воспроизводства.** Будем разрабатывать модель пополнения с использованием организации непрерывно-событийной вычислительной. Учтем, что кривая воспроизводства совсем не обязательно должна быть куполообразной унимодальной с единственным экстремумом функции, что отметил Рикер [2]. Дополнительно примем, что реальная зависимость способна масштабироваться вдоль оси ординат под действием внешних факторов.

У рыб выражена стадийность развития раннего онтогенеза. Факторы смертности должны различаться по стадиям, при этом момент достижения перехода личика—молодь может регулироваться вспомогательным показателем развития  $w(t)$ .

Опишем убыль начальной численности поколения  $N(0)$  от момента вылупления из икринок дифференциальным уравнением на промежутке времени  $t \in [0 \dots \tau, \tau_1 \dots T]$ . Учтем два фактора смертности и изменение их действия по ходу прохождения стадий развития особей, а также реакцию хищников на обилие жертв на второй стадии:

$$\frac{dN}{dt} = \begin{cases} -(\alpha N(t) + U[S]\beta)N(t), & t < \tau \\ -(\alpha_1 N(\tau) / w(\tau) + \beta)N(t), & w(t) < w_d(\tau_1) \\ -\beta_1 N(\tau_1)N(t), & \tau_1 < t < T, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\alpha$  – коэффициент зависящей от плотности компенсационной смертности;  $\beta$  – коэффициент нейтральной убыли. От репродуктивного потенциала разумно перейти к естественному показателю средней плодовитости  $\lambda$ . Учет влияния кормовой базы производителей, лучше проводить при корректировке  $\lambda$ . Начальные условия (1) с дважды переопределяемой правой частью таковы:  $N(0) = \lambda S$ ;  $\tau$  – длительность первой стадии с эндогенным питанием для рыб, которая обычно постоянна;  $\tau_1$  зависима от  $w_d$  – условного уровня развития, при достижении которого ослабляется действие факторов смертности, что объясняется разными условиями обитания молоди до и после начала самостоятельной морской миграции. Вспомогательное уравнение –  $w'(t) = m / (N^{2/3}(t) + \zeta)$ . Форму правой части при  $t < \tau$  дополним триггерным функционалом:

$$U(S) = 1 + \exp(-cS^2), \quad (2)$$

где  $c < 1$  определяет степень выраженности фактора, называемого в экологии эффектом Олли. Функционал (2) быстро стремится к  $\lim_{S \rightarrow S^*} U(S) = 1$  и не влияет на расчеты при оптимальном состоянии запаса. Область значений (2) ограничена  $-E(U) = [2, 1]$ . Интервал ювенальной уязвимости  $[0, T]$  разделен на тройку кадров модельного времени. При смене смежных кадров происходит реинициализация начальных условий.

**Стохастическое дополнение.** Существует возможность сохранения популяции даже при наличии единичных особей, что определяется вероятностными причинами. Известен пример восстановления промысла сига *Coregonus clupeaformis* оз. Онтарио после



перелова. В модели функционал (2) можно расширить за счет дополнения случайной величиной  $\gamma$  с показательным законом распределения:  $U^0 = U(N(0)) \times \gamma$  для локального возмущения в уравнении убыли численности первой стадии развития молоди. Метод включения  $U^0$  позволит получить стохастическое поведение траектории в узком диапазоне состояния запаса, когда успех воспроизводства при малых  $S$ , под которым понимаем событие  $\psi(S) > S$ , имеет вероятностный характер. Данная модификация актуальна для видов, образующих в ареале некоторое количество относительно репродуктивно изолированных локальных групп и с выраженной внутри видовой дифференциацией, столь характерной для пресноводных сиговых рыб. Депрессии популяции сиговых могут быть связаны с инвазиями конкурирующих видов-планктонофагов, таких как ряпушка.

**Формирование интервального аттрактора.** В инструментальной среде алгоритмически формируется непрерывно-событийная переопределяемая вычислительная структура из трех форм правой части уравнения убыли и условий завершения их активности. Последовательность численных решений задач Коши для допустимых значений  $S \in Z^+$  определит итоговую зависимость (рис. 2).

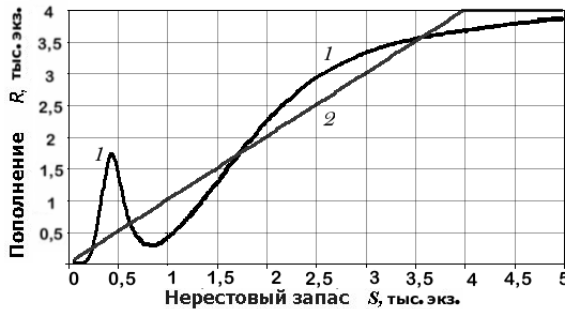


Рис. 2. График модели пополнения на основе (1)

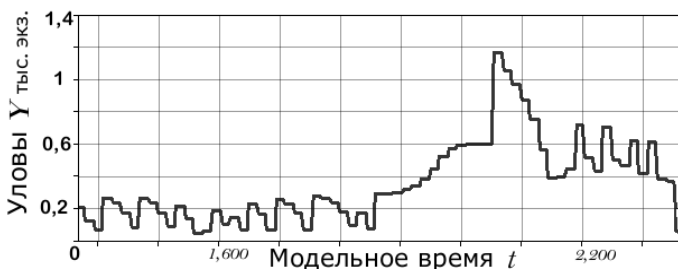
Из модели (1) дополненной функционалом (2) мы получили зависимость, где диапазоны превышения  $\psi(S) > S$  чередуется с состояниями, в которых имеющийся нерестовый запас восполняется не полностью. В новой модели не три, а четыре нетривиальные стационарные точки  $\psi(R_i^*) = R_i^*$ . Устойчиво наибольшее из равновесий  $R_1^*$ , как и т  $\psi(0) = 0$ . Три первых пересечения с биссектрисой  $R_1^* < R_2^* < R_3^*$ , в

точках оказываются неустойчивы, в вычислительных моделях для установления устойчивости точек используется вычисление  $f(f(x))$ .

Так как в окрестности максимума модельная кривая немного превосходит третье равновесие  $\psi(R_{\max} \pm \varepsilon) > R_3^*$ , и если исходное состояние популяции  $R_0$  соответствует диапазону  $R_0 \in (R_1^*, R_3^*) \cap \{\psi^{-n}(R_2^*)\}$ , то через ряд аperiodических флуктуаций достигается состояние высокой стабильной численности  $R_4^*$ . Гипотетический вариант устойчивости  $R_1^*$  или  $R_2^*$  не может объяснить самостоятельного восстановления популяций после не критического перелома. Аperiodическое движение чувствительно к выбору начального значения  $R_0$ , это означает принципиальную невозможность делать прогнозы при подобном характере популяционной динамики [3].

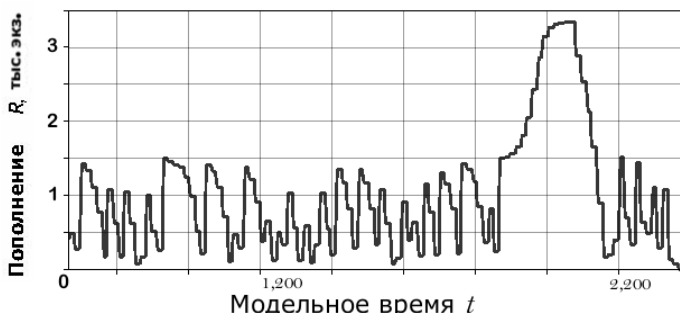
Наблюдаемый в вычислительных экспериментах аperiodический режим вызван локально-несвязным характером области притяжения аттрактора  $R_4^*$ , так как область не включает множество не притягивающихся к аттрактору прообразов двух неустойчивых точек:  $\{\psi^{-n}(R_2^*)\} \cup \{\psi^{-n}(R_3^*)\}$ . Точка  $R_1^*$  – неустойчивое критическое равновесие, если  $R_0 < R_1^* - \varepsilon$  то реализуется необратимая деградация  $\psi^n(R_0) \rightarrow 0$ .

**Вычислительный сценарий имитации коллапса.** Пусть популяция после долгой нестабильности восстановилась до своего оптимума, уловы плавно пошли вверх, после чего принимается решение об интенсификации режима промысла, которая к несчастью оказывается чрезмерной. Величина улова  $Y = HR_n$  сначала демонстрирует исторические максимумы, но затем довольно очевидно снижаются, успешно проходят локальный минимум, не попадая сразу в окрестность точки критического состояния. В промысловых прогнозах наверняка учли высокую эффективность воспроизводства в предыдущие годы и что уловы после спада немного возвращаются к былым объемам, но такое восстановление будет обманчиво (рис. 3 – временная  $t$ -диаграмма величины уловов, по абсциссам, внутренние представления модельного времени вычислительной среды).



**Рис. 3.** Динамика уловов в сценарии существенного перелова

Численность запаса после интенсификации промысла возвращается в аperiodический малочисленный режим со сжимающейся амплитудой колебаний, но не задерживается там даже в случае запоздалого установления прежней неистощительной доли изъятия. После кратких колебаний следует второе, уже критическое падение (рис 4. – временная  $t$ -диаграмма изменения состояния промысловой популяции при перелове).



**Рис. 4.** Динамика численности при коллапсе запасов по модели (1)

Интересна динамика в вычислительных экспериментах для полученной зависимости при резком повышении доли промыслового изъятия, какое проводится при уже благополучном состоянии запаса  $\bar{\psi}(R_n) \approx R_4^*$ . Задача регулирования вылова – не позволить редуцировать равновесие возмущенной системы  $\bar{\psi}$  выше  $R_3^*$ , сбросив запас в режим неблагоприятных для промысла и непредсказуемых колебаний. Недолгий тренд повышения уловов непосредственно перед коллапсом следует из характера нелинейности модели кривой воспроизводства, связанного с существованием двух уровней численности популяции. Достаточно превышения допустимой доли изъятия на 0,025 для реализации такого

сценария падения. При низкой численности популяция испытывает резкие флуктуации, но существует перспектива восстановления обилия при ослаблении промысла. Эффект граничного кризиса интервального аттрактора описывает явление неожиданного коллапса больших запасов трески, происходящего в два этапа. При граничном кризисе аттрактор соприкасается с границей своей области притяжения, теряет свойство инвариантности  $\bar{\psi}(A) \in A$ , и на его месте появляется непритягивающее хаотического множество [4], где ограниченное время пребывает траектория и далее  $\bar{\psi}^n(R) \rightarrow 0$ . После кризиса, вызванного сдвигом минимума, единственное инвариантное замкнутое притягивающее множество – это точка начала координат.

**Закключение.** Разработанная модель подтверждает, что особые сценарии истощения биоресурсов, названные коллапсом, действительно сложны для прогнозирования по ретроспективным наборам данных о воспроизводстве промысловых популяций. В случае осетровых рыб Каспия стремительная деградация произошла, когда ожидалось увеличение уловов из-за улучшения гидрологической обстановки. При этом важно отметить, что динамика истощения запасов двух близких видов осетровых, осетра и севрюги, качественно различна и не может описываться одним модельным сценарием [5]. Для белуги *Huso huso* не отмечается нелинейных пороговых эффектов. Подобная вариативность сценариев у экологически схожих видов объясняется внутривидовой дифференциацией и различным вкладом в успех нереста репродуктивной изоляции отдельных локальных нерестовых групп.

Анализ сценарных экспериментов показывает, если происходят качественные изменения в механизмах регуляции воспроизводства, то решения по изменению стратегии эксплуатации запаздывают, так же как и прогнозы допустимых уловов делают на основе ретроспективных сведений о предшествующей динамике эксплуатируемой популяции, которая не обязательно сохранится при увеличении изъятия. Каннибализм хищных видов далеко не единственный механизм проявления отрицательной обратной связи в ихтиоценозах, но более прямодействующий, чем конкуренция [6]. Один из вероятных сопутствующих механизмов закрепляется тем, что при сокращении численности доминирующих хищников должна изменяться сложившаяся возрастная структура популяции жертв. Интересно расширение наборов вычислительных сценариев экстремальных ситуаций в сопоставлении с рядом других нетривиальных примеров популяционной динамики, которые могут происходить в форме серии пиков численности.

### Библиографический список

1. Myers R.A. Why do fish stocks collapse? The example of cod in Atlantic Canada // *Ecol. Appl.* 1997. Vol. 7. P. 91-106.
2. Ricker W.E. Stock and recruitment // *J. Fish. Res. Board Can.* 1954. Vol. 11. P. 559–623.
3. Feigenbaum M. Universal behavior in nonlinear systems // *Physica D.* 1983. Vol. 7. № 1. P. 16–39.
4. Guckenheimer J. Sensitive dependence on initial conditions for one dimensional Maps // *Comm. Mathem. Physics.* 1979. Vol. 70. P. 133–160.
5. Perevaryukha A.Y. Cyclic and unstable chaotic dynamics in models of two populations of sturgeon fish // *Numerical Analysis and Applications.* 2012. Vol. 5. № 3. P. 254-264.
6. Pearl R. The biology of population growth // *Birth Control Rev.* 1927. Vol. 11. P. 236-263.

### METADATA

**Title:** Modeling of collapse as scenario of extreme dynamics of fishing populations.

**Authors:** A.Yu. Perevaryukha

**Abstract:** The regime of population transfer to the intervals of extreme values of numbers represents an actual problem and is poorly reflected by systems of differential equations that are traditional for mathematical biology for describing trophic relations. We propose a method for the formation of continuously discrete computing structures that takes into account threshold effects and even factors of the regulation of the efficiency of reproduction of fish, but only in a narrow range of the state of the stock. The trigger functional allows us to introduce a local stochastic perturbation of the trajectory. The development of extreme situations has a varied and eco-specific nature. The report considered a scenario approach to the analysis of the ecological situation with the organization of a series of controlled simulation experiments. The model of sharp degradation of bioresources is considered on the example of the collapse of the cod in the North Atlantic in 1992 and compared with the dynamics of depleted sturgeons of the Caspian Sea, which we researched earlier. The "collapse" phenomena is realized in the form of a boundary crisis of an interval attracting set, where the boundary of the attractive region of the attractor existing for the low-abundance range is slightly removed from the critical range.

**Key words:** continuous-discrete computational structures, reproductive potential, depletion of biological resources, hydrology, regulation of reproduction.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ КОМПОЗИТНОГО ТРУБОПРОВОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЕЙСМИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ

*И.Б. Петров, В.И. Голубев, К.А. Беклемышева, А.В. Васюков*  
Московский физико-технический институт,  
г. Долгопрудный, Россия

**Аннотация.** *Рассматривается задача численного моделирования процесса инициации сейсмической активности на шельфе и её разрушающего воздействия на композитный трубопровод, проложенный по морскому дну. Для описания динамического поведения геологического массива используются определяющие системы уравнений теории упругости и акустики с явным выделением всех геологических слоёв. Композиционный материал трубопровода описывается в рамках ортотропной анизотропной модели. Предложен алгоритм, позволяющий для заданного уровня сейсмической активности и прочностных характеристик композита оценить объём и характер разрушений трубопровода. Отличительной особенностью разработанного подхода является полноволновой расчёт распространения сейсмических волн от очага землетрясения к дневной поверхности. Для численного расчёта используется сеточно-характеристический метод на гексаэдральных и тетраэдральных расчётных сетках.*

**Ключевые слова:** *математическое моделирование, сеточно-характеристический метод, землетрясение, сейсмостойкость, композиционный материал, параллельные алгоритмы, разрушение композитов.*

В настоящее время нефть и природный газ являются основными источниками энергии. При этом существенная часть их месторождений расположена на шельфе, что обуславливает сложности с их разведкой и разработкой. Важным вопросом также является транспортировка сырья от устья скважины к месту его накопления, для которой по дну прокладывают многокилометровые трубопроводы. Поскольку прорыв трубопровода под водой неминуемо приведёт к экологической катастрофе и существенным материальным затратам на его устранение, активно развиваются технологии повышения надёжности трубопроводов. При этом одной из существенных угроз является деформация материала трубы из-за сейсмической активности (землетрясения) в регионе.

Сегодня инновационным технологическим решением является создание композиционных труб. При этом изучением процесса разрушения композиционных материалов занимается множество научных коллективов по всему миру. Основные результаты серии международных проектов WWFE (World Wide Failure Exercise), целиком посвященных разработке и сравнению критериев объемного разрушения полимерных композиционных материалов (ПКМ) с армированием длинными волокнами, приведены, например, в [1, 2]. К настоящему моменту было

разработано множество различных критериев разрушения, с той или иной степенью достоверности описывающих натурные эксперименты. К ним относятся критерии Хашина, Пака, Цая-Хилла, Цая-Ву и Друкера-Прагера.

В настоящей работе рассматривается задача распространения сейсмических волн из очага землетрясения в шельфовом регионе и разрушения композиционного трубопровода под их воздействием. Математическая постановка задачи включает в себя систему уравнений теории акустики и линейной упругости с учётом анизотропии материала [3]. Предложен расчётный алгоритм оценки объёма разрушений трубопровода, основанный на последовательном решении двух задач (распространение сейсмической волны от очага землетрясения ко дну и её динамическое воздействие на элемент трубопровода), позволяющий оценить возможность разрушения композиционной трубы при землетрясении заданной интенсивности.

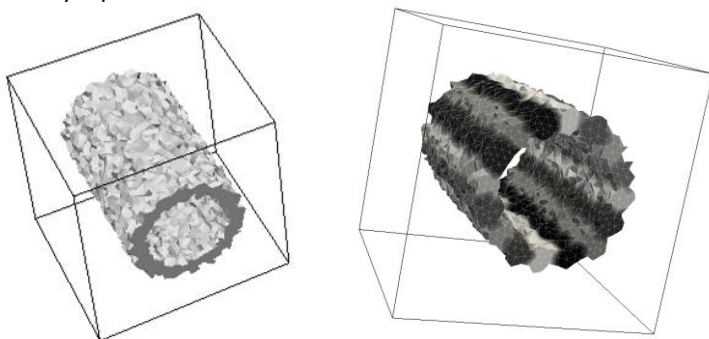
Для описания сейсмических процессов на шельфе изначально строится геологическая многослойная модель, поведение которой описывается системой линейной упругости (геологические породы) и системой акустики (вода), причём на контакте море-морское дно решение этих систем производится совместно. Для численного решения используется сеточно-характеристический метод на гексаэдральных расчётных сетках [4, 5].

Для описания процессов разрушения в композитной трубе используется сеточно-характеристический метод на тетраэдральных сетках для линейно упругого анизотропного материала [6, 7]. Используются критерии разрушения композитов на основе определенного набора параметров материала, доступных для непосредственного измерения: критерии Хашина, Пака, Цая-Хилла, Цая-Ву и Другера-Прагера. Подробное описание этих критериев и их сравнение друг с другом и экспериментом приведено в [8]. Эти критерии используются во многих коммерческих расчётных пакетах.

В работе проводился расчёт распространения сейсмических волн из очага землетрясения в трёхмерной модели многослойной среды, описывающей морской шельф. В расчёт включались следующие слои: водный слой, слой донных осадков, два геологических слоя и кристаллический фундамент. Все характеристики материалов выбирались на основе работы [9]. Вся кубическая расчётная сетка содержала 192 миллиона узлов с шагом 5 метров и покрывала область размерами 4000 x 4000 x 1500 м. Источник землетрясения располагался на глубине 1150 м и представлял собой плоскость разрыва с инверсией скорости в объёме 50 x 50 x 150 м [10]. Параметры модели очага землетрясения

восстанавливались на основе анализа максимальных смещений морского дна в соответствии со шкалой Рихтера [11]. В процессе моделирования снимались значения полного тензора напряжений на уровне морского дна, которые в дальнейшем использовались при расчёте процесса динамической нагрузки композиционной трубы.

Для моделирования разрушения композитной трубы был взят объем грунта вокруг короткого прямого отрезка трубы. Радиус трубы – 25 см, толщина – 6 см. грань куба – 1 м. Ось трубы направлена вдоль оси X, вертикаль – ось Y. Общий вид расчетной области приведен на рис. 1. Для моделирования изогнутого анизотропного материала трубы она была разбита на 16 сегментов, материал каждого из которых (углепластик, свойства материалы приведены в [12]) повернут относительно соседних. Рассматривались два случая – направление волокон вдоль оси X и перпендикулярно ей.



**Рис. 1.** Общий вид расчетной области: слева – общий вид, справа – общий вид с указанием материалов с различными направлениями

Была проведена серия расчётов с возрастающей интенсивностью землетрясения. При силе землетрясения в 1 балл разрушений не наблюдалось, при силе более 3 баллов разрушался весь объем композиционного материала.

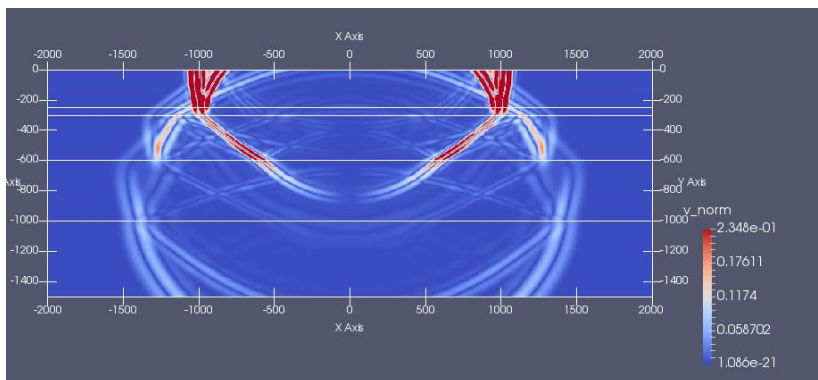
Характерный вид волновой картины при распространении сейсмических волн из очага землетрясения приведен на рис. 2.

Критерий Хашина позволяет анализировать механизмы, по которым произошло разрушения. На рис. 3 приведены области разрушения для различной силы землетрясения и различных механизмов в критерии Хашина, волокна направлены параллельно оси трубы. При силе землетрясения в 2 балла происходят небольшие расслоения в



нижней части трубы. При силе землетрясения в 2.5 балла расслоения происходят по всей стенке трубы, часть матрицы композита растрескивается. При силе землетрясения в 3 балла расслоения и растрескивание матрицы происходят по всему объему, часть волокон в нижней части трубы рвется. Была проведена серия расчётов с изменённой укладкой волокон - перпендикулярно оси трубы. При силе землетрясения в 2 балла происходят существенные расслоения в нижней и верхней частях трубы. При силе землетрясения в 2.5 балла расслоения происходят по всей стенке трубы, часть матрицы композита в нижней части трубы растрескивается. При силе землетрясения в 3 балла расслоения и растрескивание матрицы происходят по всему объему, разрыва волокон не происходит.

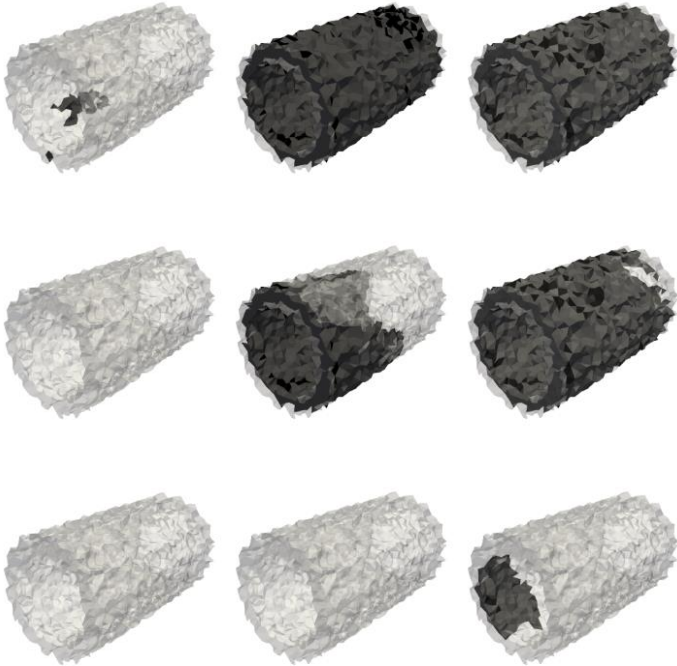
На рис. 4 приведены области разрушения для различной силы землетрясения и различных механизмов в критерии Хашина, волокна направлены перпендикулярно оси трубы. При силе землетрясения 2 балл происходят существенные расслоения в нижней и верхней частях трубы. При силе 2.5 балла расслоения происходят по всей стенке трубы, часть матрицы композита в нижней части трубы растрескивается. При силе 3 балла расслоения и растрескивание матрицы происходят по всему объему, разрыва волокон не происходит.



**Рис. 2.** Характерный вид волновой картины при распространении сейсмических волн из очага землетрясения

Можно видеть, что при изменении направления укладки волокон картина разрушения заметно меняется. При укладке волокон параллельно оси трубы расслоение при слабом землетрясении меньше,

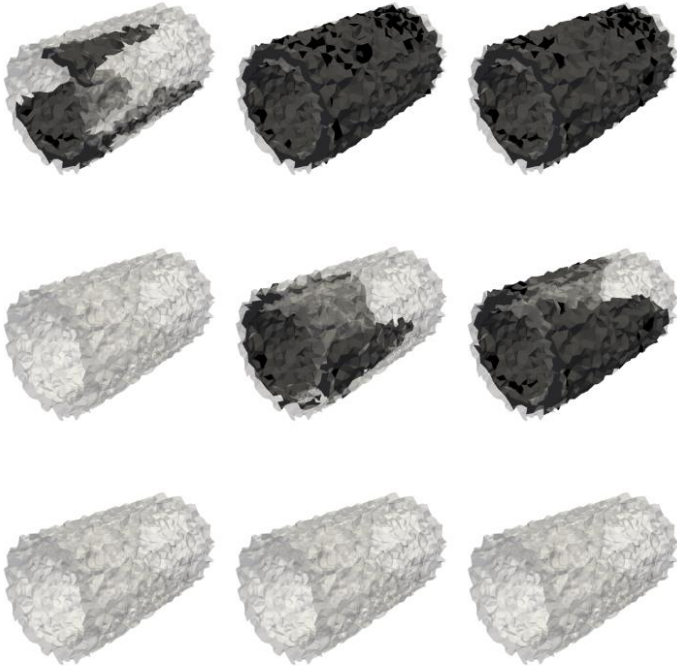
но при сильном землетрясении происходит разрушение волокон, которого нет при укладке волокон перпендикулярно оси.



**Рис. 3.** Области разрушения по критерию Хашина. Сила землетрясения: слева – 2 балла, в середине 2.5 балла, справа – 3 балла. Механизмы разрушения: сверху – расслоение, в середине – растрескивание матрицы, снизу – разрывы волокон. Волокна направлены вдоль оси трубы

Критерий Хашина позволяет проводить подробный анализ разрушения материала – настраивать отклик от области разрушения в соответствии с механизмом разрушения и анализировать остаточную прочность детали. При расчете реальных конструкций применение этого критерия осложняется тем, что его можно применять только для монослоев, но не для осредненного анизотропного материала из нескольких монослоев с различной укладкой. Следовательно, трубу

придется моделировать с точностью до монослоя, что существенно увеличит вычислительную сложность задачи.



**Рис. 4.** Области разрушения по критерию Хашина. Сила землетрясения: слева – 2 балла, в середине 2.5 балла, справа – 3 балла (0.1, 0.5, 1.0). Механизмы разрушения: сверху – расслоение, в середине – растрескивание матрицы, снизу – разрывы волокон. Волокна направлены поперек оси трубы

В работе описан новый подход, позволяющий оценить степень разрушающего воздействия землетрясения с заданной магнитудой на композитный трубопровод путём прямого численного моделирования процесса распространения сейсмических волн от очага к дневной поверхности, учитывающего подробное геологическое строение подстилающего массива. Он основан на численном решении акустических уравнений и уравнений упругости сеточно-

характеристическим численным методом на гексаэдральных и тетраэдральных расчётных сетках.

Проведена серия расчётов, в рамках которой на основе критерия Хашина определены области разрушения элемента нефтепровода, расположенного на дне морского шельфа. Анализ их результатов свидетельствует об изменении картины разрушения при изменении направления укладки волокон в композите. При укладке волокон параллельно оси трубы расслоение при слабом землетрясении меньше, но при сильном землетрясении происходит разрушение волокон, которого нет при укладке волокон перпендикулярно оси.

### **Библиографический список**

1. Hinton M.J., Kaddour A.S., Soden P.D. Failure criteria in fibre reinforced polymer composites: the world-wide failure exercise. – Amsterdam; London : Elsevier, 2004 – 1268 p.
2. Hinton M.J., Kaddour A.S. Maturity of 3D failure criteria for fibre-reinforced composites: Comparison between theories and experiments: Part B of WWFE-II // Journal of Composite Materials. – 2013. – №7. – P. 925-966.
3. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.1. – М.: Наука, 1970. – 492 с.
4. Golubev V.I., Petrov I.B., Khokhlov N.I. Software development to assess seismic resistance of oil and gas complex ground facilities // Society of Petroleum Engineers - SPE Arctic and Extreme Environments Conference and Exhibition, AEE. – 2013. – V. 3. – P. 2068-2082.
5. Golubev V.I., Petrov I.B., Khokhlov N.I., Shul'ts K.I. Numerical computation of wave propagation in fractured media by applying the grid-characteristic method on hexahedral meshes // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2015. – V. 55. – №. 3. – P. 509-518.
6. Petrov I. B., Favorskaya A. V., Vasyukov A. V., Ermakov A. S., Beklemysheva K. A., Kazakov A. O., Novikov A. V.. Numerical simulation of wave propagation in anisotropic media // Doklady mathematics – 2015 – V.90. – №3. – P. 778-780.
7. Beklemysheva K.A., Danilov A.A., Petrov I.B., Salamatova V.Yu., Vassilevski Yu.V., Vasyukov A.V. Virtual blunt injury of human thorax: Age-dependent response of vascular system // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2015. – V.30. – №5. – P 259–268.
8. Беклемышева К. А., Васюков А. В., Ермаков А. С., Петров И. Б. Численное моделирование при помощи сеточно-характеристического метода разрушения композиционных материалов // Математическое моделирование. – 2016. – Т.28. – .№2. – С. 97–110.

9. Заславский Ю.М., Кержаков Б.В., Кулинич В.В. Вертикальное сейсмическое профилирование на морском шельфе // Акустический журнал. 2008. – Т. 54. – № 3. – С. 483-490.

10. Golubev V.I., Kvasov I.E., Petrov I.B. Influence of natural disasters on ground facilities // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2012. – V.4. – №2. – P. 129-134.

11. Richter C.F. An instrumental earthquake magnitude scale // Bulletin of the Seismological Society of America. – 1935. – V.25 – №1. – P.1-32.

12. Petrov I. B., Vasyukov A. V., Beklemysheva K. A., Ermakov A. S., Dziuba A. S., Golovan V. I.. Numerical modeling of low energy strike at composite stringer panel. // Mathematical Modeling. – 2014. – V.26. – №9. – P. 96–110.

## METADATA

**Title:** Numerical simulation the destruction of a composite pipeline under the seismic activity.

**Authors:** I.B. Petrov, V.I. Golubev, K.A. Beklemisheva, A.V. Vasukov.

**Abstract:** The problem of numerical modeling of the process of initiation of seismic activity on the shelf and its destructive effect on a composite pipeline laid along the seabed is considered. To describe the dynamic behavior of a geological array, the determining systems of equations of the theory of elasticity and acoustics are used with explicit identification of all geological layers. The composite material of the pipeline is described as an orthotropic anisotropic material. An algorithm is proposed that allows the estimation of volume and type of pipeline destruction for a given level of seismic activity and strength characteristics of a composite. A distinctive feature of the developed approach is the full wave calculation of the propagation of seismic waves from the source of the earthquake to the day surface., a grid-characteristic method is used for numerical calculation on hexahedral and tetrahedral computational grids.

**Key words:** mathematical modeling, grid-characteristic method, earthquake, seismic stability, composite material, parallel algorithms, destruction of composites.

## КЛАСТЕРИЗАЦИЯ ЗАДЕРЖЕК МЕЖДУ УЗЛАМИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ\*

*А.Н. Сальников, А.А. Бегаев, А.И. Майсурадзе*  
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** В данной статье рассматривается принцип работы электроусилителя рулевого управления с параллельным приводом, преимущества в сравнение с гидроусилителем рулевого управления, создание активной системы безопасности, принцип работы в активном режиме, использование информации и обработка других датчиков системы, применение в работу электродвигателя, роль блока управление в активном рулевом управлении.

**Ключевые слова:** электроусилитель с параллельным приводом, система активной безопасности, датчики, электронный блок управления.

**Введение.** Современные суперкомпьютеры используются для решения большого спектра задач, в частности: математического моделирования и обработки больших объемов данных. Суперкомпьютеры как правило имеют кластерную архитектуру. Вычисления на суперкомпьютерах происходят параллельно на большом количестве вычислителей: узлах кластера, оснащённых многоядерными процессорами, однако пересылки между процессорами и узлами кластера могут значительно замедлить работу параллельной программы. С целью минимизации потерь необходимо понимать, между какими процессорами доставка сообщений происходит наиболее быстро или наоборот медленно для того, чтобы оптимально распределить вычисления по процессорам, составляющим суперкомпьютер.

Узлы кластера в суперкомпьютере объединяются в некоторую топологию, посредством коммутаторов. Как правило предполагают, что задержка при пересылке сообщения между этими узлами определяется количеством коммутаторов, которое пройдет это сообщение, а задержка между соседними процессорами считается постоянной величиной. Но на практике такая модель задержек часто оказывается слишком наивной, что обусловлено реальным физическим состоянием коммуникационной среды кластера. Таким образом следует учитывать состояние среды и иметь представление о топологии суперкомпьютера (скрытой не задокументированной) при планировании вычислений.

---

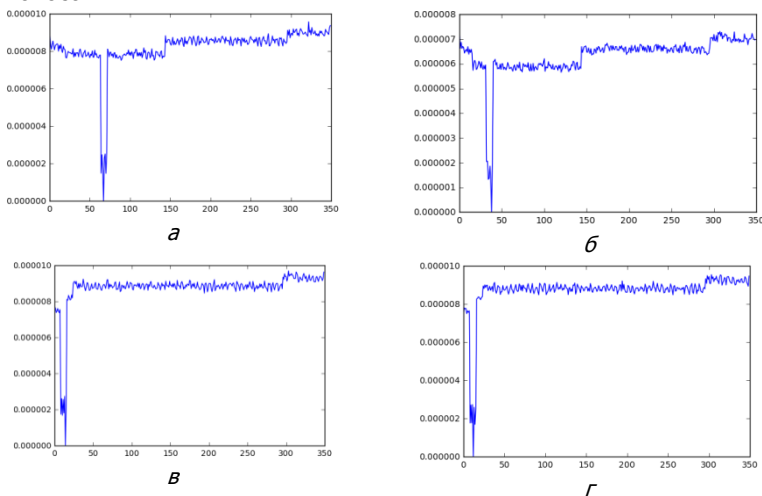
\* Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 17-07-01562.

Было замечено, что задержки между некоторыми парами узлов «источник-приемник» имеют похожий характер и количество классов похожих по характеру пар является не столь большим. Для выявления этих закономерностей будет производиться кластеризация пар процессоров. Кластеризация позволит лучше понять реальную топологию суперкомпьютера, узнать, какие процессоры находятся ближе друг к другу. Также, это позволит хранить меньший объем данных о задержках.

Целью работы является исследование методов кластеризации применимых к данной задаче, а также, методов визуального представления полученных кластеров.

**Описание основных задач.** Требуется выбрать оптимальный алгоритм кластеризации и метрику для нахождения требуемых кластеров. Разработать формат хранения результатов кластеризации, визуализировать полученные результаты.

**Выбор метрики.** Рассмотрим графики «длина сообщения — величина задержки» для четырех пар узлов «источник-приемник» для данных, построенных по результатам тестирования суперкомпьютера Ломоносов.



**Рис 1.** Графики «длина сообщения — величина задержки» для пар узлов «источник-приемник» на суперкомпьютере Ломоносов: (13, 54), (24, 67), (33, 20), (35, 14)

Как видно на графиках *а, б, в, г*, между парами (13,54), (24, 67) и (33, 20), (35, 14) характер задержек является одинаковым. Чтобы

выяснить какие еще пары узлов также имеют похожий характер задержек необходимо ввести «расстояние» между этими графиками. Это расстояние будет являться расстоянием для пар узлов «источник-приемник» –  $S_1$  и  $S_2$ .

Для полного учета поведения задержек необходимо учитывать медиану задержек –  $m$  и стандартное отклонение –  $\sigma$ , так как абсолютное значение задержек различается, не смотря на их похожесть. Использование именно этих статистик позволяет наиболее точно определить «расстояние» между парами и полностью учесть характер поведения задержек для всех длин сообщений. Также необходимо произвести нормализацию, для правильного расчета кластеров.

В результате исследований было установлено, что метрикой, дающей наиболее точный результат, является манхэттенское расстояние. [3] При использовании этой метрики влияние выбросов на среднее расстояние между объектами в кластере не так сильно, по сравнению с евклидовым расстоянием, так как они не возводятся в квадрат, вследствие этого в кластер попадают только те объекты, которые действительно входят в него.

В данной работе в качестве объектов принимаются пары процессоров «источник-приемник», которые характеризуются двумя векторами — медианы задержек —  $m$  и стандартными отклонениями –  $\sigma$ .

Таким образом, метрика для поставленной задачи принимает следующий вид:

$$\rho(S_1, S_2) = \frac{\sum_{i=l_1}^{l_2} \frac{|m_i^{S_1} - m_i^{S_2}|}{(\sigma_i^{S_1})^2 + (\sigma_i^{S_2})^2}}{\sum_{j=l_1}^{l_2} \frac{1}{(\sigma_j^{S_1})^2 + (\sigma_j^{S_2})^2}}$$

где  $l_1$  и  $l_2$  – длина наименьшего и наибольшего сообщений соответственно.

**Выбор алгоритмов кластеризации.** В следствие того, что нам неизвестно конечное количество кластеров, но известно, что их количество является небольшим, необходимо выбрать алгоритмы, которые могут работать без конкретного числа кластеров и давать корректный результат. Для этих целей подойдут алгоритмы DBScan и алгоритм дивизивной иерархической кластеризации, которые широко применяются на практике и имеют большое количество реализаций.

**Описание алгоритма DBScan.** Рассмотрим алгоритм плотностной кластеризации DBScan. Он был предложен Мартином Эстер,



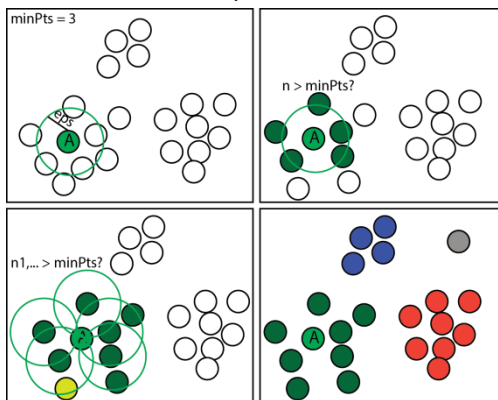
Гансом-Питером Кригель в 1996 году. Основная идея алгоритма заключается в следующем. Предполагается, что в пространстве существуют «сгущения» объектов, которые между собой образуют кластер. Они характеризуются наибольшей плотностью внутри кластера и наименьшей снаружи. Главной задачей алгоритма кластеризации DBScan является поиск этих сгущений.

Для описания работы вводятся следующие определения:

- $\text{eps}$  — максимальное расстояние между соседними объектами;
- $\text{minPts}$  — минимальное количество соседних объектов, требуемых для образования кластера;
- ядровой объект — объект, в  $\text{eps}$ -окрестности которого лежит  $\text{minPts}$  объектов;
- граничный объект — объект до которого можно дойти по ядровым объектам (расстояние между ним и ближним ядровым объектом меньше  $\text{eps}$ ).

Кластером будет являться множество ядровых объектов, достижимых по  $\text{eps}$ -окрестностям друг до друга, и множество граничных объектов, которые достижимы из любого ядрового объекта кластера по их  $\text{eps}$ -окрестностям.

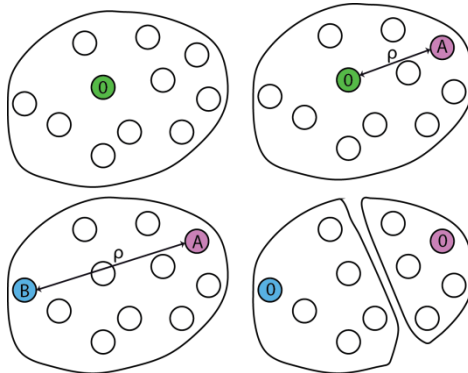
Перед началом работы необходимо выбрать  $\text{eps}$  и  $\text{minPts}$ , которые являются параметрами алгоритма. Алгоритм работает методом поиска в ширину и останавливается с исчерпанием всех объектов кластеризации.



**Рис. 2.** Иллюстрация работы алгоритма DBScan, с заданными  $\text{eps}$  и  $\text{minPts}$ . В данном случае  $\text{minPts} = 3$ .

**Описание алгоритма дивизивной кластеризации.** Перед запуском данного алгоритма нужно определиться с конечным количеством кластеров, которое требуется получить. В начале работы дивизивной иерархической кластеризации все пары «источник-приемник» образуют один общий кластер.

В этом кластере выбирается случайный объект (O) и ищется наиболее от него удаленный (A). Затем для найденного объект также ищется наиболее удаленный (B). Расстояние между элементами A и B называется диаметром кластера. Будем производить разбиение исходного кластера по этому диаметру. Наиболее близкие пары к элементу A будем относить к одному подкластеру, а близкие к B к другому. После вычисления принадлежности всех объектов исходного кластера производится его разбиение на два новых кластера. В результате такой операции получается двоичное дерево кластеров.



**Рис. 3.** Иллюстрация работы алгоритма дивизивной иерархической кластеризации.

**Описание формата сохранения результаты работы программы-кластеризатора.** В результате работы программы-кластеризатора на выходе получается файл, содержащий данные о полученных кластерах, выглядящий следующим образом:

<digit> ::= "0" | "1" | "2" | "3" | "4" | "5" | "6" | "7" | "8" | "9".

<float> ::= {digit}["e"] ["+" | "-"] {digit}.

<proc\_num> ::= "PROC\_NUM = " {digit}. - количество процессоров

<begmeslen> ::= "BEG\_MES\_LEN = " {digit}. - длина самого короткого сообщения

`<endmeslen> ::= "END_MES_LEN = " {digit}. - длина самого длинного сообщения`

`<steplen> ::= "STEP_LEN = " {digit}. - насколько отличаются соседние сообщения`

`<clust> ::= "Cluster# " {digit}. - номер кластера`

`<pair> ::= "(" {digit} ", " {digit} ")".`

`<cldata> ::= {pair}. - пары процессоров «приемник-источник», входящие в кластер.`

`<med> ::= {float} — значения средней медианы в кластере на всех длинах сообщений.`

`<dev> ::= {float} — значения среднего отклонения в кластере от средней медианы на всех длинах сообщений.`

Формат файла, содержащего информацию о полученных кластерах.

### **Примеры результатов работы программы на реальных данных:**

```

PROC_NUM = 128, BEG_MES_LEN = 25, END_MES_LEN = 4000,
STEP_LEN = 50
Cluster# 0
(0, 0) (1, 1) (2, 2) (3, 3) (4, 4) ...
0 0 0 0 0 0 ... 0 0 0
0 0 0 0 0 0 ... 0 0 0
...
Cluster# 51
(1, 127) (2, 127) (3, 127) (13, 113) (13, 114)... (127, 1) (127, 2)
(127, 3)
4.43708e-06 4.7181e-06 4.96488e-06 5.166e-06 5.57538e-06 ...
5.87367e-06 5.97445e-06 5.96344e-06
1.99302e-22 3.98604e-22 9.96509e-23 -3.48778e-22 -2.49127e-
22 ...1.49476e-22 9.96509e-23 3.98604e-22
  
```

Обрабатывались данные полученные при тестировании суперкомпьютера Bluegene/P. Были выбраны первые 128 процессоров, кластеризация производилась алгоритмом DBScan с  $\text{eps} = 1e+2$  и  $\text{minPts} = 10$ .

```

PROC_NUM = 128, BEG_MES_LEN = 0, END_MES_LEN = 10000,
STEP_LEN = 100
Cluster# 0 0
(0, 0) (0, 1) (0, 2) (0, 3) (0, 4) ... (127, 125) (127, 126) (127, 127)
1.22306e-06 1.30781e-06 1.3106e-06 1.31154e-06 1.312e-06
  
```

```

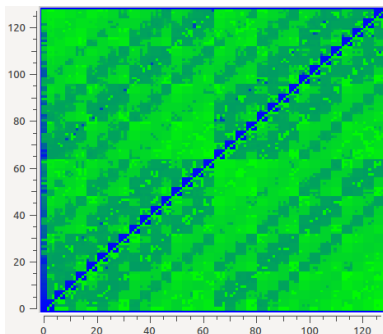
0 0 0 0 0 ... 0 0 0
Cluster# 1
(0, 8) (0, 9) (0, 10) (0, 11) (0, 12) ... (127, 117) (127, 118) (127, 119)
3.2883e-06 3.55088e-06 4.91068e-06 5.02736e-06 5.10795e-06 ...
1.26559e-05 1.2784e-05 0
1.92714e-21 -3.07216e-20 1.36512e-21 1.89976e-22 -9.36534e-
21 ... 4.94235e-21 -2.48441e-21 0

```

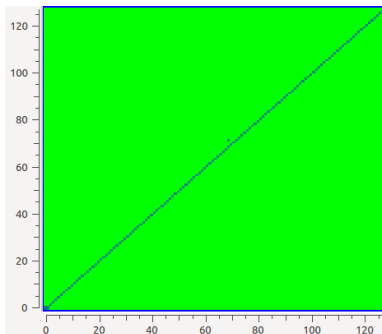
Обрабатывались данные полученные при тестировании суперкомпьютера Ломоносов. Были выбраны первые 128 процессоров, кластеризация производилась алгоритмом дивизивной иерархической кластеризации с  $nclust = 16$ .

**Результаты работы визуализатора.** В данной работе представлен следующий способ отображения результатов кластеризации. На вход подается файл с данными о найденных кластерах, полученный приложением `delay_clustering`. Каждому кластеру соответствует определенный цвет, шуму соответствует синий цвет.

### Bluegene/P (128 процессоров)



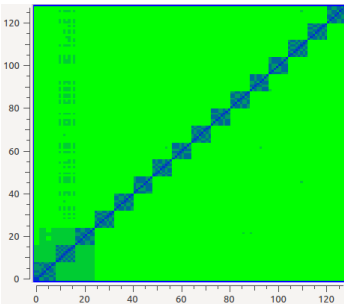
DBScan. Eps =  $1e+2$ , minPts = 10.



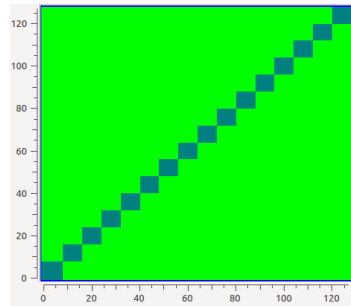
Divisive,  $nclust = 16$ . Итер — 2 кластера.

Кластеризация производилась на основании результатов тестирования суперкомпьютера Bluegene/P на 128 процессорах, на длинах сообщений от 25 до 4000 с шагом 50. Из результата кластеризации DBScan видна повторяемость узора через каждые 64 процессора.

### Ломоносов (128 процессоров)



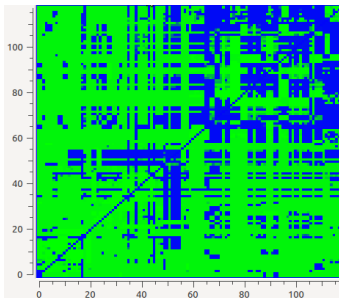
DBScan. Eps = 1e+3, minPts = 10.



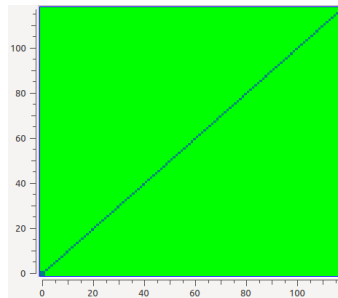
Divisive, nclust = 16. Итого — 2 кластера.

Кластеризация производилась на основании результатов тестирования суперкомпьютера Ломоносов на 128 процессорах, на длинах сообщений от 0 до 10000 с шагом 100. При визуализации результата кластеризации DBScan видно, что вдоль диагонали пары процессоров образуют кластеры.

### Ломоносов-2 (128 процессоров)



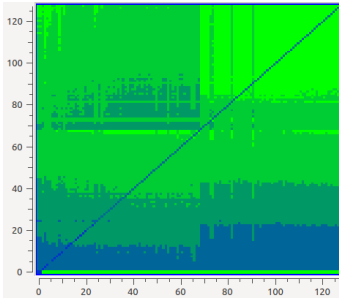
DBScan. Eps = 1e+3, minPts = 10.



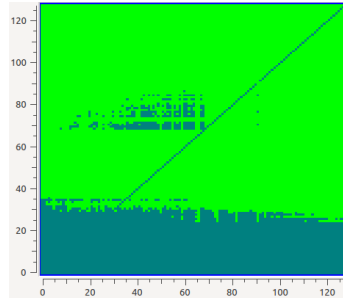
Divisive, nclust = 16. Итого — 2 кластера.

Кластеризация производилась на основании результатов тестирования суперкомпьютера Ломоносов-2 на 128 процессорах, на длинах сообщений от 0 до 10000 с шагом 100. Как видно из изображения, визуализирующего результат кластеризации DBScan, результаты тестирования Ломоносов-2 содержат много шума.

## Югора (128 процессоров)



DBScan. Eps =  $0.5e+2$ ,  
minPts = 10.



Divisive, nclust = 16.  
Итог – 2 кластера.

Кластеризация производилась на основании результатов тестирования суперкомпьютера Югора на 128 процессорах, на длинах сообщений от 0 до 1100 с шагом 100. По этому изображению тяжело сделать какой-либо вывод о топологии суперкомпьютера Югора.

**Заключение.** Исходя из результатов кластеризации, были замечены закономерности между величинами задержек, получающихся при обмене сообщениями между узлами суперкомпьютера, что позволяет сделать определенные выводы о его архитектуре, например, какие процессоры находятся близко друг к другу.

Наиболее полная информация о кластерах была получена при использовании алгоритма плотностной кластеризации DBScan, который нашел достаточно большое количество кластеров, тогда как дивизивная иерархическая кластеризация всегда находила только 2 кластера, независимо от данных. Алгоритм плотностной кластеризации является более вычислительно сложным, но при этом дает большую точность при расчете кластеров. В то время как дивизивная кластеризация является более простой, но при этом из-за неудачно выбранного разбиения на каком-то из ее шагов может быть упущена часть реально существующих кластеров. Для суперкомпьютеров Ломоносов и Югора произведенная иерархическая кластеризация дала лишь общее представление о кластерах, в то время как для Bluegene/P и Ломоносов не дала никакой полезной информации.

Для поиска наибольшего количества кластеров при использовании DBScan следует правильно подбирать параметры eps и minPts, исходя из масштаба — представления о возможных значениях расстояний между парами процессоров, рассчитываемых при помощи введенной метрики, и количестве пар процессоров.

### Библиографический список

1. Brian S. Everitt, Landau S., Leese M., Stahl D., Cluster Analysis, 5th edition // Wiley, 2011, pp. 49-53, 84-88, 220 – 222
2. Charu C. Aggarwal, Chandan K. Reddy, Data Clustering. Algorithms and Applications // CRC Press, 2014, pp. 5 – 8
3. A. Peiravi, A fast algorithm for connectivity graph approximation using modified Manhattan distance in dynamic networks // 2008 – Applied Mathematics and Computation, pp. 319-332
4. Сальников А.Н., Андреев Д.Ю., Лебедев Д.Ю., Инструментальная система для анализа характеристик коммуникационной среды вычислительного кластера на основе функций стандарта MPI // 2012 – Вестник Московского университета, №1, Москва, изд-во МГУ, с.39–48.
5. Сальников А.Н., Майсурадзе А.И., Андреев Д.Ю., Костин Г.А., Кластеризация результатов тестирования коммуникационной среды многопроцессорных систем: единицы анализа, исследование методов, визуализация результатов // 2012 – Вестник УГАТУ, Уфа, с. 3-9.

### METADATA

**Title:** Clustering delays between nodes of supercomputer and visualization of obtained results.

**Authors:** A.N. Salnikov, A.A. Begaev, A.I. Maisuradze

**Abstract:** In this paper we propose method for estimating and analysis measurements of delays in the computational cluster interconnection subsystem. Delays are combined into the set of pairs (source, destination). We have measurements of delays extracted by network\_test2 utility from interconnections of following supercomputers: BlueGene/P, Lomonosov-1, Lomonosov-2 (Lomonosov MSU) and Jurope (Julich). We have clustered pairs of delays by DBScan and Divisive algorithms. Results of clusterisation revealed that DBScan is more accurate algorithm then divisive and allows to extract clusters, which correspond to the actual features in the supercomputer interconnections. Also, we have developed the easy tool, which allows to visualize extracted clusters in 2-D.

**Key words:** computing cluster, clustering algorithm, interconnect, parallel computing.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРАСТРАНЕНИЯ НЕФТЯНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В ПРИБРЕЖНЫХ СИСТЕМАХ НА СУПЕР-ЭВМ \*

А.А. Семенякина

Научно-исследовательский центр супер-ЭВМ и нейрокомпьютеров,  
г. Таганрог, Россия

**Аннотация.** *Интенсификация темпов роста промышленности и производства, особенно в течение последних десятилетий, оказывает непосредственное влияние на экологическое состояние прибрежных систем. Одним из эффективных и менее трудозатратных способов контроля и управления природными экосистемами является предсказательное моделирование. Построение прогнозов распространения загрязнений, в том числе нефтепродуктов, наиболее вредных и токсичных веществ, имеет важное значение, особенно в случае беспрецедентных загрязнений, и должно осуществляться более точно и в ускоренном режиме времени.*

**Ключевые слова:** *предсказательное моделирование; прибрежные системы; распространение загрязняющих веществ; транспорт нефтепродуктов; экологическая обстановка; супер-ЭВМ.*

**Введение.** В связи с изменением природно-климатических условий, а также увеличением антропогенного воздействия на прибрежные системы происходит нарушение условий их устойчивого развития. Поэтому возникла необходимость в разработке программного-алгоритмического инструментария, имеющего научное и важное народнохозяйственное значение и позволяющего осуществлять предсказательное моделирование взаимосвязанных гидрофизических процессов распространения загрязняющих веществ (ЗВ), включая нефтепродукты, которые относятся к одним из самых токсичных и вредных веществ, в прибрежных системах.

**Методология исследования.** Моделирование состояния прибрежных экосистем имеет важное значение. Прибрежные системы, в отличие от других водоемов, представляют собой водные объекты, характеризующиеся географическими и климатическими особенностями, а также интенсивными гидродинамическими и гидрофизическими процессами, протекающими в них [1]. Многие прибрежные системы, подобные Азовскому морю, являются уникальными природными объектами. Поэтому для сохранения условий их устойчивого развития, особенно в случаях аварийных и, в частности, беспрецедентных,

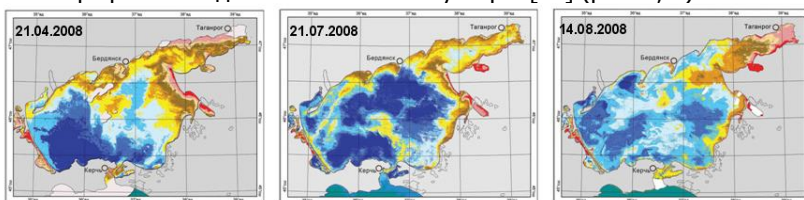
---

\* Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 17-11-01286

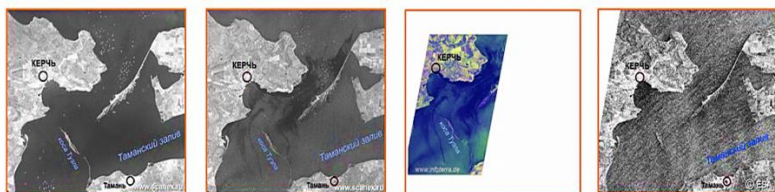


загрязнений, необходима разработка более эффективных методов построения прогнозов состояния экосистемы в режиме ускоренного времени [2].

Для контроля качества моделирования процессов гидрофизики и биологической кинетики, протекающих при загрязнении водоемов, в том числе нефтепродуктами, в работе используются результаты спутникового мониторинга Земли, данные дистанционного зондирования Азовского моря [5], дешифрованные данные, полученные НИЦ «Планета» [3], а также многолетние, постоянно пополняющиеся базы экологических и океанографических данных по Азовскому морю [10] (рис. 1, 2).



**Рис. 1** – Тематические карты состояния водной среды, полученные с помощью кластерного анализа спутниковых изображений (по данным ИСЗ TERRA, MODIS, разрешение 250 м, спектр. каналы: 0,620-0,670 мкм; 0,545-0,565 мкм; 0,459-0,479 мкм)



ИСЗ Radarsat-1, 15 ноября 2007 г.      ИСЗ Radarsat-1, 16 ноября 2007 г.      ИСЗ Terra-SAR, 16 ноября 2007 г.      ИСЗ Envisat, 20 ноября 2007 г.  
 Скорость ветра по данным метеостанции Керчь составляла 2 м/с.      Скорость ветра по данным метеостанции Керчь составляла 3 м/с.      Скорость ветра по данным метеостанции Керчь составляла 3 м/с.      Скорость ветра по данным метеостанции Керчь составляла 8 м/с.  
 Общая площадь пленок нефтяных загрязнений - 117,6 км<sup>2</sup>.

**Рис. 2** – Радиолокационные изображения участка разлива нефти, произошедшего в Керченском проливе в ноябре 2007 г

Для предсказательного моделирования экологической обстановки прибрежных систем разработаны и численно реализованы усовершенствованные пространственно-неоднородные непрерывные модели транспорта ЗВ, включая нефтепродукты, в прибрежных системах, особенностью которых является учет факторов, существенно влияющих на динамику распределения загрязнений в водоеме. К достоинствам разработанных моделей также относится использование в качестве входной информации апробированной математической модели

гидродинамики, разработанной группой ученых под руководством Сухинова А.И. [11 – 13], а также схем повышенного порядка точности с учетом частичной заполненности ячеек области [14], что позволяет повысить точность построения прогнозов.

В связи с тем, что для моделирования в реальных областях сложной формы требуются подробные расчетные сетки, был разработан новый метод восстановления рельефа дна прибрежной системы на примере Азовского моря по имеющейся гидрографической информации, позволяющий получить сглаженное изображение донной поверхности водоема [16], по сравнению с известными методами за счет меньших отклонений от линейной функции по сравнению с кубическим сплайном, а также достаточная степень гладкости в точках склейки функции [6, 15].

Параллельная реализация поставленных задач выполнена на многопроцессорной вычислительной системе (МВС) Южного федерального университета [8]. Пиковая производительность МВС – 18.8 TFlops. МВС включает в себя 8 компьютерных стоек. Вычислительное поле МВС построено на базе инфраструктуры HP BladeSystem c-class с интегрированными коммуникационными модулями, системами электропитания и охлаждения. В качестве вычислительных узлов используется 512 однотипных 16-ядерных Blade-серверов HP ProLiant BL685c: каждый оснащен четырьмя 4-ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и оперативной памятью – 32 ГБ.

На базе МВС была разработана библиотека прикладных программ, которая позволяет находить решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при дискретизации задач, различными итерационными методами. Построены параллельные алгоритмы решения задач транспорта ЗВ, основанные на применении адаптивного модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода, наиболее эффективного для решения подобных прикладных задач по сравнению с известными [9, 19].

При параллельной реализации были использованы методы декомпозиции расчетных областей для различных вычислительно трудоемких задач гидрофизики с учетом архитектуры и параметров МВС. Установлено, что максимальное ускорение достигалось на 512 процессорах и составило 63 раза [9] (см. табл. 1).

Таблица 1 – Ускорение и эффективность параллельного алгоритма МПТМ

Число процессоров	Время, с	Ускорение (практическое)	Эффективность	Ускорение (теоретическое)
1	3,700073	1	1	1
2	1,880677	1,967	0,984	1,803
4	1,2655	2,924	0,944	3,241
8	0,489768	7,555	0,731	7,841
16	0,472151	7,837	0,49	9,837
32	0,318709	11,61	0,378	14,252
64	0,182296	20,297	0,363	26,894
128	0,076545	48,338	0,317	55,458
256	0,06318	58,563	0,229	65,563
512	0,058805	62,921	0,123	72,921

Для построения различных сценариев развития экологической обстановки прибрежных систем на примере Азово-Черноморского бассейна, особенно в условиях ЧС, на базе многопроцессорной вычислительной системы ЮФУ разработан модернизированный программный комплекс «Azov3d» [17, 18], предназначен для предсказательного моделирования различных сценариев развития экологической обстановки прибрежных систем. Комплекс представляет собой совокупность программных модулей, которые позволяют учитывать различные геолого-климатические и метеорологические факторы, оказывающие существенное влияние на динамику распространения ЗВ в водоемах; проводить исследование зависимости концентраций загрязнений, степени и размеров зоны поражения водного объекта от интенсивности движения водного потока, гидрофизических параметров. К его особенностям относятся высокая производительность, достоверность, а также высокая точность получаемых результатов моделирования.

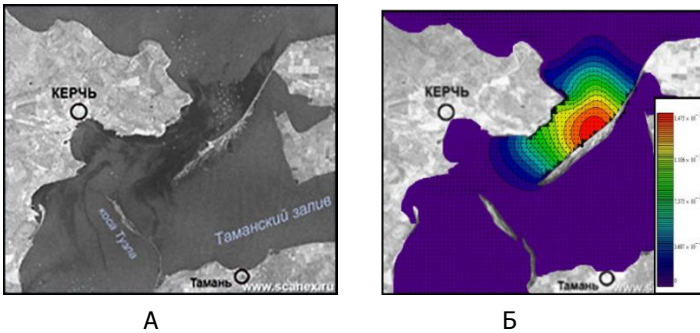
Комплекс программ «Azov3d» включает в себя разработанные вычислительные модули, программно-реализующие усовершенствованные модели транспорта ЗВ, включая нефтепродукты, в прибрежных системах и методы решения их дискретных аналогов с использованием разработанных схем повышенного порядка точности, учитывающих частичную заполненность контрольных областей, позволяющие повысить качество входных данных, а также уменьшить значения погрешности задач гидрофизики [4].

Модernизированный комплекс программ позволяет осуществлять:

- совершенствование и внедрение системы комплексного рыбохозяйственного мониторинга в водоемах (наблюдение, оценка и прогноз состояния режима экосистем);

- разработку мероприятий по обеспечению оптимального режима, сохранения биоразнообразия промысловых ресурсов, прибрежных экосистем;
- совершенствование методологии природоохранных исследований, разработка новых, апробация и внедрение перспективных методов изучения состояния водных экосистем и отдельных компонентов;
- разработку и совершенствование методов диагностики токсического воздействия ЗВ на гидробионты прибрежных систем;
- организацию и проведение исследований по выявлению тенденций и закономерностей изменения состояния водных экосистем под воздействием антропогенных факторов;
- оценку ущербов рыбному хозяйству, наносимых разными видами хозяйственной деятельности, разработку предложений по предотвращению, уменьшению и адекватной компенсации ущербов.

На основе модифицированного комплекса программ «Azov3d» была проведена реконструкция аварийного разлива нефти, произошедшего во время катастрофического шторма в Керченском проливе в ноябре 2007 г., при котором объем разлитой нефти составил более 1300 т мазута [7, 11]. При анализе результатов моделирования транспорта нефтепродуктов в прибрежной системе получено соответствие имеющимся радиолокационным снимкам и натурным данным участка катастрофы (рис. 3) на качественном и количественном уровнях.



**Рис. 3** – Сравнение полученных результатов:

А: радиолокационное изображение участка разлива нефти на 16.11.2007;

Б: результат работы модернизированного «Azov3d»

Критерием проверки условия адекватности разработанных моделей транспорта ЗВ, включая нефтепродукты, в прибрежных системах являлась оценка погрешности моделирования, выполненная с одновременным учетом натуральных данных по имеющимся  $n$  замерам

согласно следующей формуле:  $\delta = \left( \sqrt{\sum_{k=1}^n (c_{k \text{ nat}} - c_k)^2} / \sqrt{\sum_{k=1}^n c_{k \text{ nat}}^2} \right) \cdot 100\%$ , где

$c_{k \text{ nat}}$  – значение концентрации нефтяной фракции, полученное с помощью натуральных измерений;  $c_k$  – значение концентрации нефтяной фракции, рассчитанное на основе разработанной непрерывной модели транспорта нефтепродуктов.

Анализ работоспособности подобных комплексов программ показал, что в результате проделанной работы точность прогнозов динамики распространения ЗВ, в том числе нефтепродуктов, в прибрежных системах удалось повысить на 10 – 30% в отличие от известных.

**Результаты исследования.** Полученные результаты могут быть использованы для осуществления точного и оперативного контроля экологической обстановки прибрежных систем, таких как Азовское море, изучать закономерности прибрежной циркуляции и их влияние на распространение загрязнений; выявлять типовые ситуации распределения загрязнений в прибрежных водах в зависимости от природно-климатических и гидродинамических условий, а также способствуют повышению достоверности картографирования экологической ситуации, прогнозирования динамики распространения загрязнений, расширению знаний о динамике и загрязнении прибрежных вод.

### **Библиографический список**

1. Марчук, Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г.И. Марчук – М.: Наука, 1982. – 319 с.
2. Матишов, Г.Г. Экосистемный мониторинг и оценка воздействия разливов нефтепродуктов в Керченском проливе. Аварии судов в ноябре 2007 г. [Текст] / Г.Г. Матишов, С.В. Бердников, Р.М. Савицкий / Ростов-на-Дону: издательство ЮНЦ РАН, 2008. – 80 с.
3. Научно-исследовательский центр космической гидрометеорологии «Планета», URL: <http://planet.iitp.ru/index1.html>.
4. Никитина, А.В. Параллельная реализация задачи диффузии-конвекции на основе схем повышенного порядка точности [Текст] / А.В. Никитина, А.А. Семенякина, А.Е. Чистяков // Вестник компьютерных и информационных технологий, 2016. – №7 (145). – С. 3-8.

5. Никитина, А.В. Дифференциально-игровая модель предотвращения замороз в мелководных водоемах / А.В. Никитина, М.В. Пучкин, И.С. Семенов, А.И. Сухинов, Г.А. Угольницкий, А.Б. Усов, А.Е. Чистяков // Управление большими системами: сборник трудов, 2015. – № 55. – С. 343-361.

6. Самарский, А.А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры [Текст] / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. – М.: Физматлит, 2001. – 320 с.

7. Семенякина, А.А. Математическая модель транспорта нефтепродуктов [Текст] / А.А. Семенякина / Материалы XII Ежегодная научная конференция студентов и аспирантов базовых кафедр Южного научного центра РАН. – Ростов-на-Дону, 2016. – С. 109-110.

8. Сухинов, А.И. Параллельная реализация задач транспорта веществ и восстановления донной поверхности на основе схем повышенного порядка точности [Текст] / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, А.А. Семенякина, А.В. Никитина // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2015. – Т. 16, № 2. – С. 256-267.

9. Сухинов, А.И. Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором [Текст] / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков // Математическое моделирование, 2012. – Т. 24. – № 1. – С. 3-20.

10. Petrov Igor B. Application of grid-characteristic method for numerical solution of deformable solid mechanics dynamical problems // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 1-20.

11. Sukhinov, A. I., Sidoryakina, V. V., Sukhinov, A.A. Sufficient convergence conditions for positive solutions of linearized two-dimensional sediment transport problem // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 21-35.

12. Nikitina, A.V., Semenyakina, A.A. Mathematical modeling of eutrophication processes in Azov Sea on supercomputers // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp 82-101.

13. Chistyakov, A.E., Protsenko, E.A., Timofeeva, E.F. Mathematical modeling of oscillatory processes with a free boundary // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 102-112.

14. Сухинов, А.И. Численное моделирование экологического состояния Азовского моря с применением схем повышенного порядка точности на многопроцессорной вычислительной системе [Текст] / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, А.А. Семенякина, А.В. Никитина //

Компьютерные исследования и моделирование, 2016. – Т. 8, № 1. – С. 151-168.

15. Четверушкин, Б.Н. Пределы детализации и формулировка моделей уравнений сплошных сред [Текст] / Б.Н. Четверушкин // Математическое моделирование, 2012. – Т. 24. – № 11. – С. 33-52.

16. Чистяков, А.Е. Применение методов интерполяции для восстановления донной поверхности [Текст] / А.Е. Чистяков, А.А. Семенякина // Известия ЮФУ. Технические науки, 2013. – № 4. – С. 21-28.

17. Sukhinov, A.I. Solution of the Problem of Biological Rehabilitation of Shallow Waters on Multiprocessor Computer System / A.I. Sukhinov, I.I. Levin, A.E. Chistyakov, A.V. Nikitina, I.S. Semenov, A.A. Semenyakina // Proceedings of the 5th International Conference on Informatics, Electronics and Vision (ICIEV). Dhaka, Bangladesh, 2016. – P. 1128-1133. – ISBN: 978-150901269-5. – DOI: 10.1109/ICIEV.2016.7760175.

18. Sukhinov, A. Complex of models, explicit regularized schemes of high-order of accuracy and applications for predictive modeling of after-math of emergency oil spill / A. Sukhinov, A. Nikitina, A. Semenyakina, A. Chistyakov // Proceedings of the 10th Annual International Scientific Conference on Parallel Computing Technologies, 2016. – Vol. 1576. – P. 308–319. ISSN: 16130073.

19. Sukhinov, A.I. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs / A.I. Sukhinov, A.E. Chistyakov, E.A. Protsenko // Mathematical Models and Computer Simulations, 2014. – Vol. 6, Issue 4. – P. 351-363.

## METADATA

**Title:** Modeling the processes of oil pollution distribution in situation of coastal systems on supercomputer.

**Authors:** A.A. Semenyakina

**Abstract:** Intensive development of the industry and manufacturing, especially in recent decades, has the direct impact on the ecologic situation of coastal systems. One of the effective and least labor-intensive methods of controlling and monitoring the natural ecosystems is predictive modeling. Forecasting the pollution spread, including petroleum products, which are the most harmful and toxic substances, is important, especially in the case of unprecedented pollutions, and should be performed more precisely and in an accelerated time.

**Key words:** predictive modeling; coastal systems; spreading of pollution; oil transport; ecology situation; supercomputers.

## **О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА ГАЛЕРКИНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУМЕРНОЙ ДИФФУЗИИ ЭКСИТОНОВ, ГЕНЕРИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ МАТЕРИАЛЕ**

*Е.В. Серегина<sup>1</sup>, А.Н. Поляков<sup>2</sup>, М.А. Степович<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), Калужский филиал,

<sup>2</sup> Калужский государственный университет им. К. Э. Циолковского, г. Калуга, Россия

**Аннотация.** *В настоящей работе изложены результаты использования проекционного метода Галеркина для моделирования двумерной диффузии экситонов, возбуждаемых электронным пучком в полупроводниковом материале. Задача решена в цилиндрической системе координат. Искомая концентрация экситонов найдена в виде частичной суммы двойного ряда Фурье по системе модифицированных функций Лагерра. Дана порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению нестационарного уравнения их диффузии. При моделировании использовались параметры, характерные для нитрида галлия.*

**Ключевые слова:** *полупроводниковый материал; электронный пучок; концентрация экситонов; проекционный метод Галеркина.*

**Введение.** Для математического моделирования двумерной диффузии экситонов, возбуждаемых электронным пучком в полупроводниковом материале, может быть использовано нестационарное дифференциальное уравнение диффузии. Аналитическое решение может быть найдено с использованием функции Грина [1].

В настоящей работе изложены результаты использования проекционного метода Галеркина для моделирования концентрации экситонов, генерированных электронным пучком в полупроводниковом материале. Исходная задача решается в цилиндрической системе координат, и искомая концентрация находится в виде частичной суммы двойного ряда Фурье по системе модифицированных функций Лагерра. В работе [2] была получена порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению стационарного уравнения диффузии проекционным методом Галеркина. Настоящая работа продолжает такие исследования и ставит задачу дать оценку погрешности невязки, соответствующей приближенному решению нестационарного уравнения диффузии.



**Постановка задачи.** Концентрация экситонов  $c(x, y, t)$  в точке с координатами  $(x, y)$  может быть найдена как решение нестационарного дифференциального уравнения диффузии

$$c_t = D\Delta c - c/\tau \quad (1)$$

с начальным условием

$$c(x, y, 0) = n(x, y) \quad (2)$$

Здесь  $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$  – двумерный оператор Лапласа,  $D$  – коэффициент диффузии,  $\tau$  – время жизни экситонов, функция  $n(x, y)$  может быть найдена как решение стационарного дифференциального уравнения, описывающего диффузию экситонов в состоянии квазиравновесия:

$$D\Delta n - n/\tau = -\Phi(x, y) \quad (3)$$

где  $\Phi(x, y)$  – функция источника генерации экситонов, которая определяется характером возбуждения и свойствами материала. В случае узкого электронного пучка, электронного зонда, область генерации экситонов описывается функцией распределения Гаусса, что дает для правой части (3) соотношение  $G_0\varphi(x, y)$ . Здесь  $\varphi(x, y)$  – плотность двумерного нормального распределения Гаусса, а  $G_0$  – частота генерации экситонов.

Переходя к цилиндрической системе координат, получим следующее уравнение:

$$r \frac{\partial^2 c(r, t)}{\partial r^2} + \frac{\partial c(r, t)}{\partial r} - \frac{1}{D} r \frac{\partial c(r, t)}{\partial t} - \frac{1}{\lambda^2} r c(r, t) = 0 \quad (4)$$

с граничными условиями

$$c(r, 0) = n(r), \quad c(\infty, \infty) = 0, \quad (5)$$

где  $\partial^2 c(r, t)/\partial \varphi^2 = 0$ , поскольку  $c(r, \varphi, t) \equiv c(r, t)$ ,  $\lambda = \sqrt{D\tau}$  – диффузионная длина экситонов. Тогда уравнение (3) примет вид:

$$r \frac{d^2 n(r)}{dr^2} + \frac{dn(r)}{dr} - \frac{1}{\lambda^2} r n(r) = -\frac{1}{D} r \Phi(r) \quad (6)$$

**Проекционная аппроксимация исходной модели, основанная на применении метода Галеркина.** Для реализации проекционного метода Галеркина выберем двумерный базис из модифицированных функций Лагерра с параметрами, ускоряющими сходимость ряда [3]:

$$\varphi_{i,j}(r, t) = \varphi_i(r)\varphi_j(t) = \exp(-\gamma_1 r/2)L_i(\gamma_1 r)\exp(-\gamma_2 t/2)L_j(\gamma_2 t),$$

которые определяются через многочлены Чебышева-Лагерра по переменной  $r$  -  $L_i(\gamma_1 r)$  и многочлены по переменной  $t$  -  $L_j(\gamma_2 t)$  с параметрами  $\alpha_1 = 0$  и  $\alpha_2 = 0$  соответственно [3],  $i, j = 0, 1, 2, \dots$ . Здесь параметры  $\gamma_1 > 0$  и  $\gamma_2 > 0$  используются для оптимизации вычислительной схемы.

В методе Галеркина предполагается, что неизвестная функция  $c(r, t)$  может быть достаточно точно представлена приближенным решением:

$$c_{m+1}(r, t) = c_m(r, t) + c_0(r, t), \quad (7)$$

где  $c_m(r, t) = \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-1} c_{ij} \varphi_i(r) \varphi_j(t)$  – прямоугольная частичная сумма двойного ряда Фурье-Лагерра порядка  $m \times m$  функции  $c(r, t)$ , а

$$c_0(r, t) = p_0(r) \varphi_m(t),$$

$$c_0(r) = \frac{\sum_{i=0}^{m-1} c_i^n \varphi_i(r) - \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-1} c_{ij} \varphi_i(r) \varphi_j(0)}{\varphi_m(0)}.$$

Функция  $c_0(r, t)$  введена, чтобы удовлетворить граничным условиям,  $c_i^n$  – коэффициенты разложения функции  $n(r)$ , которые находятся из решения уравнения (6), а неизвестные коэффициенты разложения

$$c_{ij} = \frac{i! j!}{\Gamma(i+1) \Gamma(j+1)} \int_0^\infty \int_0^\infty c(r, t) \varphi_i(r) \varphi_j(t) d(\gamma_1 r) d(\gamma_2 t)$$

искомой функции  $c(r, t)$  согласно методу Галеркина определяются из решения следующей системы уравнений:

$$(R, \varphi_k(r) \varphi_l(t)) = 0, \quad k, l = \overline{0, m-1}, \quad (8)$$

а  $R = r \frac{\partial^2 c_{m+1}(r, t)}{\partial r^2} + \frac{\partial c_{m+1}(r, t)}{\partial r} - \frac{1}{D} r \frac{\partial c_{m+1}(r, t)}{\partial t} - \frac{1}{\lambda^2} r c_{m+1}(r, t)$  – невязка исходного уравнения (4).

Обозначим столбцы (растянутые в столбцы матрицы) из коэффициентов разложения неизвестной функции  $c(r, t)$  и функции  $n(r)$  по выбранному базису через  $C_{mm}$  и  $C_m^n$  соответственно. Используя кронекерово произведение, введём матрицу дифференцирования по

переменной  $r - D_{\text{mmn}}^r = D_m^{\gamma_1} \otimes E_m$  и по переменной  $t - D_{\text{mmn}}^t = E_m \otimes D_m^{\gamma_2}$ , где  $E_m$  – единичная матрица, а  $D_m^{\gamma}$  – матрица дифференцирования в одномерном базисе из модифицированных функций Лагерра, элементы которой находятся с помощью элементарных алгебраических операций [4]:

$$d_{ij} = \begin{cases} -\gamma/2, & \text{если } i = j, \\ -\gamma, & \text{если } i < j, \\ 0, & \text{если } i > j. \end{cases}$$

Обозначим через  $B_1$  матрицу, элементы которой находятся по формуле:

$$b_{ij}^1 = \begin{cases} -\gamma_1(j-1)/4, & \text{если } i+1 = j, \\ \gamma_1(1-(i-1)/4), & \text{если } j+1 = i, \\ \gamma_1(3/4 - i/2), & \text{если } i = j, \\ 0, & \text{если } i+1 < j, \\ \gamma_1, & \text{если } j+1 < i, \end{cases}$$

и через  $B_2$  матрицу с элементами:

$$b_{ij}^2 = \begin{cases} -i/\gamma_1, & \text{если } i+1 = j, \\ -(i-1)/\gamma_1, & \text{если } j+1 = i, \\ (2i-1)/\gamma_1, & \text{если } i = j, \\ 0, & \text{если } i+1 < j, \\ 0, & \text{если } j+1 < i, \end{cases}$$

которые устанавливаются на основании следующих рекуррентных соотношений для функций Лагерра:

$$\begin{aligned} r\varphi_i''(r) &= -(\gamma_1/4)(i+1)\varphi_{i+1}(r) + ((\gamma_1/4)(2i+1) - \gamma_1 i)\varphi_i(r) + \\ &+ (i(-3\gamma_1/4) + (1/\gamma_1)(1-i))\varphi_{i-1}(r) + (1/\gamma_1)\sum_{k=0}^{i-2}\varphi_k(r), \\ r\varphi_i'(r) &= (1/\gamma_1)[-(i+1)\varphi_{i+1}(r) - i\varphi_{i-1}(r) + (2i+1)\varphi_i(r)]. \end{aligned}$$

Последние соотношения легко выводятся из известных рекуррентных соотношений для многочленов Лагерра [3]:

$$\begin{aligned} (i+1)L_{i+1}(r) + (r-2i-1)L_i(r) + iL_{i-1}(r) &= 0, \\ rL_i'(r) = iL_i(r) - iL_{i-1}(r) &= 0 \end{aligned}$$

и формул:

$$rL_1''(r) + (1-r)L_1'(r) + iL_1(r) = 0,$$

$$\sum_{k=0}^i L_k(r) = L_1(r; 1),$$

где  $L_1(r; 1)$  – многочлены Чебышева-Лагеррра по переменной  $r$  с параметром  $\alpha_1 = 1$ .

Далее введем матрицы:  $D_{\text{mm}}^{r2} = B_1^T \otimes E_m$ ,  $D_{\text{mm}}^{l2} = B_2^T \otimes D_m^{\gamma_2}$ ,  $I_{\text{mm}} = B_2^T \otimes E_m$ . Перепишем систему (8) в матричном виде

$$\left( D_{\text{mm}}^{r2} - \frac{1}{D} D_{\text{mm}}^{l2} + D_{\text{mm}}^r + \frac{1}{D} D_{\text{mm}}^{\phi} - \frac{1}{\lambda^2} I_{\text{mm}} \right) C_{\text{mm}} = \frac{1}{D} C_{\text{mm}}^{\Phi_1}, \quad (9)$$

где  $D_{\text{mm}}^{\phi} = B_2^T \otimes B_3$ ,  $B_3$  – матрица с элементами  $b_{ij}^3 = -\gamma_2$ , а столбец  $C_{\text{mm}}^{\Phi_1}$  находится путем растяжения матрицы:  $C_{\text{mm}}^{\Phi_1} = B_2^T C_m^n (-\gamma_2 \phi^m(0))^T$ .

Подстановка величин  $c_{ij}$ , определяемых из решения системы уравнений (9), в формулу (7), дает искомое приближенное решение.

Исследуем сходимость невязки  $R$  и покажем, что  $R$  сходится к нулю в среднем (в пределе при  $m \rightarrow \infty$ ).

Следуя [5], введем обозначения:

$$D = r \frac{d^2}{dx^2} + (1-r) \frac{d}{dr} + t \frac{d^2}{dt^2} + (1-t) \frac{d}{dt};$$

$L_2^n(D)$  ( $n=0,1,\dots$ ) – класс функций  $f$  таких, что функции  $\mathcal{F}(r,t) = f(r,t) \exp(\gamma_1 r/2) \exp(\gamma_2 t/2) \in L_2$  и имеющие обобщенные частные производные в смысле Леви  $\partial^k \mathcal{F}(r,t) / \partial r^i \partial t^j$ ,  $i+j=k$ ,  $k=0,1,\dots$ , принадлежащие пространству  $L_2$ , для которых  $D^n \mathcal{F} \in L_2$ ,  $n=0,1,\dots$ , где  $D^0 \mathcal{F} = \mathcal{F}$ ,  $D^n \mathcal{F} = D(D^{n-1} \mathcal{F})$ ,  $n=1,2,\dots$ ,  $L_2^0(D) = L_2$ .

Если погрешности в исходных данных и погрешности вычислений отсутствуют, а учитываются лишь погрешности аппроксимаций, то, опираясь на результаты работы [2], можно установить оценку для невязки уравнения (4). Мы не будем останавливаться на этом подробно, а приведем без доказательства следующий результат.

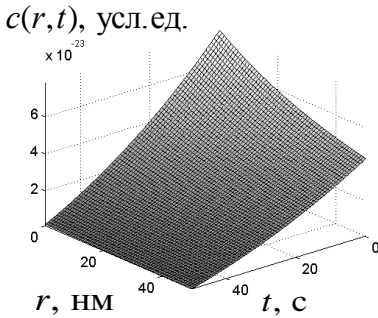
Пусть функция  $c(r,t) \in L_2^{n+1}(D)$ ,  $n > 2$  и имеет непрерывные частные производные до порядка  $2n+2$  по обоим пространственным направлениям, тогда справедлива оценка:

$$\|R\|_{L_2} < \left[ 3\sqrt{2}/\gamma_1 + 2 + 2\sqrt{2}/(D\gamma_1) + \sqrt{2}/(\lambda^2\gamma_1) \right] \left[ 1 - (1 - m^{-1/2})^m \right]^k \times \\ \times (m)^{-n} \Omega(m^{-1/2}) + O\left(m^{-n+\frac{7}{4}}\right) \omega(m^{-1/2}), \quad m \rightarrow \infty.$$

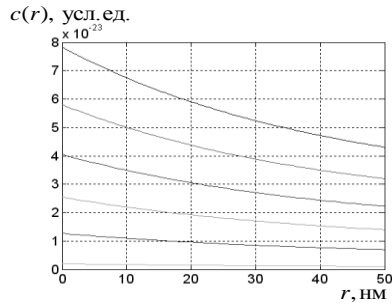
Здесь  $\Omega(m^{-1/2})$  - мажоранта обобщенных модулей непрерывности для функций из пространства  $L_2$  [5], а  $\omega(m^{-1/2})$  – заданная мажоранта модулей непрерывности дифференцируемых функций [6]. Последнее выражение означает, что невязка уравнения (3)  $R$  сходится к нулю в среднем.

**Результаты математического моделирования.** Было проведено математическое моделирование диффузии экситонов для параметров полупроводника, характерных для нитрида галлия, который является перспективным материалом для создания устройств опто-, микро- и наноэлектроники, способных работать в том числе и в неблагоприятных условиях внешней среды и при высоких напряжениях. Частота генерации экситонов принималась равной  $G_0 = 10^{-13} \text{ с}^{-1}$ , а профиль распределения энергии электронов в пучке задавался функцией Гаусса с нулевым математическим ожиданием и дисперсией 60 нм, что соответствует условиям реальных экспериментальных катодолюминесцентных измерений.

На рис. 1а представлены результаты математического моделирования полученного решения нестационарного уравнения диффузии экситонов (4), (5).



а



б

**Рис. 1.** а – рассчитанная концентрация экситонов  $c(r, t)$ ; б – сечения поверхности  $c(r, t)$  - зависимости  $c(r)$ , полученные для различных значений времени  $t = 0, 10, 20, 30, 40, 50$  с (сверху вниз); Вычисления проведены в 12-м приближении для параметров, характерных для нитрида галлия. Энергия электронов зонда 5 кэВ.

Время жизни экситонов принималось равным  $\tau = 271$  пс, коэффициент их диффузии  $D = 9$  см<sup>2</sup>/с. На рис. 16 представлены результаты математического моделирования для различных значений времени  $t = 0, 10, 20, 30, 40, 50$  с.

Затраты машинного времени на расчет концентрации экситонов с использованием проекционного Galerkin составили приблизительно 7 с, что говорит о вычислительной эффективности предложенного метода. Вычисления выполнялись в системе MATLAB (The MathWorks, Inc.) версии 7.5.0.342 на персональном компьютере со следующими характеристиками: процессор Intel Pentium E5400 (2 x 2.70 GHz, 2MB Cache), объем оперативной памяти – 2 GB.

**Выводы.** Представлены результаты моделирования двумерной диффузии экситонов в полупроводнике с использованием проекционного метода Galerkin, а также получена порядковая оценка погрешности невязки, соответствующей приближенному решению нестационарного уравнения диффузии. Предлагаемый критерий качества приближения (см. (8)) позволяет просто находить матрицу, определяющую приближенное решение рассматриваемой задачи, не прибегая к операциям дифференцирования и интегрирования, используя только алгебраические операции, что существенно сокращает время вычислений. При моделировании использовались параметры, характерные для нитрида галлия.

### Библиографический список

1. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. Оценка значений электрофизических параметров полупроводниковых материалов по результатам измерений катодоллюминесценции экситонов // Прикладная физика. 2012. № 6. С. 41-46.
2. Макаренков А.М., Серегина Е.В., Степович М.А. Проекционный метод Галеркина решения стационарного дифференциального уравнения диффузии в полубесконечной области // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2017. Т. 57. № 5. С. 57-69.
3. Суетин П.К. Классические ортогональные многочлены. – М.: Физматлит, 2005. 480 с.
4. Лапин С.В., Егупов Н.Д. Теория матричных операторов и ее приложение к задачам автоматического управления. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1997. 496 с.
5. Абилов В.А., Абилов М.В., Керимов М.К. Точные оценки скорости сходимости двойных рядов Фурье по классическим ортогональным многочленам // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2015. Т. 55. № 7. С. 1109-1117.
6. Лашенов В.К. Приближение дифференцируемых функций частными суммами ряда Фурье-Лагерра // Известия вузов. Математика. 1981. № 1(224). С. 44-57.

### METADATA

**Title:** On the possibility of using the Galerkin projection method for simulation the two-dimensional diffusion of excitons generated by an electron beam in a semiconductor material.

**Authors:** E.V. Seregina, A.N. Polyakov, M.A. Stepovich

**Abstract:** This paper covers the results of using the Galerkin projection method for modelling a two-dimensional diffusion of excitons, electron beam excited in a semiconductor material. The problem is solved in a cylindrical coordinate system. The required concentration of excitons was obtained in the form of partial sum double of Fourier series on system of modified Laguerre functions. The ordinal error estimation residuals were obtained corresponding to the approximate solution of the time-dependent diffusion. The simulation parameters were used for the gallium nitride.

**Key words:** semiconductor material; electron beam; concentration of excitons; Galerkin projection method.

## **О ПОСТРОЕНИИ КОНЕЧНО ЭЛЕМЕНТНОЙ АППРОКСИМАЦИИ УРАВНЕНИЯ ТРАНСПОРТА НАНОСОВ НА ОПТИМАЛЬНЫХ ГРАНИЧНО-АДАПТИВНЫХ СЕТКАХ<sup>\*\*\*</sup>**

*В.В. Сидорякина*

Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) РГЭУ (РИНХ),  
г. Таганрог, Россия

**Аннотация.** Одной из актуальных задач гидрофизики прибрежных и морских систем, от решения которых зависит решение ряда проблем водной экологии и безопасности водного транспорта, является задача моделирования (прогнозирования) транспорта наносов. Прибрежные системы характеризуются сложной формой береговой линии – наличием далеко выступающих кос, заливов сложной формы, которые, в свою очередь, влияют на структуру прибрежных течений и транспорт наносов близи берега. Использование прямоугольных сеток при построении дискретных моделей приводит к существенной погрешности, как в задании граничных условий, так и в моделировании гидрофизических процессов в прибрежной зоне. В работе рассматривается построение конечно-элементной аппроксимации начально-краевой задачи для пространственно-двумерного линейаризованного уравнения транспорта наносов на гранично-адаптивной сетке. Вначале выполняется линейаризация пространственно-двумерного нелинейного уравнения параболического типа на временной сетке – когда коэффициенты уравнения, нелинейным образом зависящие от функции рельефа (глубины) дна, задаются на предыдущем временном слое, а на первом временном слое - используются соответствующие начальные условия. Алгоритм построения сетки базируется на процедуре минимизации обобщенного функционала Дирихле. Ранее этот подход показал свою эффективность при построении невырожденных регулярных сеток, содержащих минимальное число ячеек (выпуклых четырехугольников) для тестовых областей Z-образной формы, типа «мальтийский крест» и др., а также при численном решении задач гидродинамики прибрежных систем, в том числе применительно к Азовскому морю. На построенной сетке выполнена аппроксимация методом конечных элементов с использованием билинейных базисных функций, что завершает построение дискретной модели для данной задачи.

**Ключевые слова:** пространственно-двумерная модель транспорта наносов, прибрежная зона, нелинейная задача, криволинейные оптимальные сетки.

**Введение.** Одной из существенных особенностей прибрежных и морских систем является сложная форма береговой линии, которая значительно затрудняет их математическое моделирование.

---

<sup>\*\*\*</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ по проектам № 15-01-08619, 16-07-00100, 15-07-08626, 15-07-08408 и по проекту № 00-16-13 в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № I.33П.



Использование прямоугольных, в общем случае, неравномерных сеток не позволяет с должной точностью учесть наличие протяженных прибрежных кос, узких водных объектов извилистой формы, таких как заливы, устья рек, проливы и пр. В то же самое время, наличие этих объектов в значительной мере определяет структуру прибрежных течений, в особенности, для мелководных водоемов Юга России, подобных Азовскому морю. Построение оптимальных криволинейных сеток, согласованных со сложной формой береговой линии (гранично-адаптивных сеток), как показывает практика численного решения задач данного класса, позволяет существенно повысить точность получаемого решения и/или уменьшить объем вычислений. В работе рассматривается построение конечно-элементной аппроксимации начально-краевой задачи для пространственно-двумерного линейаризованного уравнения транспорта наносов на гранично-адаптивной сетке. Вначале выполняется линейаризация пространственно-двумерного нелинейного уравнения параболического типа на временной сетке, когда коэффициенты уравнения, нелинейным образом зависящие от функции глубины дна, задаются на предыдущем временном слое. Обоснование данного способа линейаризации (корректности постановки задачи) и сходимости решений линейаризованной цепочки задач в норме пространства  $L_1$  при шаге временной сетки, стремящемся к 0, было обосновано в предыдущих работах авторов [1]–[6]. Алгоритм построения сетки базируется на процедуре минимизации обобщенного функционала Дирихле. Ранее этот подход показал свою эффективность при построении минимальных невырожденных сеток для тестовых областей Z-образной формы, типа «мальтийский крест» и др., а также при численном решении задач гидродинамики прибрежных систем, в том числе применительно к Азовскому морю [7] – [8]. На построенной сетке в данной работе выполнена аппроксимация методом конечных элементов с использованием билинейных базисных функций линейаризованной цепочки задач транспорта наносов применительно к Азовскому морю и Таганрогскому заливу.

**Постановка нелинейной начально-краевой задачи для двумерной модели транспорта наносов.** Следуя [9]–[11], рассматривается уравнение транспорта наносов:

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial H}{\partial t} = \operatorname{div} \left( k \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \operatorname{grad} H \right) - \operatorname{div} (k \bar{\tau}_b), \quad (1)$$

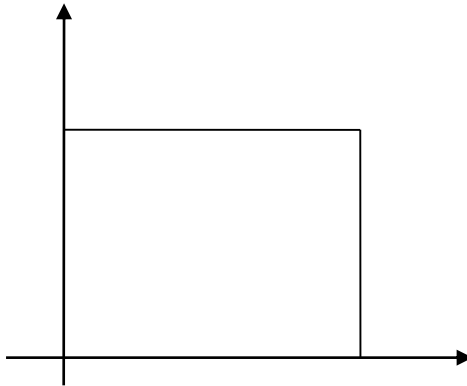
где  $H = H(x, y, t)$  – глубина водоема;  $\varepsilon$  – пористость донных материалов;  $\bar{\tau}_b$  – вектор касательного тангенциального напряжения на

дне водоема;  $\tau_{bc}$  – критическое значение тангенциального напряжения;  $\tau_{bc} = a \sin \phi_0$ ,  $\phi_0$  – угол естественного откоса грунта в водоеме;  $k = k(H, x, y, t)$  – нелинейный коэффициент, определяемый соотношением:

$$k \equiv \frac{A \omega d}{((\rho_1 - \rho_0) g d)^\beta} \left| \tau_b - \frac{\tau_{bc}}{\sin \phi_0} \text{grad} H \right|^{\beta-1}, \quad (2)$$

( $\rho_1, \rho_0$  – плотности частиц донного материала и водной среды соответственно;  $g$  – ускорение силы тяжести;  $\omega$  – частота волны;  $A$  и  $\beta$  – безразмерные постоянные;  $d$  – характерные размеры частиц грунта).

Пусть  $D \subset R^n$  – область, где происходит процесс, и  $S$  – ее граница, которая является кусочно-гладкой линией. Областью задания уравнения (1) считаем цилиндр  $C_T = D \times (0, T)$  высоты  $T$  с основанием  $D$  (рис. 1). Его граница состоит из боковой поверхности  $S \times [0, T]$  и двух оснований: нижнего  $\bar{D} \times \{0\}$  и верхнего  $\bar{D} \times \{T\}$ . Далее для простоты уравнение (1) рассматривается в прямоугольной области  $D(x, y) = \{0 < x < L_x, 0 < y < L_y\}$ .



**Рис. 1.** Область задания уравнения транспорта наносов

Дополним уравнение (1) начальным условием предполагая, что функция начальных условий принадлежит соответствующему классу гладкости:

$$H(x, y, 0) = H_0(x, y), H_0(x, y) \in C^2(D) \cap C(\bar{D}), \text{grad}_{(x,y)} H_0 \in C(\bar{D}), (x, y) \in \bar{D}. \quad (3)$$

Сформулируем условия на границе области  $\bar{D}$ :

$$\left. \bar{\tau}_b \right|_{y=0} = 0, \quad (4)$$

$$H(L_x, y, t) = H_2(y, t), \quad 0 \leq y \leq L_y. \quad (5)$$

$$H(0, y, t) = H_1(y, t), \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad (6)$$

$$H(x, 0, t) = H_3(x), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad (7)$$

$$H(x, L'_y, t) = H_4(x, t), \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad L'_y < L_y. \quad (8)$$

Дополнительно к граничным условиям (5)–(8) предполагаем выполнение условий их гладкости – существование непрерывных производных на границе области  $\bar{D}$ :

$$\text{grad}_{(x,y)} H \in C(\bar{D}_T) \cap C^1(U_T). \quad (9)$$

Считаем, что всегда есть слой жидкости конечной толщины в рассматриваемой области и для указанного временного промежутка не происходит осушения области, т.е.

$$H(x, y, t) \geq c_0 \equiv \text{const} > 0, \quad 0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L'_y, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (10)$$

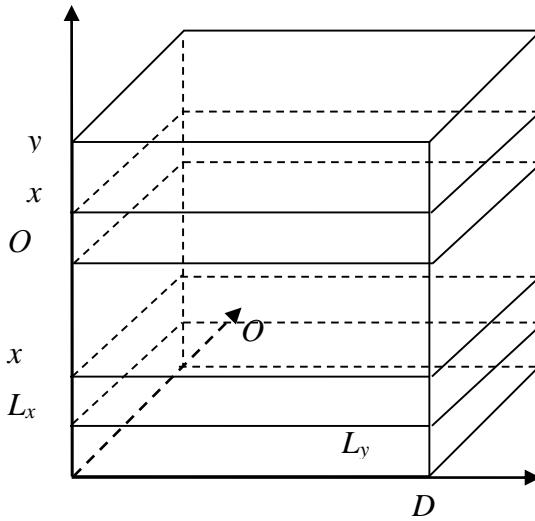
Условие невырожденности оператора задачи имеет вид:

$$k \geq k_0 = \text{const} > 0, \quad \forall (x, y) \in \bar{D}, \quad 0 < t \leq T. \quad (11)$$

Вектор тангенциального напряжения на дне выражается с использованием единичных ортов системы координат естественным образом:

$$\bar{\tau}_b = \tau_{bx} \bar{i} + \tau_{by} \bar{j}, \quad \tau_{bx} = \tau_{bx}(x, y, t), \quad \tau_{by} = \tau_{by}(x, y, t). \quad (12)$$

**Линеаризация уравнения транспорта наносов на временной сетке.** Будем полагать, что временной отрезок  $[0, T]$  разбит на временные слои значениями  $t_n, n = 1, \dots, N$  (рис. 2).



**Рис. 2.** Разбиение области переменной по времени

Значения искомой функции  $H(x, y, t)$  и коэффициента  $k$  дифференциального уравнения (1) на  $n$ -ом временном слое (т.е. при  $t = t_n$ ) будем обозначать  $H^n(x, y, t)$  и  $k^n$  соответственно. Указанные величины уже не зависят от времени  $t$ , но остаются функциями пространственных координат, т.е.  
 $H^n = H^n(x, y) = H^n(x, y, t_n)$ ,  $k^n = k^n(x, y) = k^n(x, y, t_n)$ .

Дальнейшее рассмотрение задачи проводим на двух временных слоях: нижнем  $t = t_{n-1}$ , на котором распределение искомой функции  $H(x, y, t)$ , известно (при  $n = 0$  распределение определяется начальным условием (3)  $H^0(x, y)$ ), и верхнем временном слое  $t = t_n$ , на котором распределение искомой функции –  $H^n(x, y)$ .

Рассуждения аналогичным образом повторяются для любого слоя  $t_n$ ,  $n = 1, \dots, N$ .

При  $t = t_n$  уравнение (1) запишем в виде:

$$(1-\varepsilon)\frac{\partial H^n}{\partial t} - \operatorname{div}\left(k^{n-1}\frac{\tau_{bc}}{\sin\varphi_0}\operatorname{grad}H^n\right) = -\operatorname{div}\left(k^{n-1}\bar{\tau}_b\right), \quad (13)$$

и дополним начальными условиями:

$$H^1(x, y, t_0) = H_0(x, y), H^n(x, y, t_{n-1}) = H^{n-1}(x, y, t_{n-1}), \quad (14)$$

$$(x, y) \in \bar{D}, n = 2, \dots, N.$$

Член вида  $\operatorname{div}\left(k^{n-1}\bar{\tau}_b\right)$  будет являться известной функцией правой части. Граничные условия (3)–(11) предполагаются выполненными для любого  $t = t_n, n = 1, \dots, N$ .

Будем также считать, что функции  $H_0(x, y)$  и  $H^1(x, y, t_0)$  из начальных условий (14) заданы своими значениями в узлах пространственной сетки.

Рассмотрим аппроксимацию дифференциального уравнения (13) по времени с использованием неявной схемы:

$$(1-\varepsilon)\frac{H^n - H^{n-1}}{\tau} = \operatorname{div}\left(k^{n-1}\frac{\tau_{bc}}{\sin\varphi_0}\operatorname{grad}H^n\right) - \operatorname{div}\left(k^{n-1}\bar{\tau}_b\right), n = 1, \dots, N, \quad (15)$$

где  $\tau = t^n - t^{n-1}$ .

Заметим, что после аппроксимации по времени, полученное уравнение (15) представляет собой уравнение эллиптического типа на верхнем временном слое  $t = t_n$ , которое перепишем в виде:

$$-\operatorname{div}\left(k^{n-1}\frac{\tau_{bc}}{\sin\varphi_0}\operatorname{grad}H^n\right) + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau}H^n = \frac{(1-\varepsilon)}{\tau}H^{n-1} - \operatorname{div}\left(k^{n-1}\bar{\tau}_b\right). \quad (16)$$

При дискретизации по времени на параметр  $\tau$  накладывается ограничение типа критерия Куранта.

**Построение дискретного аналога нестационарной задачи транспорта наносов с использованием метода конечных элементов.** Далее в расчетах используется оптимальная гранично-адаптивная сетка, построенная для акватории Азовского моря и Таганрогского залива. Построение сетки рассматривается как необходимый вспомогательный шаг в решении задачи транспорта наносов посредством МКЭ.

Для построения сетки применялись отображающие дифференциальные операторы и соответствующие им сеточные функционалы, описанные в работах [10]–[11].

В плоскости  $(x, y)$ , строится сетка  $\omega = \{(x_{i,j}, y_{i,j}), i = \overline{1, N_1}, j = \overline{1, N_2}\}$  по заданным координатам граничных узлов. Сеточная область разделяет

$D$  на элементарные подобласти в виде четырехугольников. Затем переходим от переменных  $x, y$  к переменным  $\xi, \eta$ , заданных в области  $\Xi$ , в которых элементарные подобласти станут «стандартными». На плоскости  $(\xi, \eta)$  строится сетка  $\tilde{\omega} = \{(\xi_{i,j}, \eta_{i,j}), i = \overline{1, N_1}, j = \overline{1, N_2}\}$ , которая определяется функциями  $x = x(\xi, \eta)$ ,  $y = y(\xi, \eta)$ , отображающими прямоугольник  $1 \leq \xi \leq N_1, 1 \leq \eta \leq N_2$  в плоскости  $(\xi, \eta)$  на криволинейный четырехугольник в плоскости  $(x, y)$ .

Для преобразований

$$(\xi, \eta) \rightarrow (x, y): x = x(\xi, \eta), y = y(\xi, \eta), \quad (17)$$

$$(x, y) \rightarrow (\xi, \eta): \xi = \xi(x, y), \eta = \eta(x, y), \quad (18)$$

потребуем отличия от нуля якобианов

$$J(\xi, \eta) = \frac{\partial x}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y}{\partial \xi}, \quad (19)$$

$$J(x, y) = \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x}. \quad (20)$$

Для удобства восприятия целесообразно представить локальное рассмотрение сеток, рассмотрев соответствующие ячейки  $\omega, \tilde{\omega}$ . Узлы ячейки из  $\omega$  зададим координатами  $(x_{i,j}, y_{i,j}), (x_{i,j+1}, y_{i,j+1}), (x_{i+1,j+1}, y_{i+1,j+1}), (x_{i+1,j}, y_{i+1,j})$  (рис. 3).

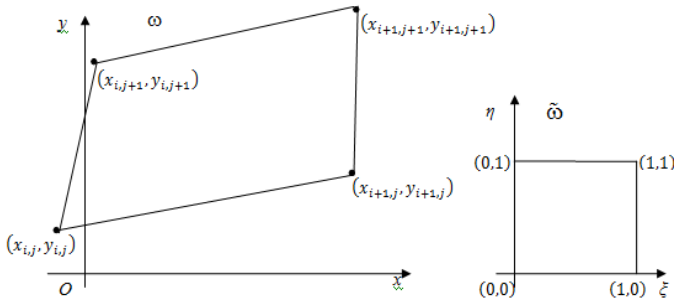


Рис. 3. Локальное изображение ячеек

Обход узлов с координатами  $(x_{i,j}, y_{i,j}), (x_{i,j+1}, y_{i,j+1}), (x_{i+1,j+1}, y_{i+1,j+1}), (x_{i+1,j}, y_{i+1,j})$  должен осуществляться

против часовой стрелки (при взгляде вдоль направления ускорения свободного падения).

Непрерывное преобразование  $(x, y) \rightarrow (\xi, \eta)$  определяется на каждой конкретной ячейке по формулам

$$\begin{aligned} x &= x(\xi, \eta) = x_{i,j} + (x_{i+1,j} - x_{i,j})\xi + (x_{i,j+1} - x_{i,j})\eta + \\ &+ (x_{i+1,j} - x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j} + x_{i,j})\xi\eta, \\ y &= y(\xi, \eta) = y_{i,j} + (y_{i+1,j} - y_{i,j})\xi + (y_{i,j+1} - y_{i,j})\eta + \\ &+ (y_{i+1,j} - y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j} + y_{i,j})\xi\eta. \end{aligned} \quad (21)$$

Ячейками служат выпуклые четырехугольники, где каждый из углов меньше  $\pi$ , что обеспечивает положительность якобиана

$$\begin{aligned} J(\xi, \eta) &= (x_{i+1,j} - x_{i,j} + (x_{i+1,j} - x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j} + x_{i,j})\eta) \cdot \\ &\cdot (y_{i+1,j+1} - y_{i,j} + (y_{i+1,j} - y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j} + y_{i,j})\xi) - \\ &- (x_{i+1,j+1} - x_{i,j} + (x_{i+1,j} - x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j} + x_{i,j})\xi) \cdot \\ &\cdot (y_{i+1,j} - y_{i,j} + (y_{i+1,j} - y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j} + y_{i,j})\eta) \end{aligned}$$

и вносит ограничения при выборе формы ячейки.

Пронумеровав вершины ячейки от 1 до 4 по часовой стрелке начиная с узла  $ij$ , обозначим удвоенные площади треугольников

$$\begin{aligned} J_{1,i,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}), \\ J_{2,i,j+1} &= (x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}), \\ J_{3,i+1,j+1} &= (x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1}) \cdot (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) - (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j+1}) \cdot (x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}), \\ J_{4,i+1,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}) \end{aligned} \quad (22)$$

или

$$\begin{aligned} J_{1,i,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}), \\ J_{2,i,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i,j} - y_{i,j-1}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i,j} - x_{i,j-1}), \\ J_{3,i,j} &= (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \cdot (y_{i,j} - y_{i,j-1}) - (y_{i,j} - y_{i-1,j}) \cdot (x_{i,j} - x_{i,j-1}), \\ J_{4,i,j} &= (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i,j} - y_{i-1,j}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}). \end{aligned}$$

$$\text{Для узла } (i, j) \text{ имеем } J_{ij} = \frac{1}{4}(J_1 + J_2 + J_3 + J_4)_{ij}.$$

Очевидно, что условие положительности якобиана  $J$ , эквивалентно положительности величин  $J_1, J_2, J_3, J_4$ . На границе построенных выпуклых сеток хотя бы одна из указанных величин будет равна нулю.

Процедура построения сеток связана с рассмотрением функционала Дирихле

$$I = \iint g dx dy = \iint \frac{g}{J} d\xi d\eta, \quad (23)$$

$$g = g_{11} + g_{22}, \quad g_{11} = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2 \quad \text{и} \quad g_{22} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y}\right)^2 -$$

компоненты метрического тензора преобразования координат.

Уравнения Эйлера для функционала (23) можно записать как систему нелинейных уравнений относительно искомых функций  $x = x(\xi, \eta)$ ,  $y = y(\xi, \eta)$ .

Дискретным аналогом функционала  $I$  служит функционал, получаемый суммированием по всем четырем углам (треугольникам, образующимся при разбиении четырехугольной ячейки ее диагоналями), всех ячеек сетки, т.е.

$$\begin{aligned} I^h = & \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M_1-1} \sum_{j=1}^{M_2-1} \left\{ \left[ \left( x_{i,j+1} - x_{i,j} \right)^2 + \left( y_{i,j+1} - y_{i,j} \right)^2 + \left( x_{i,j} - x_{i+1,j} \right)^2 + \left( y_{i,j} - y_{i+1,j} \right)^2 \right] \cdot J_{1,i,j}^{-1} + \right. \\ & + \left[ \left( x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1} \right)^2 + \left( y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1} \right)^2 + \left( x_{i,j+1} - x_{i,j} \right)^2 + \left( y_{i,j+1} - y_{i,j} \right)^2 \right] \cdot J_{2,i,j+1}^{-1} + \\ & + \left[ \left( x_{i+1,j} - x_{i+1,j+1} \right)^2 + \left( y_{i+1,j} - y_{i+1,j+1} \right)^2 + \left( x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1} \right)^2 + \left( y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1} \right)^2 \right] \cdot J_{3,i+1,j+1}^{-1} + \\ & \left. + \left[ \left( x_{i,j} - x_{i+1,j} \right)^2 + \left( y_{i,j} - y_{i+1,j} \right)^2 + \left( x_{i+1,j} - x_{i+1,j+1} \right)^2 + \left( y_{i+1,j} - y_{i+1,j+1} \right)^2 \right] \cdot J_{4,i+1,j}^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Выражение (24) может быть получено в результате замены  $x(\xi, \eta)$ ,  $y(\xi, \eta)$  в (23) на  $x^h(\xi, \eta)$ ,  $y^h(\xi, \eta)$  и аппроксимации квадратурными формулами интегралов по квадратным ячейкам в плоскости  $\xi, \eta$ .

Решение системы вида

$$\frac{\partial I^h}{\partial x_{i,j}} = 0, \quad \frac{\partial I^h}{\partial y_{i,j}} = 0 \quad (25)$$

дает хотя бы одно решение – выпуклую сетку. Для ее нахождения минимизируем функцию  $I^h$ .



Когда построена сетка на  $m$ -шаге итераций, то на  $(m+1)$ -м шаге она определяется из решения двух линейных уравнений, записанных для каждого внутреннего узла [12]:

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial J^h(m)}{\partial x_{i,j}} + \frac{\partial}{\partial x_{i,j}} \left( \frac{\partial J^h(m)}{\partial x_{i,j}} \right) (x_{i,j}^{(m+1)} - x_{i,j}^{(m)}) - \frac{\partial}{\partial y_{i,j}} \left( \frac{\partial J^h(m)}{\partial x_{i,j}} \right) (y_{i,j}^{(m+1)} - y_{i,j}^{(m)}) = 0, \\ \tau \frac{\partial J^h(m)}{\partial x_{i,j}} + \frac{\partial}{\partial x_{i,j}} \left( \frac{\partial J^h(m)}{\partial y_{i,j}} \right) (x_{i,j}^{(m+1)} - x_{i,j}^{(m)}) - \frac{\partial}{\partial y_{i,j}} \left( \frac{\partial J^h(m)}{\partial y_{i,j}} \right) (y_{i,j}^{(m+1)} - y_{i,j}^{(m)}) = 0, \end{cases} \quad (26)$$

где  $\tau$  – итерационный параметр,  $\tau = 1$ .

Заметим, что необходимым условием минимума функционала является следствие конформности рассматриваемого преобразования.

Минимизация  $I^h$  на множестве выпуклых сеток осуществлена посредством квазиньютоновской процедуры в расчетной области  $(\xi, \eta)$ .

Для этого целесообразно воспользоваться, хорошо зарекомендовавшими себя градиентными методами, опробованными и описанными в работе [6] применительно к акватории Азовского моря и Таганрогского залива.

Изменение знака, находящегося в знаменателях подынтегральных функций функционалов (23)–(24) якобиана  $J$ , приводит к разрывам 2-го рода, что для методов 2-го порядка (квазиньютоновская процедура) оказывается критичным. Для выхода из этой ситуации вблизи границы вырождения ( $J = 0$ ) преобразования координат производится замена  $J$  на

$$J' = \max(J, \varepsilon) = (J - \varepsilon)_+, \quad (27)$$

$\varepsilon$  – достаточно малое число,  $\varepsilon > 0$ .

Важно отметить, что при генерации сетки, с использованием вышеописанной процедуры, начальное приближение в виде выпуклой сетки задано. Если же это не так, то начальная сетка – выпуклая сетка определяется путем последовательного решения задач оптимизации.

Заметим, что поскольку ячейки с номерами, содержащими  $i=1, N_1$ ,  $j=1, N_2$  являются граничными, то для них положение узлов не оптимизируется. Потому дальнейшее рассмотрение задачи проводим на узлах  $i=2, N_1-1$ ,  $j=2, N_2-1$ .

Для наглядного представления дальнейших рассуждений представим (24) в виде:

$$\begin{aligned}
I^h = & \frac{1}{4} \sum_{i=2}^{N_1-1} \sum_{j=2}^{N_2-1} \left[ (x_{i,j+1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i,j} - y_{i+1,j})^2 \right] \cdot \\
& \cdot \left( (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}) \right)^{-1} + \\
& + \frac{1}{4} \sum_{i=2}^{N_1-1} \sum_{j=2}^{N_2} \left[ (x_{i+1,j} - x_{i,j})^2 + (y_{i+1,j} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i,j-1})^2 + (y_{i,j} - y_{i,j-1})^2 \right] \cdot \\
& \cdot \left( (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i,j} - y_{i,j-1}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i,j} - x_{i,j-1}) \right)^{-1} + \\
& + \frac{1}{4} \sum_{i=2}^{N_1} \sum_{j=2}^{N_2} \left[ (x_{i,j-1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j-1} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i-1,j})^2 + (y_{i,j} - y_{i-1,j})^2 \right] \cdot \\
& \cdot \left( (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \cdot (y_{i,j} - y_{i,j-1}) - (y_{i,j} - y_{i-1,j}) \cdot (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \right)^{-1} + \\
& + \frac{1}{4} \sum_{i=2}^{N_1} \sum_{j=2}^{N_2-1} \left[ (x_{i-1,j} - x_{i,j})^2 + (y_{i-1,j} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i,j} - y_{i,j+1})^2 \right] \cdot \\
& \cdot \left( (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i,j} - y_{i-1,j}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}) \right)^{-1}.
\end{aligned} \tag{28}$$

Введем обозначение

$$f(J_k) = \frac{1 + \left(1 - \frac{J_k}{J'_k}\right) + \left(1 - \frac{J_k}{J'_k}\right)^2}{J'_k} = \begin{cases} \frac{1}{J_k}, J_k \geq \varepsilon, \\ \frac{1 + \left(1 - \frac{J_k}{\varepsilon}\right) + \left(1 - \frac{J_k}{\varepsilon}\right)^2}{\varepsilon}, J_k \leq \varepsilon, k = \overline{1,4}. \end{cases} \tag{29}$$

Выражение (28) компактно может быть представлено в следующей форме:

$$I^{h*} = \sum_{i=2}^{N_1-1} \sum_{j=2}^{N_2-1} \{g_1 f(J_1) + g_2 f(J_2) + g_3 f(J_3) + g_4 f(J_4)\}_{i,j}, \tag{30}$$

где

$$\begin{aligned}
J_{1,i,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}), \\
J_{2,i,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \cdot (y_{i,j} - y_{i,j-1}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) \cdot (x_{i,j} - x_{i,j-1}), \\
J_{3,i,j} &= (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \cdot (y_{i,j} - y_{i,j-1}) - (y_{i,j} - y_{i-1,j}) \cdot (x_{i,j} - x_{i-1,j}), \\
J_{4,i,j} &= (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \cdot (y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i,j} - y_{i-1,j}) \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j}),
\end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned}
g_{1,i,j} &= \frac{1}{4} \left\{ (x_{i,j+1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i,j} - y_{i+1,j})^2 \right\}, \\
g_{2,i,j} &= \frac{1}{4} \left\{ (x_{i+1,j} - x_{i,j})^2 + (y_{i+1,j} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i,j-1})^2 + (y_{i,j} - y_{i,j-1})^2 \right\}, \\
g_{3,i,j} &= \frac{1}{4} \left\{ (x_{i,j-1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j-1} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i-1,j})^2 + (y_{i,j} - y_{i-1,j})^2 \right\}, \\
g_{4,i,j} &= \frac{1}{4} \left\{ (x_{i-1,j} - x_{i,j})^2 + (y_{i-1,j} - y_{i,j})^2 + (x_{i,j} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i,j} - y_{i,j+1})^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{32}$$

Решение системы алгебраических уравнений вида (25) для  $I^{h^*}$ , представляющей необходимое условие минимума функционала  $I^{h^*}$ , дает хотя бы одно решение (выпуклую сетку).

Далее, для минимизации  $I^{h^*}$  воспользовались такой же квазиньютоновской процедурой, как и при минимизации функции  $I^h$ .

Для определения компонент градиента дискретного функционала  $I^{h^*}$  представленного локально в точке  $(x_{i,j}, y_{i,j})$ , потребовались производные:

– для выражений  $J_1, J_2, J_3, J_4, g_1, g_2, g_3, g_4$  по переменной  $x$

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial J_1}{\partial x} \right)_{i,j} &= -(y_{i,j+1} - y_{i,j}) + (y_{i+1,j} - y_{i,j}) = y_{i+1,j} - y_{i,j+1}, \\
\left( \frac{\partial J_2}{\partial x} \right)_{i,j} &= -(y_{i,j} - y_{i,j-1}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j}) = y_{i,j} - y_{i+1,j}, \\
\left( \frac{\partial J_3}{\partial x} \right)_{i,j} &= (y_{i,j} - y_{i,j}) - (y_{i,j} - y_{i-1,j}) = y_{i-1,j} - y_{i,j-1}, \\
\left( \frac{\partial J_4}{\partial x} \right)_{i,j} &= (y_{i,j+1} - y_{i,j}) + (y_{i,j} - y_{i-1,j}) = y_{i,j+1} - y_{i-1,j},
\end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial g_1}{\partial x} \right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \left\{ (-x_{i,j+1} + x_{i,j}) + (x_{i,j} - x_{i+1,j}) \right\}, \\
\left( \frac{\partial g_2}{\partial x} \right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \left\{ (-x_{i+1,j} + x_{i,j}) + (x_{i,j} - x_{i,j-1}) \right\}, \\
\left( \frac{\partial g_3}{\partial x} \right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \left\{ (-x_{i,j-1} + x_{i,j}) + (x_{i,j} - x_{i-1,j}) \right\}, \\
\left( \frac{\partial g_4}{\partial x} \right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \left\{ (-x_{i-1,j} + x_{i,j}) + (x_{i,j} - x_{i,j+1}) \right\},
\end{aligned} \tag{34}$$

– по переменной  $y$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial J_1}{\partial y}\right)_{i,j} &= -(x_{i+1,j} - x_{i,j}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j}) = x_{i,j+1} - x_{i+1,j}, \\ \left(\frac{\partial J_2}{\partial y}\right)_{i,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) + (x_{i,j} - x_{i,j-1}) = x_{i+1,j} - x_{i,j-1}, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial J_3}{\partial y}\right)_{i,j} &= (x_{i+1,j} - x_{i,j}) - (x_{i+1,j} - x_{i+1,j-1}) = x_{i+1,j-1} - x_{i,j}, \\ \left(\frac{\partial J_4}{\partial y}\right)_{i,j} &= -(x_{i,j} - x_{i-1,j}) - (x_{i,j+1} - x_{i,j}) = x_{i-1,j} - x_{i,j}, \\ \left(\frac{\partial g_1}{\partial y}\right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \{(-y_{i,j+1} + y_{i,j}) + (y_{i,j} - y_{i+1,j})\}, \\ \left(\frac{\partial g_2}{\partial y}\right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \{(-y_{i+1,j} + y_{i,j}) + (y_{i,j} - y_{i,j-1})\}, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial g_3}{\partial y}\right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \{(-y_{i,j-1} + y_{i,j}) + (y_{i,j} - y_{i-1,j})\}, \\ \left(\frac{\partial g_4}{\partial y}\right)_{i,j} &= \frac{1}{2} \{(-y_{i-1,j} + y_{i,j}) + (y_{i,j} - y_{i,j+1})\}, \end{aligned}$$

– для функции  $f(J_k)$

$$(f'_k) = \frac{1 + 2 \left(1 - \frac{J_k}{J'_k}\right)}{(J'_k)^2} = \begin{cases} -\frac{1}{(J_k)^2}, & J_k \geq \varepsilon, \\ 1 + 2 \left(1 - \frac{J_k}{\varepsilon}\right), & J_k \leq \varepsilon, \quad k = \overline{1,4}. \end{cases} \quad (37)$$

С учетом полученных выражений, находим компоненты градиента функционала  $I^{h*} = \{g_1 f(J_1) + g_2 f(J_2) + g_3 f(J_3) + g_4 f(J_4)\}_{ij}$ ,

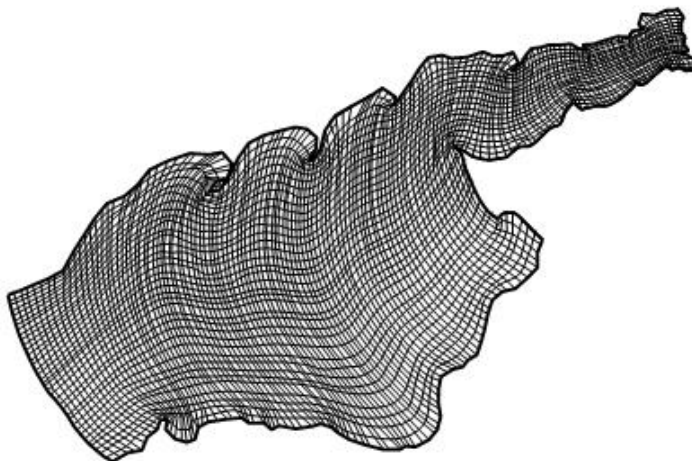
соответствующие декартовым координатам  $(x_{i,j}, y_{i,j})$  узла  $(i, j)$ :

$$\left(\frac{\partial I^{h*}}{\partial x}\right)_{i,j} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \sum_{k=1}^4 (g_k f(J_k))\right)_{i,j} = \left(\sum_{k=1}^4 \frac{\partial g_k}{\partial x} f(J_k) + g_k \frac{\partial f(J_k)}{\partial J_k} \frac{\partial J_k}{\partial x}\right)_{i,j}, \quad (38)$$

$$\left(\frac{\partial I^{h*}}{\partial y}\right)_{i,j} = \left(\frac{\partial}{\partial y} \sum_{k=1}^4 (g_k f(J_k))\right)_{i,j} = \left(\sum_{k=1}^4 \frac{\partial g_k}{\partial y} f(J_k) + g_k \frac{\partial f(J_k)}{\partial J_k} \frac{\partial J_k}{\partial y}\right)_{i,j}. \quad (39)$$

Выражения (38)–(39) определяются при подстановке в них соответствующих значений производных из (33)–(37).

На рис. 4 схематично представлена расчетная сетка (Азовское море – 200×80, Таганрогский залив – 108×40 узлов), число ячеек которой значительно превышает аналог предшественников.



**Рис. 4.** Построение сетки физической области

К сожалению, указанный метод не учитывает изменение глубины дна, которое, безусловно, повлечет сгущение сетки в некоторых зонах расчетной области. Это является предметом дальнейших исследований.

Решение краевой задачи (16), (14), (4)–(11) проведем, базируясь на методе конечных элементов.

Уравнение (16) запишем в виде

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(k^{n-1}\frac{\tau_{bc}}{\sin\varphi_0}\frac{\partial H^n}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(k^{n-1}\frac{\tau_{bc}}{\sin\varphi_0}\frac{\partial H^n}{\partial y}\right)\right)+\frac{(1-\varepsilon)}{\tau}H^n = \\ & =\frac{(1-\varepsilon)}{\tau}H^{n-1}-\left(\frac{\partial}{\partial x}(k^{n-1}\tau_{bx})+\frac{\partial}{\partial y}(k^{n-1}\tau_{by})\right) \end{aligned} \quad (40)$$

и отметим, что в новых координатах  $H^n \equiv H^n(x(\xi,\eta),y(\xi,\eta))$ ,  
 $H^{n-1} \equiv H^n(x(\xi,\eta),y(\xi,\eta))$ ,  $k^{n-1} \equiv k^{n-1}(x(\xi,\eta),y(\xi,\eta))$ .

Используя выражения для производных

$$\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad \frac{\partial H}{\partial y} = \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}$$

для (40) находим

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \left( g_{11} \frac{\partial H^n}{\partial \xi} + g_{12} \frac{\partial H^n}{\partial \eta} \right) \right\} - \\ & -\frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \left( g_{22} \frac{\partial H^n}{\partial \eta} + g_{12} \frac{\partial H^n}{\partial \xi} \right) \right\} + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} H^n = \quad (41) \\ & = \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} H^{n-1} - \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \left( (k^{n-1} \tau_{bx}) \frac{\partial \xi}{\partial x} + (k^{n-1} \tau_{by}) \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( (k^{n-1} \tau_{bx}) \frac{\partial \eta}{\partial x} + (k^{n-1} \tau_{by}) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right). \end{aligned}$$

Будем говорить, что функция  $v(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$  обладает конечной энергией на  $D$  (или является функцией с конечной энергией), если она интегрируема на  $D$  с квадратом.

Назовем пространством  $L^m$  множество функций  $v$ , которые вместе со всеми своими производными до  $m$ -го порядка включительно обладают конечной энергией на  $D$ .

Пусть  $L_E^1$  ( $L_E^2$ ) – пространство функций, имеющих первые (вторые) производные с конечной энергией (на что указывает верхний индекс) и удовлетворяющих первым краевым условиям на границе  $S$  области  $D$  (на что указывает нижний индекс  $E$ ).

Для правой части уравнения (41) предполагаем:

$$\left[ \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} H^{n-1} - \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \left( (k^{n-1} \tau_{bx}) \frac{\partial \xi}{\partial x} + (k^{n-1} \tau_{by}) \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( (k^{n-1} \tau_{bx}) \frac{\partial \eta}{\partial x} + (k^{n-1} \tau_{by}) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right) \right] \in L^0.$$

Будем искать решения задачи (41), (14), (4) – (11) в пространстве  $L_E^2$ .

Определим следующим образом скалярное произведение

$$(f, g) = \iint_D f(x, y) g(x, y) dx dy = \iint_{\Xi} f(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)) g(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)) J d\xi d\eta. \quad (42)$$

Уравнение (41) по правилу (42) скалярно умножим на произвольную функцию  $v(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)) \in L^1$ . Получим

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \left( g_{11} \frac{\partial H^n}{\partial \xi} + g_{12} \frac{\partial H^n}{\partial \eta} \right) \right\} - \right. \\
& \left. - \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \left( g_{22} \frac{\partial H^n}{\partial \eta} + g_{12} \frac{\partial H^n}{\partial \xi} \right) \right\} + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} H^n, v \right) = \\
& = \left( \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} H^{n-1} - \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \left( (k^{n-1} \tau_{bx}) \frac{\partial \xi}{\partial x} + (k^{n-1} \tau_{by}) \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( (k^{n-1} \tau_{bx}) \frac{\partial \eta}{\partial x} + (k^{n-1} \tau_{by}) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right), v \right)
\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}
& -g_{11} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H^n}{\partial \xi} \right) v J d \xi d \eta - g_{22} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H^n}{\partial \eta} \right) v J d \xi d \eta - \\
& -g_{12} \iint_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H^n}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H^n}{\partial \xi} \right) \right) v J d \xi d \eta + \\
& + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\Xi} H^n v J d \xi d \eta = \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\Xi} H^{n-1} v J d \xi d \eta - \frac{\partial \xi}{\partial x} \iint_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) v J d \xi d \eta - \\
& - \frac{\partial \xi}{\partial y} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{by}) v J d \xi d \eta - \frac{\partial \eta}{\partial x} \iint_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) v J d \xi d \eta - \frac{\partial \eta}{\partial y} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{by}) v J d \xi d \eta.
\end{aligned} \tag{43}$$

Рассмотрим аппроксимацию функций, определенных на многоугольной области  $D$ , с помощью кусочно линейных базисных функций. При этом область  $D$  будет разбита на треугольники (не обязательно прямоугольные) так, чтобы

1) каждая пара треугольников имела либо одну вершину, либо одну общую сторону, либо не пересекалась;

2) объединение треугольников составило  $D$ .

В результате вся область подвергнется триангуляции.

Определим набор кусочно линейных функций  $\{\varphi_{ij}(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))\}$

исходя из условий:

1.  $\varphi_{ij}(x_{i,j}(\xi, \eta), y_{i,j}(\xi, \eta)) = 1$ ;

2.  $\varphi_{ij}(x_{r,k}(\xi, \eta), y_{k,p}(\xi, \eta)) = 0$  во всех остальных узлах  $(x_{r,k}, y_{k,p})$ ;

3. функция  $\varphi_{ij}$  линейна на каждом треугольнике.

Носитель  $\omega_{ij}$  функции  $\varphi_{ij}$  представлен на рис. 5, а общий вид функции  $\varphi_{ij}$  – на рис. 6:

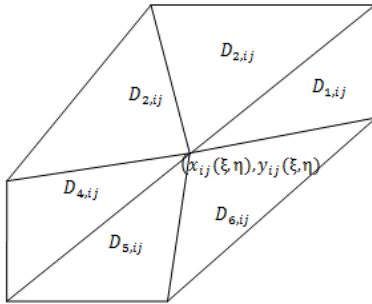


Рис. 5. Изображение носителя

$\varphi_{ij}$

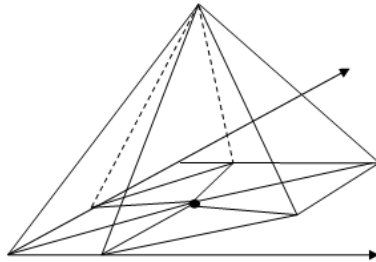


Рис. 6. Общий вид функции

$\varphi_{ij}$

Чтобы задать  $\varphi_{ij}$  аналитически, достаточно для каждого треугольника  $D_{k,ij}$ ,  $k = \overline{1,6}$  составить уравнение плоскости, проходящей через единицу в вершине одного из треугольников, а в остальных вершинах – через нуль.

Например, для треугольника  $D_{1,ij}$  функция  $\varphi_{ij}$  имеет вид

$$\varphi_{ij} = \left( 1 - \frac{y_i - y_{i+1,j+1}}{y_{i+1,j} - y_{i+1,j+1}} - \frac{x_i - x_{i+1,j}}{x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}} \right)^{-1} \left( 1 - \frac{y - y_{i+1,j+1}}{y_{i+1,j} - y_{i+1,j+1}} - \frac{x - x_{i+1,j}}{y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}} \right). \quad (44)$$

Аналогично выражению (44), определяются  $\varphi_{ij}$  на треугольниках  $D_{k,ij}$ ,  $k = \overline{2,6}$ .

Обозначим через  $V_E^{\mathbb{N}^6}$  множество непрерывных кусочно линейных функций, равных нулю на границе расчетной области  $S$ . Очевидно, что  $V_E^{\mathbb{N}^6}$  является конечномерным (размерности  $(N_1 - 1) \cdot (N_2 - 1) = \mathbb{N}^6$  – количество внутренних узлов) подпространством пространства  $L_E^1$ , а функции  $\varphi_{ij}$ , соответствующие внутренним узлам сетки  $i = 0, 1, \dots, N_1$ ,  $j = 0, 1, \dots, N_2$ , образуют базис пространства  $V_E^{\mathbb{N}^6}$ .

Приближенным решением задачи (43), (14), (5)–(13) назовем функцию  $H_{\mathbb{N}^6}^n(x, y, t_{n-1})$  пространства  $V_E^{\mathbb{N}^6}$  вида:



$$H_{\Phi_0}^n(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta), t_{n-1}) = \sum_{i=1}^{N_1-1} \sum_{j=1}^{N_2-1} z_{ij} \varphi_{ij}(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)), \quad (45)$$

удовлетворяющую уравнению

$$\begin{aligned} & -g_{11} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \xi} \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - g_{22} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \eta} \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \\ & -g_{12} \iint_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \xi} \right) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta + \\ & + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\Xi} H^n \varphi_{ij} J d\xi d\eta = \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\Xi} H^{n-1} \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \xi}{\partial x} \iint_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \\ & - \frac{\partial \xi}{\partial y} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{by}) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \eta}{\partial x} \iint_{\Xi} \left( \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \eta}{\partial y} \iint_{\Xi} \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{by}) \varphi_{ij} J d\xi d\eta. \end{aligned} \quad (46)$$

В выражении (45) коэффициентами  $z_{ij}$ ,  $i = 0, 1, \dots, N_1$ ,  $j = 0, 1, \dots, N_2$  являются неопределенные величины.

Поскольку  $\varphi_{ij}$  отлична от нуля лишь в шести треугольниках, прилегающих к узлу  $(x_{i,j}, y_{i,j})$ , интегрирование ведется только по объединению  $\omega_{ij}$  этих треугольников.

Тогда для (46) имеем

$$\begin{aligned} & -g_{11} \iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \xi} \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - g_{22} \iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \eta} \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \\ & -g_{12} \iint_{\omega_{ij}} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial H_{\Phi_0}^n}{\partial \xi} \right) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta + \\ & + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\omega_{ij}} H^n \varphi_{ij} J d\xi d\eta = \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\omega_{ij}} H^{n-1} \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \xi}{\partial x} \iint_{\omega_{ij}} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \\ & - \frac{\partial \xi}{\partial y} \iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{by}) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \eta}{\partial x} \iint_{\omega_{ij}} \left( \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \eta}{\partial y} \iint_{\omega_{ij}} \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{by}) \varphi_{ij} J d\xi d\eta. \end{aligned} \quad (47)$$

Для описания вычислительных процедур нахождения конечно элементных решений начально-краевой задачи для уравнения (47) удобно записать его матричный аналог:

$$\begin{aligned} & -A \cdot z + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} B \cdot z = C, \\ & z = (z_{ij}), \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned}
A &= (A_{ij,kl}), A_{ij,kl} = g_{11} \iint_{\omega_j} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial \varphi_{kl}}{\partial \xi} \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta + g_{22} \iint_{\omega_j} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial \varphi_{kl}}{\partial \eta} \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta + \\
&+ g_{12} \iint_{\omega_j} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial \varphi_{kl}}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( k^{n-1} \frac{\tau_{bc}}{\sin \varphi_0} \frac{\partial \varphi_{kl}}{\partial \xi} \right) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta, \\
B &= (B_{ij,kl}), B_{ij,kl} = \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\omega_j} \varphi_{kl} \varphi_{ij} J d\xi d\eta, \\
C &= (C_{ij,kl}), C_{ij,kl} = \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \iint_{\omega_j} H^{n-1} \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \xi}{\partial x} \iint_{\omega_j} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \\
&- \frac{\partial \xi}{\partial y} \iint_{\omega_j} \frac{\partial}{\partial \xi} (k^{n-1} \tau_{by}) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \eta}{\partial x} \iint_{\omega_j} \left( \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{bx}) \right) \varphi_{ij} J d\xi d\eta - \frac{\partial \eta}{\partial y} \iint_{\omega_j} \frac{\partial}{\partial \eta} (k^{n-1} \tau_{by}) \varphi_{ij} J d\xi d\eta, \\
&i, k = \overline{1, N_1}, j, l = \overline{1, N_2}.
\end{aligned}$$

Сеточное уравнение (48) фактически является СЛАУ для вектора неизвестных  $z$

$$\left( -A + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} \cdot B \right) \cdot z = C, \quad (49)$$

с глобальной матрицей жесткости вида  $\left( -A + \frac{(1-\varepsilon)}{\tau} B \right)$  [14].

Заметим, что после проведения последовательной вычислительной процедуры составления и решения уравнений (49) мы получим решение начально-краевой задачи на всех интересующих нас временных слоях  $n = 1, \dots, N$ .

**Заключение.** На оптимальной гранично-адаптивной сетке, построенной на основе минимизации обобщенного функционала Дирихле, методом конечных элементов сконструирована дискретная двумерная математическая модель для линеаризованной модели транспорта наносов в прибрежных системах, удовлетворяющая основным законам сохранения. Выполнена реализация конечно-элементной аппроксимации применительно к акватории Азовского моря и Таганрогского залива и, таким образом, подготовлена система конечно-элементных уравнений для последующего численного моделирования процессов транспорта наносов в прибрежных частях Азовского моря.

### **Библиографический список**

1. Сухинов А.И., Сидорякина В.В. Существование и единственность решения линеаризованной двумерной задачи транспорта наносов // Теория операторов, комплексный анализ и математическое моделирование: тезисы докладов XIII Международной научной конференции (пос. Дивноморское, 7-14 сентября 2016 г.), Владикавказ: ЮМИ ВНЦ РАН, 2016. С. 184–185.
2. Сухинов А.И., Сидорякина В.В. О единственности решения линеаризованной двумерной начально-краевой задачи транспорта наносов // Вестник Таганрогского института имени А.П. Чехова. 2016. № 2. С. 270–274.
3. Сухинов А.И., Сидорякина В.В., Сухинов А.А. Достаточные условия сходимости положительных решений линеаризованной двумерной задачи транспорта наносов // Вестник Донского государственного технического университета, №1(88), 2017. – С. 5–17.
4. Sidoryakina V.V., Sukhinov A.I. Well-posedness analysis and numerical implementation of a linearized two-dimensional bottom sediment transport problem // Computational Mathematics and Mathematical Physics 2017, Vol. 57, No. 6, pp. 978–994.
5. Сидорякина В.В., Сухинов А.И. Исследование корректности и численная реализация линеаризованной двумерной задачи транспорта наносов, Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 57:6 (2017), 985–1002; Comput. Math. Math. Phys., 57:6 (2017), 978–994.
6. Sukhinov A.I., Sidoryakina V.V., Sukhinov Andrey A. Sufficient convergence conditions for positive solutions of linearized two-dimensional sediment transport problem // Computational Mathematics and Information Technologies, vol. 1, № 1, pp. 21–35.
7. Васильев В.С., Сухинов А.И. Прецизионные двумерные модели мелких водоемов, Матем. моделирование, 15:10 (2003), С. 17–34.
8. Nikitina A.A., Semenyakina A.A. Mathematical modeling of eutrophication processes in Azov Sea on supercomputers // Computational Mathematics and Information Technologies, vol. 1, № 1, pp. 82–101.
9. Леонтьев И.О. Прибрежная динамика: волны, течения потоки наносов – М.: ГЕОС, 2001, 272 с.
10. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs// Mathematical Models and Computer Simulations, July 2014, Volume 6, Issue 4, pp 351–363.
11. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Двумерная гидродинамическая модель, учитывающая динамическое перестроение геометрии дна мелководного водоема // Известия ЮФУ. Технические науки. 2011. № 8 (121). С. 159–167.

12. Иваненко С.А., Построение невырожденных сеток, Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1988, том 28, номер 10, С. 1498–1506.

13. Марчук Г.И., Агошков В.И. Введение в проекционно-сеточные методы. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1981. – 416 с.

14. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. М.: Наука, 1989. – 432 с.

## METADATA

**Title:** About the construction of the finite element approximation of the bottom transportation equation for optimum border adaptive grids.

**Authors:** V. V. Sidoryakina

**Abstract:** One of the actual problems of hydrophysics of coastal and marine systems, the solution of which depends on the solution of a number of problems of water ecology and safety of water transport, is the problem of modeling (forecasting) bottom transportation. Coastal systems are characterized by a complex form of coastline - the presence of far protruding braids, complex gulfs, which, in turn, affect the structure of coastal currents and the transport of sediment near the shore. The use of rectangular grids in the construction of discrete models leads to significant errors in both the specification of boundary conditions and in the modeling of hydrophysical processes in the coastal zone. In this paper, we consider the construction of a finite-element approximation of the initial-boundary value problem for the spatially two-dimensional linearized equation of sediment transport on a boundary-adaptive grid. Firstly, the linearization of a spatially two-dimensional nonlinear parabolic equation on the time grid is performed in the case if the equation coefficients, which are nonlinearly dependent on the bottom relief function, are set on the previous time layer, and the corresponding initial conditions are used on the first time layer. The algorithm for constructing the grid is based on the procedure for minimizing the generalized Dirichlet functional. Earlier this approach showed its effectiveness in the construction of non-degenerate regular grids containing the minimal number of cells (convex quadrilaterals) for Z-shaped test regions, such as the "Maltese cross", etc., as well as in numerical solution of problems of hydrodynamics of coastal systems, including With reference to the Azov Sea. On the constructed grid, finite element approximation using bilinear basis functions is performed, which completes the construction of a discrete model for the given problem.

**Key words:** spatially two-dimensional sediment transport model, coastal zone, nonlinear problem, curvilinear optimal grids.

## АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О СОЛИТОНЕ СТОКСА КАК ДОКАЗАТЕЛЬСТВО РАННЕЕ ПОЛУЧЕННЫХ ОЦЕНОК ПОГРЕШНОСТИ\*

А.А. Соколова  
Уфимский Государственный Технический Университет,  
г. Уфа, Россия

**Аннотация.** Был разработан метод решения задачи о солитоне Стокса, позволяющий проверить оценки решения, полученного ранее. Использование предложенного в данной работе метода и расширенной мантиссы позволило уменьшить погрешность до  $10^{-16}$ .

**Ключевые слова:** солитон Стокса, фильтрация, краевые условия.

В XXI в. численные методы интенсивно применяются для моделирования и проектирования различных систем, создается и используется большое количество математических программных пакетов. Но, несмотря на это, вопрос *оценки их точности и достоверности* стоит очень остро.

Можно выделить несколько классов погрешностей: погрешность математического моделирования, погрешность исходных данных, погрешность округления при проведении арифметических операций, Погрешность численного метода, погрешность, вызванная «не идеальностью» исполнителя. Для повышения достоверности измерений и вычислений часто применяется прием, заключающийся в *повторных измерениях* или применении *нескольких различных методов* для решения одной и той же задачи. Датчики для измерения самых важных параметров обычно дублируют или утраивают. Результаты расчетов можно сравнить с решениями той же задачи, полученными другими методами.

Рассмотрим в качестве примера задачу об уединенной волне Стокса, решаемую многими исследователями. В табл. 1 представлены численные результаты, полученные разными авторами, по параметрам солитона Стокса. В скобках после чисел указаны погрешности в единицах последнего приведенного разряда там, где погрешность превышает эту единицу.

Следует отметить, что в цитируемых работах авторы, как правило, декларируют оценку погрешности на уровне единицы последнего приведенного разряда. Сравнение разных результатов показывает, что

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-07-00356).

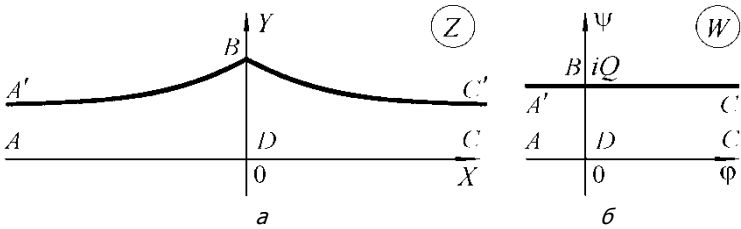
авторы часто ошибаются в оценке погрешности, причем иногда ошибаются в 10 – 100 раз.

Таблица 1  
Значения числа Фруда, полученные разными авторами

$Fr = 1.286$ (5)	Longuet-Higgins M.S., Fenton J.D. Proc. R. S. London. 1974. [4]
$Fr = 1.2909$	Fox M.J.H. Ph.D. thesis. Cambridge univ. 1977. [5]
$Fr = 1.290906$ (15)	Hunter J.K., Vanden-Broek J.-M. J.F.M. 1983. [6]
$Fr = 1.290889$ (1)	Williams J.M. Phil. Trans. Roy. Soc. London. 1981. [7]
$Fr = 1.29089053$ (7)	Evans W.A.B., Ford M.J. Proc. R. Soc. London 1996. [8]
$Fr = 1.290890455$	Шерыхалина Н.М. ВИНТИ. №2550-В95-деп. 1995 [9]
$Fr = 1.2908904558$	Maklakov D.V. Euro. Journal of Applied Mathematics. V. 13, 2002. [10]
$Fr = 1.29089045586$	Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Физика волновых процессов, № 2-3, 1998. [11]
$Fr = 1.2908904558634$	Sherykhalina N.M., Zhitnikov V.P. Computational Fluid Dynamics Journ. V. 10, N 3, 2001. [12]
$Fr = 1.29089045586335$	Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Уфа: Гилем. 2009. [13]

В данной работе использовался метод решения задачи о солитоне Стокса с использованием краевых условий, заданных в дифференциальном виде.

**Постановка задачи.** Пусть струя идеальной жидкости движется вдоль горизонтальной прямолинейной стенки  $ADC$  (рис. 1, *а*). Сила тяжести действует вертикально вниз. Рассматривается решение типа уединенной волны наибольшей амплитуды, при этом на вершине волны образуется излом с внутренним углом  $2\pi/3$  (волна Стокса). Скорость на бесконечности равна  $V_\infty$ , асимптотическая толщина струи –  $h$ . Давление  $p$  на свободной границе равно атмосферному  $p_0$ .



**Рис. 1.** Формы области, соответствующей течению, на плоскостях: *a* – физической; *б* – комплексного потенциала

На свободной поверхности  $A'BC'$  значение модуля вектора скорости течения  $V$  связано с высотой точки  $Y$  уравнением Бернулли при  $p = p_0$

$$\left(\frac{v}{v_0}\right)^2 + \frac{2y}{Fr^2 h} = const, \quad Fr = \frac{V_\infty}{\sqrt{gh}}. \quad (1)$$

где  $g$  – ускорение свободного падения,  $Fr$  – число Фруда.

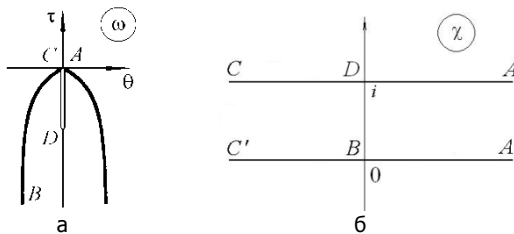
В качестве области изменения параметрического переменного удобно выбрать полосу  $\chi = \sigma + i\nu$  ширины 1 (рис. 2,б). Областью, соответствующей набегающему потоку на плоскости  $W$  является полоса (рис. 1,б), поэтому зависимость  $W(\chi)$  определяется формулой

$$W(\chi) = \phi + i\psi = Qw(\chi) = -Q(\chi - i), \quad (2)$$

где  $Q = hV_\infty$  – расход жидкости в струе.

Пусть  $Z = X + iY$ ,  $z = Z/h$ . Решение удобнее получить, если использовать плоскость логарифмического годографа скорости (функции Жуковского)

$$\omega = i \ln \frac{dw}{dz} = \theta + i\tau. \quad (3)$$



**Рис. 2.** Формы областей, соответствующих течению, на плоскостях: *a* – логарифмического годографа скорости; *б* – параметрического переменного

Функция  $\omega(\chi)$  должна удовлетворять следующим условиям:

1) при  $\operatorname{Re} \chi = 0, 0 < \operatorname{Im} \chi \leq 1$  действительная часть  $\operatorname{Re} \omega(\chi) = \theta = 0$ ;

2) при  $\operatorname{Im} \chi = 1$  действительная часть  $\operatorname{Re} \omega(\chi) = 0$ ;

3) при  $\operatorname{Im} \chi = 0$  действительная и мнимая части  $\omega(\chi)$  связаны уравнением (1);

4) при  $\chi = \sigma + i0, \sigma \rightarrow \pm 0$  действительная часть  $\operatorname{Re} \omega(\chi) \rightarrow \pm \frac{\pi}{6}$ ,

5) при  $\chi \rightarrow \infty$  величина  $\omega(\chi) \rightarrow 0$ .

**Численно-аналитический метод решения (видоизмененный метод Леви – Чивиты).** Представим  $\omega$  в виде суммы

$$\omega(\chi) = \omega_1(\chi) + \omega_2(\chi),$$

где  $\omega_2(\chi)$  – функция, удовлетворяющая условиям 1, 2, 4, 5. В результате такого представления  $\omega_1(\chi) \rightarrow 0 + i\tau_1(0)$  при  $\chi \rightarrow 0$ , т.е. функция  $\omega_1(\chi)$  является непрерывной на границе.

Функция  $\omega_1(\chi)$  получается следующим образом. Будем искать решение на границе  $\chi = \sigma$  в узловых точках  $\sigma_m (m=0, \dots, n)$ . Искомыми будут значения  $\operatorname{Re} \omega_1(\sigma_m) = \theta_m$ . Значения  $\operatorname{Re} \omega_1(\sigma)$  в точках, промежуточных между узловыми, найдем с помощью кубического сплайна, имеющего две непрерывные производные. Для восстановления функции  $z_1(\chi)$  используем формулу Шварца с учетом того, что  $\operatorname{Re} \omega_1(\sigma + i0)$  – нечетная функция  $\sigma$  и  $\operatorname{Re} \omega_1(\sigma + i) = 0$

$$\omega_1(\chi) = -i \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \omega_1(\sigma) \frac{\operatorname{sh} \pi \sigma}{\operatorname{ch} \pi \sigma - \operatorname{ch} \pi \chi} d\sigma.$$

Численное интегрирование производится по двухточечной квадратурной формуле Гаусса 4-го порядка точности.

**Краевые условия в дифференциальном виде.** Уравнение (1) представим в дифференциальной форме

$$e^{3\tau} \frac{d\tau}{d\sigma} - \frac{1}{Fr^2} \sin \theta = 0.$$

Для выделения особенности в точке  $\chi = 0$  определим функцию

$$f(\chi) = \frac{1 - e^{-\pi\chi}}{(1 + ie^{-\pi\chi/2})^2}.$$



Функцию  $\omega_2(\chi)$  представим в виде

$$\omega_2(\chi) = \frac{i}{3} \ln f(\chi) + iC_1 \left[ (f(\chi))^\beta - 1 \right] = \frac{i}{3} \ln \frac{1 - e^{-\pi\chi}}{(1 + ie^{-\pi\chi/2})^2} + iC_1 \left( \frac{1 - e^{-\pi\chi}}{(1 + ie^{-\pi\chi/2})^2} \right)^\beta - iC_1.$$

При подстановке (6) в (5) и приравнивании значений одного порядка  $O(1)$  и  $O(\sigma^\beta)$  получаются следующие уравнения

$$C_1 - \tau_1(0) = -\frac{1}{3} \ln \left( \frac{3}{\pi Fr^2} \right), \quad (7)$$

$$(\beta + 1) \operatorname{ctg} \frac{\pi\beta}{2} = \frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (8)$$

При решении уравнения (8) определяется значение  $0 < \beta < 1$ .

Форма свободной поверхности определяется с помощью численного интегрирования выражения

$$\frac{dZ}{h} = dz = dx + idy = e^{i\omega} dw = -e^{i\omega(\chi)} d\chi.$$

Для численного интегрирования применялась формула средних прямоугольников с последующей фильтрацией до достижения точности порядка  $10^{-16}$ .

### **Численное решение и обработка результатов.**

Отличительной особенностью данного метода является использование при численном решении условия (5) вместо условия (1).

Численно задача решалась методом коллокаций. Требовалось выполнение уравнения (5) в узловых точках  $\sigma_m (m = 1, \dots, n-1)$  и уравнения (7). Полученная при этом система  $n$  нелинейных уравнений решалась относительно параметров  $Fr, C_1, \theta_m (m = \overline{1, n-2})$  методом Ньютона с регулированием шага путем минимизации суммы квадратов невязок по всем уравнениям. Поиск решения прекращался, когда невязки по модулю не превышали  $10^{-30}$ . Для решения использовались числа с длиной мантиссы около 35 десятичных разрядов.

Для оценки погрешности и уточнения численных результатов использовалась численная фильтрация данных, полученных для различного количества точек коллокаций  $n$ , на основе априорной модели зависимости результата вычисления  $z_n$  искомой величины  $z$  от параметра  $n$  [1]:

$$z_n = z + c_1 n^{-k_1} + c_2 n^{-k_2} + K + c_L n^{-k_L} + \Delta(n). \quad (9)$$

С помощью фильтрации удалось подавить несколько регулярных компонент и уменьшить погрешность искомого параметра  $Fr$ .

В качестве формулы фильтрации применялась комбинация формул Эйткена и Ричардсона. При этом  $k_j$  определялись с помощью формулы

Эйткена  $Q^k \approx \frac{z_{n_{j-1}}^{(j-1)} - z_{n_{j-2}}^{(j-1)}}{z_{n_j}^{(j-1)} - z_{n_{j-1}}^{(j-1)}}$  при  $Q=2$ , что позволило обнаружить значения  $k_j = 4, 5, 6$ . Затем применялась формула фильтрации [1]

$$z_{n_j}^{(j)} = z_{n_j}^{(j-1)} + \frac{z_{n_j}^{(j-1)} - z_{n_{j-1}}^{(j-1)}}{Q^{k_j} - 1}. \quad (10)$$

Результаты фильтрации и оценки погрешности приведены на рис. 3 в виде графиков зависимостей логарифмов оценок погрешностей  $-\lg \Delta$  (точности данных) от десятичного логарифма числа точек коллокаций  $\lg n$ .

Результаты непосредственных вычислений (кривая 0) и результаты 1-й и 2-й фильтрации этой зависимости (кривые 1 и 2) образуют линии, близкие к отрезкам прямых, если слагаемые в сумме (1) имеют степенной вид и существенно отличаются по величине. Оценки погрешностей получались в виде разности вычисленных или отфильтрованных результатов с выбранным значением эталона  $\Delta = |z_{n_j}^{(j)} - z_{et}|$ . Видно, что с помощью фильтрации (исключения основной компоненты (1) четвертого порядка) точность порядка 16 значащих цифр может быть достигнута при  $n=5120$ . Результаты второй фильтрации (линия 2) используется только для подтверждения полученной оценки [1].

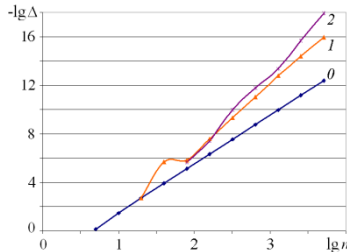
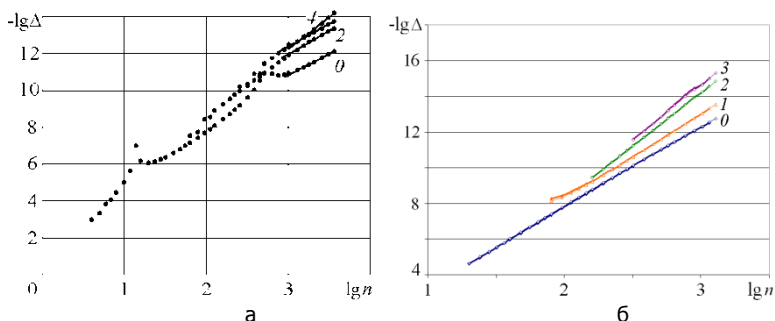


Рис. 3. Результаты фильтрации числа Фруда

**Анализ и проверка предшествующих результатов.** Для проверки оценок, полученных ранее, было необходимо применить другой метод и получить независимые результаты. Для этого и был разработан метод, изложенный в данной работе. В работе [2] была декларирована точность полученного значения числа Фруда порядка 13-ти разрядов.

Позже в [1] был применен другой метод фильтрации, и точность доведена до 14-ти десятичных цифр. В [3] были применены другие методы вычисления и фильтрации, погрешность была декларирована на уровне 2 единиц 15-го разряда.

На рис. 4, а, б представлены результаты фильтрации данных, полученных этими методами решения задачи. Использование предложенного в данной работе метода и расширенной мантиссы позволило уменьшить погрешность до  $10^{-16}$  (рис. 3). Сравнение со значением, полученным в [3], показало отличие около  $-1,5 \cdot 10^{-15}$ .



**Рис. 4.** Результаты фильтрации числа Фруда: а – согласно [1]; б – согласно [2]

Тем самым, оценки, полученные ранее, были подтверждены, и получено новое значение числа Фруда, равное

$$Fr = 1,2908904558633395 \pm 10^{-16}.$$

### Библиографический список

1. Житников В. П., Шерыхалина Н.М. Моделирование течений вязкой жидкости с применением методов многокомпонентного анализа. Уфа: Гилем. 2009. – 336 с.
2. Sherykhalina N.M., Zhitnikov V.P. Application of extrapolation methods of numerical results for improvement of hydrodynamics problem solution // Computational Fluid Dynamics Journ. Vol. 10, No. 3, 2001, pp. 309-314.
3. Zhitnikov V. P., Sherykhalina N.M., Sokolova A.A. Problem of Reliability Justification of Computation Error Estimates. Mediterranean Journal of Social Sciences, 2015, Vol. 6, No. 2, pp. 65 – 78.

4. Longuet-Higgins M.S., Fenton J.D. On the mass, momentum, energy and circulation of the solitary wave // Proc. R. Soc. Lond. 1974. V.340. P. 471-493.
5. Longuet-Higgins M.S., Fenton J.D. On the mass, momentum, energy and circulation of the solitary wave // Proc. R. Soc. Lond. 1974. V.340. P. 471-493.
- Hunter J.K., Vanden-Broek J.-M. Accurate computations for steep solitary waves. J. Fluid. Mech., 1983. V. 136. P. 63 – 71.
6. Williams J.M. Limiting gravity waves in water of finite depth. Phil. Trans. Roy. Soc. Lond, 1981. A302. N1466. P. 139 – 188.
7. Evans W.A.B., Ford M.J. An exact integral equation for solitary waves (with new numerical results for some internal properties). Proc. R. Soc. London, 1996. A 452. P. 373 – 390.
8. Fox M.J.H. Ph.D. thesis. Cambridge Univ. 1977.
9. Шерыхалина Н.М. Разработка численных алгоритмов решения задач гидродинамики с особыми точками на свободной поверхности и экспериментальное исследование скорости их сходимости // Деп. в ВИНТИ №2550-В95.
10. Maklakov D.V. Almost-highest gravity waves on water of finite depth // Euro Journal of Applied Mathematics, 2002. 13. 67 – 93.
11. Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Расчет формы уединенных волн с помощью численно-аналитических методов // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 1998. Т.1. № 2-3. С. 103 – 107.
12. Sherykhalina N.M., Zhitnikov V.P. Application of extrapolation methods of numerical results for improvement of hydrodynamics problem solution // Computational Fluid Dynamics Journ. V. 10. N 3. 2001. P.309 – 314.
13. Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Многокомпонентный анализ численных результатов // LAP LAMBERT Academic Publishing, Germany, 2012. 389 с.

## METADATA

**Title:** An alternative solution method of soliton stokes problem as the evidence of previously obtained error estimates.

**Authors:** A.A. Sokolova.

**Abstract:** A method has been developed for the solution the Stokes soliton, which can check the evaluation of solutions, obtained earlier. Due to the using the proposed in this paper method and the extended mantissa we reduced the uncertainty to 10-16.

**Key words:** Stokes soliton, filtering, boundary conditions.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ЗОНЕ АРКТИЧЕСКОГО ШЕЛЬФА В ПРИСУТСТВИИ ТОРОСОВ

П.В. Стогний<sup>1</sup>, Д.И. Петров<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский Физико-технический институт  
(Государственный университет)

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт автоматизации проектирования РАН,  
г. Долгопрудный, Россия

**Аннотация.** Целью данной работы является моделирование волновых процессов в зоне Арктического шельфа в присутствии ледовых образований – торосов. В работе представлен результат применения сеточно-характеристического метода к моделированию трехмерных задач сейсморазведки в средах с линейно-упругими и акустическими слоями.

**Ключевые слова:** численное моделирование; сейсморазведка в условиях Арктики; торосы; сеточно-характеристический метод.

**Введение.** В зоне Арктики в настоящее время расположены большие запасы углеводородов. Данные запасы нуждаются в уточнении. Проведение геологоразведочных работ в данном регионе требует больших затрат в связи с суровыми климатическими условиями. Именно поэтому моделирование волновых процессов в зоне Арктического шельфа [1] является крайне важной задачей.

**Математическая модель.** В работе представлены модели следующих сред: морской воды, грунта, нефтесодержащего слоя, ледовых образований – торосов. Слой грунта и ледовые образования описываются с помощью уравнений линейной упругости [2]:

$$\rho \dot{v}_i = -\nabla p \quad (1)$$

$$p_i = -c^2 \rho (\nabla \cdot \dot{v}) \quad (2)$$

Для описания слоя морской воды и нефтесодержащего включения решалась акустическая система уравнений:

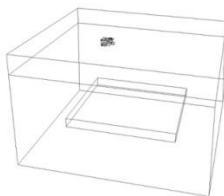
$$\rho \partial_i \dot{v}^j = (\nabla \cdot \sigma)^j \quad (3)$$

$$\partial_i \sigma^j = \rho (c_p^2 - 2c_s^2) (\nabla \cdot \dot{v}) \mathbf{I} + \rho c_s^2 (\nabla \otimes \dot{v}^j + (\nabla \otimes \dot{v})^j) \quad (4)$$

Для численного решения уравнений (1), (2) и (3), (4) использовался сеточно-характеристический метод [3, 4], который позволяет корректно описывать контактные и граничные условия. Расчеты всех моделей данной работы были реализованы с помощью схемы Русанова 3-го порядка точности.

**Модели с торосами.** Были проведены численные эксперименты по решению задач сейсморазведки в условиях Арктики. Рассматривались модели, состоящие из слоев: вода, грунт, торосы [5]. Для сравнения брались модели с нефтесодержащим включением и без него. Рассматривались модели с разным количеством торосов, а также с разной постановкой системы источник-приемники.

На рис. 1 представлено схематичное изображение модели с одним торосом и нефтесодержащим включением, расположенным в слое грунта. На рисунке представлены слои: морская вода, грунт, нефтесодержащий слой, лед (торос).



**Рис. 1.** Схематичное изображение модели

В работе представлены волновые картины, которые позволяют увидеть действительную картину происходящего в каждом из слоев модели, а также волновые отклики от каждого слоя.

Главной задачей данной работы является сравнительный анализ сейсмограмм для каждой модели. Сейсмограмма для модели из рис. 1 представлена на рис. 2.



**Рис. 2.** Сейсмограмма для модели, состоящей из слоев: вода, грунт, нефтесодержащий слой, лед(торос)

На сейсмограмме из рис. 2 отчетливо видны отклики от каждого из слоев, присутствующих в модели. В дальнейшем, при сравнении сейсмограмм для моделей с разным количеством торосов и присутствием или отсутствием нефтесодержащего слоя, будут сделаны выводы о том, что торосы не оказывают существенного влияния на получение

сейсмограмм. Это говорит о том, что сеточно-характеристический метод, использованный при расчете моделей с торосами, является эффективным методом для расчета задач в условиях Арктики в присутствии ледовых образований – торосов.

**Заключение.** В данной работе были решены задачи сейсмической разведки в условиях Арктического шельфа в присутствии ледовых образований – торосов. Проведены расчеты по влиянию торосов на волновые картины в присутствии или отсутствии нефтесодержащего слоя. Приведен анализ сейсмограмм моделей, анализ откликов от сред с различной плотностью и скоростью звука.

### **Библиографический список**

1. Петров, И. Б. Воздействие льда и воды на оффшорные структуры и прибрежные зоны в Арктике / И.Б. Петров. // Сборник трудов Научной сессии общего собрания членов РАН, 16 декабря 2014г. – М.:Наука, 2015.

2. LeVeque, R. Finite volume methods for hyperbolic problems / R. LeVeque // Cambridge University Press. – 2002.

3. Голубев, В.И. Численное моделирование сейсмической активности сеточно-характеристическим методом / В.И. Голубев, И.Б. Петров, Н.И. Хохлов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2013. – №10. – С. 1709 – 1720.

4. Магомедов, К.М. Сеточно-характеристические численные методы / К.М. Магомедов, А. С. Холодов // М.:Наука, 1988.

5. Гольдштейн, Р.В. Механика разрушения льда и некоторые ее приложения / Р.В. Гольдштейн, Н.М. Осипенко // Вестник Новосибирского государственного университета. – 2012. – №4. – С. 42 – 48. – (Математика, механика, информатика).

### **METADATA**

**Title:** Modeling of wave processes in the arctic with the presence of ice ridges.

**Authors:** P.V. Stognii, D.I. Petrov

**Abstract:** The paper covers the numerical modeling of wave processes in the Arctic region with the presence of ice constructions – ice ridges. This work represents the results of applying the grid-characteristic method to modeling 3D problems of seismic prospecting in linear-elastic and acoustic media.

**Key words:** numerical modeling; Arctic seismic prospecting; ice ridges; grid-characteristic method.

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МНОГОКАНАЛЬНЫХ КОСМИЧЕСКИХ СНИМКОВ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ «ЦВЕТЕНИЯ» ФИТОПЛАНКТОННЫХ ВОДОРΟΣЛЕЙ В МЕЛКОВОДНЫХ ВОДОЕМАХ НА СУПЕР-ЭВМ\*

А.И. Сухинов<sup>1</sup>, А.В. Никитина<sup>2</sup>, А.Е. Чистяков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Донской государственный технический университет,

<sup>2</sup>Южный федеральный университет,

Ростов-на-Дону, Россия

**Аннотация.** Целью работы является разработка и исследование математической модели процессов «цветения» фитопланктонных водорослей, вызывающих заморные явления в мелководных водоёмах на основе современных информационных технологий и вычислительных методов. Для калибровки и верификации разработанной модели использовались экспедиционные данные и многоканальные космические снимки дистанционного зондирования Земли, полученные НИЦ «Планета». При параллельной реализации были использованы методы декомпозиции сеточных областей для вычислительно трудоёмких задач, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы.

**Ключевые слова:** математическая модель, «цветение» фитопланктона, заморные явления, многоканальные космические снимки, супер-ЭВМ, параллельные алгоритмы.

**Введение.** Мелководные водоёмы испытывают большую антропогенную нагрузку, со стоком рек в них поступают биогенные вещества, вызывающие всплеск роста водорослей – «цветение». Явление замора рыбы периодически возникает летом в мелководных водоёмах, потому что в них из-за высоких температур происходит значительное понижение содержания растворённого кислорода, расходуемого на разложение органики [1, 2].

Для реконструкции процесса «цветения вод», вызвавшего замор рыбы в Юго-Восточной части Азовского моря в июле 2013 года, была разработана пространственно-неоднородная математическая 3D модель. Для контроля качества моделирования процессов в работе используются результаты спутникового мониторинга Земли, полученные НИЦ «Планета» [3].

---

\* Работа выполнена при поддержке РФФ, проект N 17-11-01286.



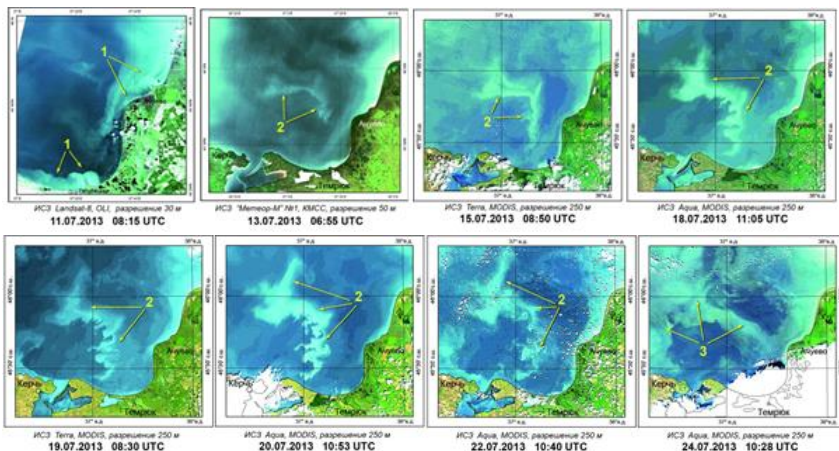


Цветосинтезированные изображения Азовского моря  
(спектральные каналы 0,620-0,670 нм, 0,545-0,565 нм, 0,459-0,479 нм)

**Рис. 1.** Обширные зоны «цветения вод» в Азовском море

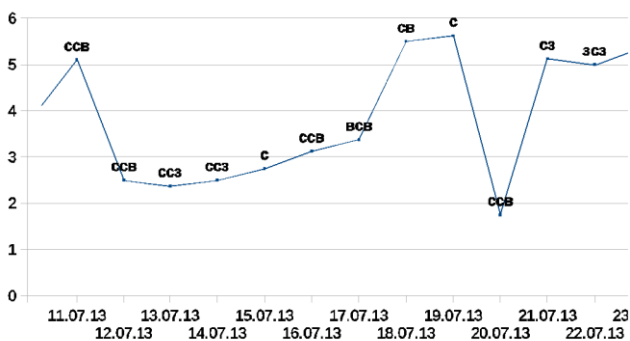
Анализ многоканальных космических снимков позволяет выявлять участки водоема, наиболее подверженные заморным явлениям.

На рис. 2 можно отследить динамику развития явления «цветения вод», вызвавшего замор рыбы в юго-восточном секторе Азовского моря 16 июля 2013 г. На рисунке 2 приняты обозначения: 1 – вынос речных или лиманных вод из рукавов и гирл дельты р. Кубани; 2 – зона «цветения вод»; 3 – воды повышенной степени мутности после ветроволнового разрушения зоны «цветения вод».



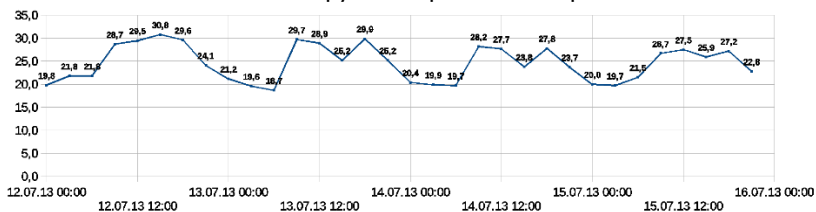
**Рис. 2.** Динамика развития процесса «цветения вод» в Азовском море

Информация о скорости и направлении ветра в Темрюкском заливе в июле 2016 года, предоставленная метеостанцией в г. Керчь (WMO\_ID 33983) и изображенная на рис. 3, использовались для нее в качестве входных данных



**Рис. 3.** Скорость и направления ветра в июле 2013 года

На рис. 4. представлены данные по температуре воды в расчетной области на моделируемый временной период.



**Рис. 4.** Температура воды в июле 2013 года

Для анализа состояния вод Азовского моря в работе использовались классы, описанные Институтом охраны природы и заповедного дела Минэкологии России, представленные в табл. 1, с принятыми обозначениями: 1 – трофность, класс качества, характер сапробности, параметры; 2 – олиготрофия, очень чистые, ксеносапробность (I); 3 – мезотрофия, чистые, бетаолигосапробность (II); 4 – мезотрофия умеренно загрязненные, альфаолигосапробность (III); 5 – эвтрофия, загрязненные, бетамезосапробность (IV); 6 – политрофия, грязные, альфамезосапробность (V); 7 – гиперэвтрофия, очень грязные, полисапробность (VI); \*) – проточные водоемы; \*\*) – непроточные водоемы; \*\*\*) – возможны более высокие значения.

Таблица 1  
 Параметры и алфавит классов оценки состояния водных экосистем.

1	2	3	4	5	6	7
Прозрачность воды по диску Секки, м, *) (**)	3 6	0,7-3 4	0,5-0,7 4	0,3-0,5 2	0,1-0,3 1	0,05-0,1 0,5
Удельная электропроводность воды, мкс/см *) (**)	>400 150	700 250	700 300***	1100 500	1300 1000	1600 1000
Индекс сапробности Фитопланктона по Ватанабе	85-100	70-85	50-70	30-50	15-30	0-15
Концентрация Cl «а», мкг/л, **)	3	8	8	15	30	60
Биомасса фитопланктона, мг/л	0-0,1	0,1-0,5	0,5-1,0	1,0-5,0	5,0-50,0	50-100
Валовая суточная продукция фитопланктона, гО/кв.м	0-1,5	1,5-3	3-4,5	4,5-7,5	7,5-10,5	10,5-12
Индекс Шеннона Н.	0-4	1-4,5	0-5	0-5	1,5-4,5	0-4
Область изменения Н. Н мин. – Н макс.	0-1,5 3-4	1-2 4-4,5	0-2 4,5-5	0-2 4,5-5	1,5-2 4-4,5	0-1,5 2-4

**Математическая модель процессов цветения вод мелководного водоема.** Пространственно-неоднородная модель цветения вод (ЦВ) описывается уравнениями:

$$S'_{i,t} + u \frac{\partial S_i}{\partial x} + v \frac{\partial S_i}{\partial y} + (w - w_{gi}) \frac{\partial S_i}{\partial z} = \mu_i \Delta S_i + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_i \frac{\partial S_i}{\partial z} \right) + \psi_i. \quad (1)$$

(1) – уравнения изменения концентрации примесей, индекс  $i$  указывает на вид субстанции,  $S_i$  – концентрация  $i$ -й примеси,  $i = \overline{1,6}$ ; 1 – общий органический азот ( $N$ ); 2 – фосфаты ( $PO_4$ ); 3 – фитопланктон; 4 – зоопланктон; 5 – растворенный кислород ( $O_2$ ); 6 – сероводород ( $H_2S$ );  $u, v, w$  – составляющие вектора скорости водного потока;  $\psi_i$  – химико-биологический источник (сток) или слагаемое, описывающее агрегирование (слипание-разлипание), если соответствующая компонента является взвесью.

Опишем расчетную область  $\bar{G}$ , схема которой представлена на рис. 5, представляющую собой замкнутую область, ограниченную невозмущенной поверхностью водоема  $\Sigma_0$ , дном  $\Sigma_H = \Sigma_H(x, y)$  и цилиндрической поверхностью  $\sigma$  для  $0 < t \leq T_0$ .  $\Sigma = \Sigma_0 \cup \Sigma_H \cup \sigma$  – кусочно-гладкая граница области  $G$  [4 – 7].

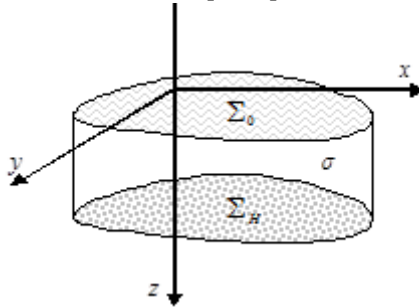


Рис. 5. Схема расчетной области  $\bar{G}$

Система (1) рассматривается при следующих граничных условиях:

$$S_i = 0 \text{ на } \sigma, \text{ если } U_n < 0; \frac{\partial S_i}{\partial n} = 0 \text{ на } \sigma, \text{ если } U_n \geq 0; \quad (2)$$

$$S'_{i,z} = \varphi(S_i) \text{ на } \Sigma_0; S'_{i,z} = -\varepsilon_i S_i \text{ на } \Sigma_H,$$

где  $\varepsilon_i$  – коэффициент поглощения  $i$ -й компоненты донным материалом.

Необходимо к (5) также добавить начальные условия:

$$S_i|_{t=0} = S_{i0}(x, y, z), i = \overline{1, 6}. \quad (3)$$

Поля скоростей водного потока, рассчитанные по модели [8-10], используются в качестве входных данных для модели (1) – (3). Дискретизация модели (1) – (3) была проведена на основе схем повышенного порядка точности, описанных в работе [11-14].

**Численная реализация модели «цветения» фитопланктона.** Для решения сеточных задач, возникающих при дискретизации модельной задачи (1) – (3) использовался модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) [15-17].

Опишем параллельные алгоритмы, используемые для решения задачи (1) – (3), использующие различные типы декомпозиции расчетной области.

Алгоритм 1. После разбиения исходной расчетной области на части по двум координатным направлениям каждый процессор получает свою расчетную область, как показано на рис. 6, при этом смежные

области перекрываются двумя слоями узлов по направлению, перпендикулярному плоскости разбиения.

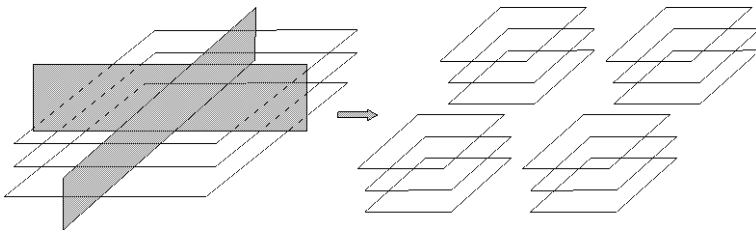
После того как каждый процессор получит информацию для своей части области, рассчитывается вектор невязки и его равномерная норма. Затем каждый процессор определяет максимальный по модулю элемент вектора невязки и передает его значение всем оставшимся вычислителям. Теперь для вычисления равномерной нормы вектора невязки достаточно на каждом процессоре найти максимальный элемент.

Рассмотрим параллельный алгоритм расчета вектора поправки:

$$(D + \omega_m R_1)D^{-1}(D + \omega_m R_2)w^m = r^m,$$

где  $R_1$  – нижне-треугольная матрица, а  $R_2$  – верхне-треугольная матрица. Для вычисления вектора поправки нужно последовательно решить два уравнения:

$$(D + \omega_m R_1)y^m = r^m, \quad (D + \omega_m R_2)w^m = Dy^m.$$



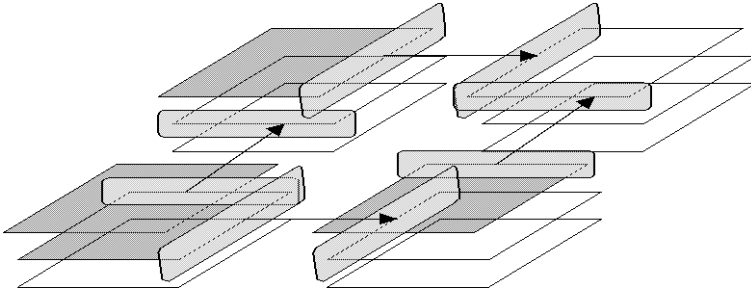
**Рис. 6.** Декомпозиция расчетной области

Вначале вычисляется вектор  $y^m$ , при этом расчет начинается в левом нижнем углу. Затем из правого верхнего угла начинается вычисление вектора поправки  $w^m$ . Схема расчета вектора  $y^m$  изображена на рис. 7 (представлена передача элементов после расчета двух слоев первым процессором).

На первом шаге вычислений первый процессор обрабатывает верхний слой. Затем осуществляется передача перекрывающихся элементов смежным процессорам. На следующем шаге первый процессор обрабатывает второй слой, а его соседи – первый. Передача элементов после расчета двух слоев первым процессором показана на рис. 7. В схеме для расчета вектора  $y^m$  только первый процессор не требует дополнительной информации и может независимо от других процессоров вести обработку своей части области, остальные процессоры ждут результатов от предыдущего процессора, пока он не передаст вычисленные значения сеточных функций, для узлов сетки,

располагающихся в предшествующих позициях данной строки. Процесс продолжается до тех пор, пока не будут рассчитаны все слои. Аналогичным образом можно решить СЛАУ с верхне-треугольной матрицей для расчета вектора поправки

Далее вычисляются скалярные произведения и выполняется переход на следующий итерационный слой.



**Рис. 7.** Схема для расчета вектора  $y^m$

Построим теоретическую оценку времени, необходимого для выполнения шага МПТМ для СЛАУ с семидиагональной матрицей при помощи декомпозиции по двум пространственным направлениям на кластере распределенных вычислений. Вся расчетная область распределена между процессорами (всего  $n$  процессоров  $n = n_x \cdot n_y$ , пусть

$n_x \geq n_y$ ), т.е. каждый из них получает область размером  $\frac{N}{n}$ ,  $N = N_x N_y N_z$ ,

где  $N_x, N_y, N_z$  – количество узлов по пространственным направлениям;  $t_0$  – время выполнения одной арифметической операции;  $t_x$  – время отклика (латентность);  $t_n$  – время, затрачиваемое на передачу чисел с плавающей точкой.

Теперь получим теоретические оценки ускорения  $S_{(1)}$  и эффективности  $E_{(1)}$  параллельного алгоритма 1:

$$S_{(1)} = \frac{n}{1 + (\sqrt{n} - 1) \left( \frac{36}{50N_z} + \frac{4n}{50t_0} \left( t_n \left( \frac{1}{N_x} + \frac{1}{N_y} \right) + \frac{t_x \sqrt{n}}{N_x N_y} \right) \right) } t$$

$$E_{(1)} = \frac{S_{(1)}}{n} = \frac{1}{1 + (\sqrt{n} - 1) \left( \frac{36}{50N_z} + \frac{4n}{50t_0} \left( t_n \left( \frac{1}{N_x} + \frac{1}{N_y} \right) + \frac{t_x \sqrt{n}}{N_x N_y} \right) \right)}$$

В теоретических оценках ускорения рассматривается случай модельной задачи с прямоугольной областью. При решении задачи для реального водоема расчетная область имеет сложную форму. При этом реальное ускорение меньше его теоретической оценки. Зависимость ускорения, полученную при теоретической оценке, можно использовать в качестве оценки сверху ускорения для параллельной реализации алгоритма МПТМ путем декомпозиции области по двум пространственным направлениям.

Алгоритм 2. Для геометрического разбиения расчетной области с целью равномерной загрузки вычислителей (процессоров) МВС использовался метод k-means, основанный на минимизации функционала суммарной выборочной дисперсии разброса элементов (узлов расчетной сетки) относительно центра тяжести подобластей.

Опишем алгоритм работы k-means.

1) Выбираются начальные центры подобластей при помощи максиминного алгоритма.

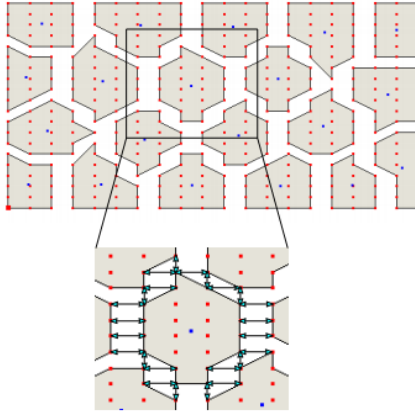
2) Все расчетные узлы разбиваются на  $m$  клеток Вороного по методу ближайшего соседа, т. е. текущий расчетный узел сетки  $x \in X_c$ , где  $X_c$  – подобласть, выбираемая из условия  $\|x - s_c\| = \min_{1 \leq i \leq m} \|x - s_i\|$ , где  $s_c$  – центр области  $X_c$ .

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

4) Проверяется условие остановки  $s_c^{(k+1)} = s_c^{(k)}$  для всех  $k = 1, \dots, m$ .

Если условие остановки не выполняется, то осуществляется переход на пункт 2 алгоритма.

Результат работы метода k-means для модельных двумерной и трехмерной областей представлен на рис. 8 (стрелками указаны обмены между подобластями).



**Рис. 8.** Декомпозиция расчетной области

Теоретические оценки ускорения и эффективности для алгоритма 2 были получены аналогично соответствующим оценкам алгоритма 1:

$$S_{(2)} = \frac{n \cdot \chi}{1 + (\sqrt{n} - 1) \left( \frac{36}{50N_z} + \frac{4n}{50t_0} \left( t_n \left( \frac{1}{N_x} + \frac{1}{N_y} \right) + \frac{t_x \sqrt{n}}{N_x N_y} \right) \right)},$$

$$E_{(2)} = \frac{S_{(2)}}{n} = \frac{\chi}{1 + (\sqrt{n} - 1) \left( \frac{36}{50N_z} + \frac{4n}{50t_0} \left( t_n \left( \frac{1}{N_x} + \frac{1}{N_y} \right) + \frac{t_x \sqrt{n}}{N_x N_y} \right) \right)},$$

где  $\chi$  – отношение числа расчетных узлов к общему числу узлов (расчетных и фиктивных).

Параллельные алгоритмы МПТМ были реализованы на многопроцессорной вычислительной системе (МВС) ЮФУ. Было проведено сравнение работы разработанных параллельных алгоритмов 1 и 2 решения задачи (1) – (3). Результаты представлены в виде таблицы 2, где  $n$  – число процессоров;  $t_{(k)}, S_{(k)}, E_{(k)}$  – время работы, ускорение и эффективность  $k$ -го алгоритма;  $S_{(k)}^t, E_{(k)}^t$  – теоретические оценки ускорения и эффективности  $k$ -го алгоритма,  $k = \{1, 2\}$ .

Из данных таблицы 2 можно сделать вывод о том, что разработанные алгоритмы на основе декомпозиции по двум пространственным направлениям и метода k-means могут эффективно



применяться для решения задач гидродинамики при достаточно большом числе вычислительных узлов.

Таблица 2  
Сравнение ускорения и эффективности алгоритмов

$n$	$t_{(1)}$	$S'_{(1)}$	$S_{(1)}$	$t_{(2)}$	$E'_{(2)}$	$E_{(2)}$
1	7,491	1,0	1,0	6,073	1,0	1,0
2	4,152	1,654	1,804	3,121	1,181	1,946
4	2,55	3,256	2,938	1,811	2,326	3,354
8	1,45	6,318	5,165	0,997	4,513	6,093
16	0,882	11,928	8,489	0,620	8,520	9,805
32	0,458	21,482	16,352	0,317	15,344	19,147
64	0,2656	35,955	28,184	0,184	25,682	33,018
128	0,172	54,618	43,668	0,117	39,013	51,933

Использование алгоритма 2 на основе k-means для решения задачи ЦВ вида (1) – (3) позволяет повысить эффективность на 15%.

**Описание программного комплекса.** Для решения задачи (1) – (3) был создан комплекс прикладных программ «Azov3d», позволяющий производить расчеты полей скоростей водного потока, концентраций загрязняющих веществ (ЗВ), фито- и зоопланктона в областях сложной формы (Азовское море и Таганрогский залив) на супер-ЭВМ. Программный комплекс предназначен для математического моделирования возможных сценариев развития экологической обстановки прибрежных систем на примере Азово-Черноморского бассейна, включает совокупность вычислительных модулей, позволяющих: учитывать факторы, влияющие на распространение ЗВ в прибрежных системах (метеословия, влияние береговой линии и рельефа дна); проводить исследование зависимости концентраций загрязнений, степени и размеров зоны поражения водного объекта от интенсивности движения водного потока, гидрофизических параметров, климатических и метеорологических факторов. К его особенностям относятся высокая производительность, достоверность, а также высокая точность получаемых результатов моделирования.

Для математического моделирования гидробиологических и гидродинамических процессов в трехмерной области сложной формы – Азовское море и Таганрогский залив использовались последовательно сгущающиеся прямоугольные сетки размерностями:  $251 \times 351 \times 15$ ,  $502 \times 702 \times 30$ ,  $1004 \times 1404 \times 60$ , и т.д.

Калибровка и верификация разработанной модели ЦВ мелководного водоема проводились на основе экологических данных по

Азовскому морю, полученных в ходе научно-исследовательских экспедиций, проводимых учеными ЮФУ, начиная с 2000 года. В ходе исследований акватории Азовского моря изучались: виды и концентрации основных загрязняющих воды Азовского моря веществ; пространственные распределения солености и температуры; кислородный режим; видовой состав фито- и зоопланктона; механизмы возникновения и развития заморов в центрально-восточной части водоема [18-19].

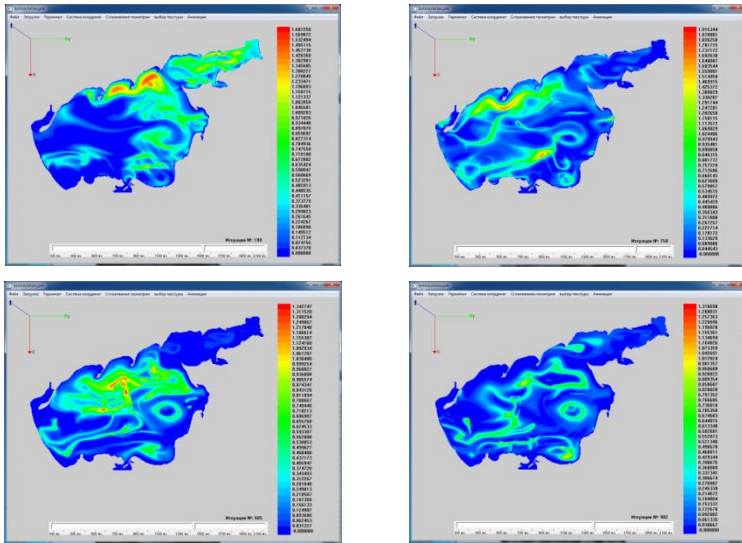
Программный комплекс включает: блок управления, базы океанологических и метеорологических данных, системы интерфейсов, системы ввода – вывода и визуализации. При разработке программного комплекса использовался язык высокого уровня C++, а также технология MPI.

**Результаты численных экспериментов.** Был проведен ряд численных экспериментов по моделированию процессов «цветения» вод в Азовском море на период с 1 апреля по 31 октября 2013 года. На рис. 9 изображены результаты численного эксперимента для реконструкции заморного явления, вызванного «цветением» фитопланктона в июле 2013 года.

Было проведено сравнение работы созданного разработанного программного комплекса (ПК), реализующего разработанные сценарии развития экологической обстановки в Азовском море с использованием численной реализации модельных задач биологической кинетики для планктона с подобными работами в области математического моделирования гидробиологических процессов [20-23]. Анализируя данные НИЦ «Планета», представленные на рисунке 10 А (видны пятна фитопланктона, выявляющие структуру течений), сравнивая с рисунком 10 Б, на котором представлены результаты распределения концентраций фитопланктона для временного интервала 1 месяц (июль 2013 года), начальное распределение полей течений при северном ветре, замечаем качественное соответствие результатов моделирования фитопланктона представленному спутниковому снимку.

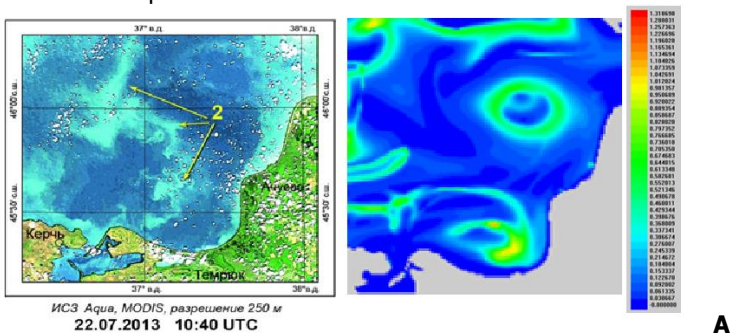
Критерием проверки адекватности построенной модели (1) – (3) служила оценка погрешности моделирования с одновременным учетом натуральных данных по имеющимся  $n$  замерам, которая вычислялась по

формуле: 
$$\delta = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n (S_{k \text{ nat}} - S_k)^2}{\sum_{k=1}^n S_{k \text{ nat}}^2}}$$
, где  $S_{k \text{ nat}}$  – значение концентрации, полученное с помощью натуральных измерений;  $S_k$  – значение концентрации, рассчитанное с помощью модели (1) – (3).



**Рис. 9.** Изменение концентрации фитопланктона в Азовском море

Расчитанные при различных ветровых ситуациях концентрации ЗВ и планктона принимались к рассмотрению, если относительная погрешность не превышала 30%.



**Рис. 10.** А: спутниковая фотография Азовского моря НИЦ "Планета";  
 Б: результат работы ПК (изменение концентрации фитопланктона)

Анализ подобных ПК мелководных водоемов показал, что в результате его разработки удалось повысить точность прогнозов

изменения концентраций ЗВ и планктона в мелководном водоеме на 10 – 15% в зависимости от решаемой модельной задачи биологической кинетики [24-27].

**Заключение.** В работе предложена модель «цветения вод» мелководного водоема, используемая для реконструкции замора рыбы, который произошел 16 июля 2013 года в юго-восточной части Азовского моря. Выполнена численная реализация разработанной модели на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью. Проведены теоретические расчеты ускорения и эффективности параллельных алгоритмов. При параллельной реализации были использованы методы декомпозиции сеточных областей для вычислительно трудоемких задач диффузии-конвекции, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы. Максимальное ускорение достигалось на 128 вычислительных узлах и составило 43 раза. При реализации параллельного алгоритма решения задачи на МВС для распределения данных между процессорами были разработаны два алгоритма, в том числе алгоритм на основе метода k-means, применение которого позволило повысить эффективность алгоритма решения поставленной задачи на 15% по сравнению с алгоритмом, основанном на стандартном разбиении расчетной области. Применение супер-ЭВМ позволило сократить время решения поставленной модельной задачи, и сохранить требуемую точность моделирования гидробиологических процессов, протекающих в мелководных водоемах, что актуально в задачах биологической кинетики.

### **Библиографический список**

1. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Semenyakina A.A., Nikitina A.V. Numerical modeling of an ecological condition of the Sea of Azov with application of schemes of the raised accuracy order on the multiprocessor computing system // Computer researches and modeling. 2016. T. 8, No. 1. PP. 151 - 168.
2. Alexandr Sukhinov; Alexandr Chistyakov; Alla Nikitina; Alena Semenyakina; Iakov Korovin; Gerald Schaefer. Publications. Modelling of oil spill spread 2016 5th International Conference on Informatics, Electronics and Vision (ICIEV). Year: 2016. Pages: 1134 – 1139.
3. State Research Center «Planeta», [http://planet.iitp.ru/english/index\\_eng.htm](http://planet.iitp.ru/english/index_eng.htm)
4. Sukhinov A.I., Nikitina A.V., Chistyakov A.E., Semenov I.S., Semenyakina A.A., Khachunts D.S. Mathematical modeling of eutrophication processes in shallow waters on multiprocessor computer system / CEUR

Workshop Proceedings. Vol. 1576. 2016. PP. 320-333, 10th Annual International Scientific Conference on Parallel Computing Technologies, PCT 2016; Arkhangelsk; Russian Federation; 29 March 2016 through 31 March 2016; Code 121197.

5. Nikitina A.V., Sukhinov A.I., Ugolnitsky G.A., Usov A.B., Chistyakov A.E., Puchkin M.V., Semenov I.S. Optimal control of sustainable development in the biological rehabilitation of the Azov Sea // *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2017. 9 (1), pp. 101-107.

6. Никитина А.В., Третьякова М.В. Моделирование процесса альголизации мелководного водоема путем вселения в него штамма зеленой водоросли *Chlorella vulgaris* bin // *Известия ЮФУ. Технические науки*. – 2012. – № 1. – С. 128 – 133.

7. Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е., Семенов И.С. Математическое моделирование условий формирования заморозов в мелководных водоемах на многопроцессорной вычислительной системе // *Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии*. – 2013. – Т.14. №1.– С. 103 – 112.

8. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Двумерная гидродинамическая модель, учитывающая динамическое перестроение геометрии дна мелководного водоема // *Известия ЮФУ. Технические науки*. 2011. № 8 (121). С. 159-167.

9. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Построение дискретной двумерной математической модели транспорта наносов // *Известия ЮФУ. Технические науки*. 2011. №8(121). С. 32-44.

10. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs // *Mathematical models and computer simulations*. – 2014. – Т. 6, № 4. – С. 351-363.

11. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. 616 с.

12. Никитина А.В., Семенякина А.А., Чистяков А.Е. Параллельная реализация задачи диффузии-конвекции на основе схем повышенного порядка точности // *Вестник компьютерных и информационных технологий*. – 2016, № 7 (146). С. 3 – 7.

13. Семенякина А.А., Никитина А.В., Чистяков А.Е., Сухинов А.И. Комплекс моделей, явных регуляризованных схем повышенного порядка точности и программ для предсказательного моделирования последствий аварийного разлива нефтепродуктов // *Сборник трудов конференции «Параллельные Вычислительные технологии: ПАВТ-2016»* /- 2016. – С. 308 – 319.

14. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Семенякина А.А., Никитина А.В. Параллельная реализация задач транспорта веществ и восстановления

донной поверхности на основе схем повышенного порядка точности // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2015. – Т.16. – С. 256 – 267.

15. Коновалов А.Н. К теории попеременно-треугольного итерационного метода // Сибирский математический журнал. – 2002. 43:3. С. 552–572.

16. Белоцерковский О. М. Турбулентность: новые подходы. М.: Наука, 2003. 286 с.

17. Сухинов А.И., Чистяков А.Е. Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором// Математическое моделирование. – 2012. – Т.24, №1. – С. 3–20.

18. Никитина А.В., Сухинов А.И., Угольницкий Г.А., Усов А.Б., Чистяков А.Е., Пучкин М.В., Семенов И.С. Оптимальное управление устойчивым развитием при биологической реабилитации Азовского моря // Математическое моделирование. – 2016. Т. 28, №7. – С. 96 – 106.

19. Никитина А.В., Пучкин М.В., Семенов И.С., Сухинов А.И., Угольницкий Г.А., Усов А.Б., Чистяков А.Е. Дифференциально-игровая модель предотвращения заморов в мелководных водоемах // Управление большими системами. – 2015. – Выпуск 55.– С. 343 – 361.

20. Trân J.K. A predator-prey functional response incorporating indirect interference and depletion // Verh. Internat. Verein. Limnol. – 2008. –Vol. 30. Pt 2, pp. 302 – 305.

21. Tyutyunov Yu., Senina I., Arditi R. Clustering due to acceleration in the response to population gradient: a simple self-organization model // The American Naturalist. – 2004, 164, pp. 722 – 735.

22. Volterra V. Variations and fluctuations of the number of individuals in animal species living together // Rapp. P. – V. Reun. Cons. Int. Explor. Mer. – 1928. 3, pp. 3 – 51.

23. Yakushev E.V., Mikhailovsky G.E. Mathematical modeling of the influence of marine biota on the carbon dioxide ocean-atmosphere exchange in high latitudes // Air-Water Gas Transfer, Sel. Papers, Third Int. Symp., Heidelberg University, ed. by B. Jaehne and E.C. Monahan, AEON Verlag & Studio, Hanau. – 1995, pp. 37 – 48.

24. Petrov Igor B. Application of grid-characteristic method for numerical solution of deformable solid mechanics dynamical problems // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 1-20.

25. Sukhinov A. I., Sidoryakina V. V., Sukhinov A.A. Sufficient convergence conditions for positive solutions of linearized two-dimensional

sediment transport problem // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 21-35.

26. Nikitina A.V., Semenyakina A.A. Mathematical modeling of eutrophication processes in Azov Sea on supercomputers // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp 82-101.

27. Chistyakov A.E., Protsenko E.A., Timofeeva E.F. Mathematical modeling of oscillatory processes with a free boundary // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 102-112.

## METADATA

**Title:** Using multichannel satellite images for predictive modelling the «bloom» phytoplankton processes in shallow waters on supercomputer.

**Authors:** A.I. Sukhinov, Nikitina, A.W. Chistyakov.

**Abstract:** The paper covers the development and research of mathematical models of «bloom» phytoplankton processes, that cause hypoxic phenomena in shallow waters, on the basis of modern information technologies and computational methods. Expedition data and multichannel satellite images of remote sensing obtained by the SRC «Planeta» are used for calibration and verification of the developed model. The methods of domain decomposition was used in a parallel implementation for computationally labours problems, taking into account the architecture and parameters of multiprocessor computer system.

**Key words:** mathematical model, the «bloom» of phytoplankton, hypoxic phenomena, multichannel satellite images, supercomputer, parallel algorithms.

## РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В ОБЛАСТИ СО СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЕЙ \*

А.И. Сухинов<sup>1</sup>, С.В. Проценко<sup>1</sup>, А.Е. Чистяков<sup>1</sup>, Е.А. Проценко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Донской государственной технической университет,

<sup>2</sup>Ростовский государственный экономический университет,  
г. Ростов-на-Дону, Россия

**Аннотация.** Статья посвящена исследованию процесса волновых колебаний и разработке комплекса программ, предназначенного для описания распространения волновых процессов. Целью настоящей работы является математическое моделирование и разработка реализующей модель, комплекса программ, предназначенного для описания распространения волновых колебаний со свободной границей на основе конечно-разностного метода. Предложена математическая модель, описывающая динамику распространения волновых колебаний, в основе которой лежит неоднородное волновое уравнение с соответствующими начальными и граничными условиями. Дискретизация модели проведена интегро-интерполяционным методом, при этом реализован подход, учитывающий частичную «заполненность» расчетных ячеек. Для решения, полученных сеточных уравнений применен адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод вариационного типа, имеющий наиболее высокую скорость сходимости в классе двухслойных итерационных методов. Разработаны математическая модель и программное обеспечение для численного моделирования распространения волн. Приведены результаты численных экспериментов. Разработанные численные алгоритмы и их компьютерная реализация использованы для исследования динамики распространения волновых процессов при наличии свободной границы. Полученные результаты могут быть использованы в процессе исследования динамики распространения волновых процессов при наличии свободной границы, контроля при проведении экспериментальных исследований и т.д.

**Ключевые слова:** волновая задача; сеточные уравнения; адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод.

**Актуальность и методы исследования.** Совершенствование систем наблюдения и повышение детализации экспериментальной информации приводит в настоящее время к необходимости рассмотрения волновых полей с большей точностью. Несмотря на большое количество исследований в этом направлении, проблема математического моделирования распространения волновых колебаний остается актуальной в силу широкого разнообразия решаемых задач, специфику

---

\* Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 17-11-01286.



которых необходимо учитывать при разработке методов и алгоритмов построения численных решений и их компьютерной реализации. Методы математического моделирования с использованием высокопроизводительных компьютеров являются наиболее эффективным способом получения информации об исследуемых процессах, так как возможности теоретического и экспериментального изучения этих явлений ограничены методическими и техническими трудностями.

При моделировании процессов волновых колебаний применяется ряд традиционных методов: асимптотических (лучевых); интегральных (в основе лежит принцип Гюйгенса); прямых численных методов.

Следует отметить, что характерной особенностью лучевых методов: метода нулевого лучевого приближения, матричных методов, методов обобщенного луча, является исследование ограниченной части волнового поля. Волновое поле представляется как сумма волн, распространяющихся с локальной скоростью вдоль лучевых траекторий, обусловливаемых законом Снеллиуса. Амплитуда данных волн определяется геометрическим расхождением лучей на пути от источника к приемнику. В матричном методе Хаскелла-Томсона и его модификациях, проблема исследована в частотной области: при некотором наборе частот решают систему уравнений Гельмгольца с дальнейшим переходом во временную область.

Прямые численные методы решения волнового уравнения позволяют рассчитывать полное волновое поле, моделирование которого происходит путем решения дифференциальных уравнений движения волн. Расчет волнового поля происходит в наборе близкорасположенных дискретных узлов сетки путем аппроксимации производных конечными разностями и рекурсивного решения полученного дифференциального уравнения.

Целью настоящей работы является математическое моделирование и разработка реализующего модель, комплекса программ, предназначенного для описания распространения волновых колебаний со свободной границей на основе конечно-разностного метода.

В соответствии с поставленной целью решены следующие задачи:

- разработана дискретная модель, учитывающая заполненности расчетных ячеек, что гарантировало выполнение основных законов сохранения на дискретном уровне;
- проведено исследование зависимости погрешности аппроксимации от шага по временной переменной;
- получены условия устойчивости трехслойной разностной схемы;

- рассчитаны оптимальные значения весового параметра трехслойной разностной схемы;
- разработан вариант адаптивного модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода вариационного типа (МПТМ), который имеет наилучшую скорость сходимости;
- разработан комплекс программ, предназначенный для моделирования распространения колебательных процессов со свободной границей.

**Постановка задачи.** Необходимо найти решение неоднородного волнового уравнения [1-3]:

$$p''_n = c^2 \Delta p + f,$$

удовлетворяющего начальным условиям:

$$p(x, y, 0) = \varphi_0(x, y), \quad p'_t(x, y, 0) = \varphi_1(x, y)$$

и граничным условиям:

– на твердой границе:  $p(x, y, t) = 0, (x, y) \in \gamma,$

– на мягкой границе:  $p'_n(x, y, t) = 0, (x, y) \in \gamma,$

– на свободной границе:  $p'_t = cp'_n, (x, y) \in \gamma,$

где  $n$  – нормаль к поверхности.

Расчетная область вписана в прямоугольник и покрыта равномерной расчетной сеткой  $\omega = \omega_t \times \omega_x \times \omega_y$ :

$$\omega_t = \{t^n = nh_t, 0 \leq n \leq N_t - 1, l_t = h_t(N_t - 1)\},$$

$$\omega_x = \{x_i = ih_x, 0 \leq i \leq N_x - 1, l_x = h_x(N_x - 1)\},$$

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

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

**Дискретная модель.** Аппроксимация уравнений модели выполнена на прямоугольных сетках с помощью модификации интегро-интерполяционного метода [4, 5], учитывающего «заполненность» ячеек расчетной сетки, что позволяет осуществлять динамическое изменение дискретной расчетной области без перестроения сетки, т.е. без дополнительных вычислительных затрат [6, 7].

Аппроксимация оператора второй разностной производной имеет вид:

$$(q_0)_{i,j} (\mu c'_x)'_x ; (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2} - \\ - \left| (q_1)_{i,j} - (q_2)_{i,j} \right| \mu_{i,j} \frac{\alpha_x c_{i,j} + \beta_x}{h_x}.$$

в случае граничного условия третьего рода  $u'_n(x, y, t) = \alpha u + \beta$ .

Коэффициенты заполненности контрольных областей  $q_m, m = \overline{0,4}$  можно вычислить по формулам:

$$(q_m)_{i,j} = \frac{S_{\Omega_m}}{S_{D_m}}, \quad (q_0)_{i,j} = \frac{O_{i,j} + O_{i+1,j} + O_{i+1,j+1} + O_{i,j+1}}{4}, \quad (q_1)_{i,j} = \frac{O_{i+1,j} + O_{i+1,j+1}}{2}, \\ (q_2)_{i,j} = \frac{O_{i,j} + O_{i,j+1}}{2}, \quad (q_3)_{i,j} = \frac{O_{i+1,j+1} + O_{i,j+1}}{2}, \quad (q_4)_{i,j} = \frac{O_{i,j} + O_{i+1,j}}{2},$$

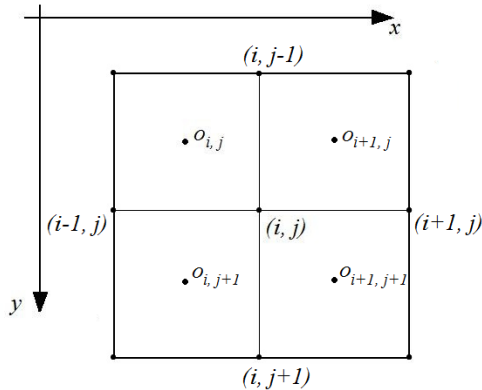
где  $O_{i,j}$  – «заполненность» ячейки  $(i, j)$ .

Рис. 1 иллюстрирует расположение узлов относительно ячеек.

Для получения дискретной модели использован интегро-интерполяционный метод. Разностная схема, аппроксимирующая волновое уравнение имеет вид:

$$\frac{p_{i,j}^{n+1} - 2p_{i,j}^n + p_{i,j}^{n-1}}{h_t^2} = c^2 \frac{\bar{p}_{i+1,j} - 2\bar{p}_{i,j} + \bar{p}_{i-1,j}}{h_x^2} + c^2 \frac{\bar{p}_{i,j+1} - 2\bar{p}_{i,j} + \bar{p}_{i,j-1}}{h_y^2} + f_{i,j}^n,$$

где  $\bar{p}_{i,j} = \sigma_1 p_{i,j}^{n+1} + (1 - \sigma_1 - \sigma_2) p_{i,j}^n + \sigma_2 p_{i,j}^{n-1}$  – веса схемы.



**Рис. 1.** Расположение узлов относительно ячеек

Дискретный аналог волнового уравнения в случае граничных условий в форме Дирихле ( $p=0$ ) примет вид:

$$\frac{p_{i,j}^{n+1}}{h_t^2} + q_{0,i,j} \frac{-2p_{i,j}^n + p_{i,j}^{n-1}}{h_t^2} = c^2 \min(q_{1,i,j}, q_{2,i,j}) \frac{\bar{p}_{i+1,j} - 2\bar{p}_{i,j} + \bar{p}_{i-1,j}}{h_x^2} +$$

$$+ c^2 \min(q_{3,i,j}, q_{4,i,j}) \frac{\bar{p}_{i,j+1} - 2\bar{p}_{i,j} + \bar{p}_{i,j-1}}{h_y^2} + q_{0,i,j} f_{i,j}^n.$$

Дискретный аналог волнового уравнения в случае граничных условий в форме Неймана ( $p' = 0$ ) примет вид:

$$q_{0,i,j} \frac{p_{i,j}^{n+1} - 2p_{i,j}^n + p_{i,j}^{n-1}}{h_t^2} = c^2 q_{1,i,j} \frac{\bar{p}_{i+1,j} - \bar{p}_{i,j}}{h_x^2} - c^2 q_{2,i,j} \frac{\bar{p}_{i,j} - \bar{p}_{i-1,j}}{h_x^2} +$$

$$+ c^2 q_{3,i,j} \frac{\bar{p}_{i,j+1} - \bar{p}_{i,j}}{h_y^2} - c^2 q_{4,i,j} \frac{\bar{p}_{i,j} - \bar{p}_{i,j-1}}{h_y^2} + q_{0,i,j} f_{i,j}^n.$$

Условие свободной границы для задачи распространения волновых колебаний примет вид:

$$\frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j}^n}{h_t} = c \frac{\bar{p}_{i+1,j} - \bar{p}_{i,j}}{h_x}, i = 0, \quad \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j}^n}{h_t} = c \frac{\bar{p}_{i,j+1} - \bar{p}_{i,j}}{h_y}, j = 0.$$

**Исследование дискретной модели.** Исследуем волновое уравнение  $c'' = \text{div}(\mu \text{grad}(c))$  с начальными условиями  $c|_{t=0} = c_0$ ,  $c'_t|_{t=0} = c_1$ .

Аппроксимация по пространственным переменным задачи может быть представлена в виде:  $c'' = -\Delta c$  или  $c'' = \sum_{l=1}^r (\mu c_{\bar{x}_l})_{x_l}$ , где  $r$  – размерность пространства.

Аналитическое решение в базисе, составленном из собственных векторов, имеет вид:

$$c = \sum_i \alpha_i X_i, \quad \Delta X_i = \lambda_i X_i; \quad \alpha_i(t) = \alpha_{i,0} \cos(\sqrt{\lambda_i} t) + \frac{\alpha_{i,1}}{\sqrt{\lambda_i}} \sin(\sqrt{\lambda_i} t).$$

Симметричная схема для волновой задачи примет вид:

$$\frac{\alpha_i^{n+1} - 2\alpha_i^n + \alpha_i^{n-1}}{\tau^2} = -\lambda_i \sigma \alpha_i^{n+1} - \lambda_i (1 - 2\sigma) \alpha_i^n - \lambda_i \sigma \alpha_i^{n-1}, \quad n \geq 1;$$

$$\frac{\alpha_i^{n+1} - \alpha_i^n}{\tau^2} - \frac{\alpha_{i,1}}{\tau} = -\lambda_i \sigma \alpha_i^{n+1} - \lambda_i (1/2 - \sigma) \alpha_i^n, \quad n = 0.$$

Численное решение соответствует  $\alpha_i^n = A \cos(n\varphi) + B \sin(n\varphi)$ ,

где  $\cos \varphi = k/2$ ,  $k = 2 - \lambda_i \tau^2 / (1 + \lambda_i \sigma \tau^2)$ .

Условие устойчивости разностной схемы, с учетом оценки максимального числа обусловленности  $\lambda_{\max} \leq 4r\mu/h^2$ , имеет вид:

$$\tau < \frac{h}{\sqrt{(1-4\sigma)r\mu}}.$$

Численное решение представим в виде:

$$\alpha_i^n = \alpha_{i,0} \cos\left(\left(\frac{\varphi}{\tau}\right)t^n\right) + \frac{\alpha_{i,1}}{\sqrt{\lambda_i(1+\lambda_i(\sigma-1/4)\tau^2)}} \sin\left(\left(\frac{\varphi}{\tau}\right)t^n\right),$$

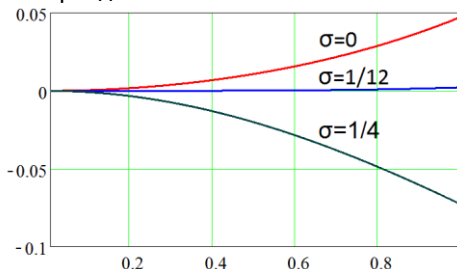
$$\varphi = \arccos\left(1 - \frac{\lambda_i \tau^2 / 2}{1 + \lambda_i \sigma \tau^2}\right).$$

Погрешность аппроксимации частоты колебаний:

$$\begin{aligned} \frac{\varphi}{\tau\sqrt{\lambda_i}} &= \frac{\arccos\left(1 - \frac{\lambda_i \tau^2 / 2}{1 + \lambda_i \sigma \tau^2}\right)}{\tau\sqrt{\lambda_i}} = \frac{\sqrt{\frac{\lambda_i \tau^2}{1 + \lambda_i \sigma \tau^2}} + \frac{1}{6\sqrt{2}} \sqrt{\left(\frac{\lambda_i \tau^2 / 2}{1 + \lambda_i \sigma \tau^2}\right)^3} + O(\tau^5)}{\tau\sqrt{\lambda_i}} = \\ &= 1 + \frac{1-12\sigma}{24} \lambda_i \tau^2 + O(\tau^4). \end{aligned}$$

Полученная оценка позволяет сделать вывод, что при расчете распространения колебательных процессов на основе разностных методов значения частоты колебаний несколько отличаются от реальных значений и зависят от шага по времени отнесенного к периоду волны и веса.

На рис. 2 представлен график зависимости погрешности аппроксимации частоты колебаний  $\varphi / \tau\sqrt{\lambda_i} - 1$  от  $\tau\sqrt{\lambda_i}$ . Данный параметр описывает шаг по времени, отнесенный к периоду волны, единице соответствует  $1/2\pi$  периода волны.



**Рис. 2.** График зависимости погрешности аппроксимации частоты колебаний от параметра, описывающего шаг по времени отнесенный к периоду волны

Рассмотрена функция  $f(y, \sigma) = (1/y) \arccos\left(1 - \frac{y^2/2}{1 + \sigma y^2}\right) - 1$ , где

$y = \tau \sqrt{\lambda_i} \leq 1$ . Рис. 3 иллюстрирует зависимость функции  $f$  от  $y$ .

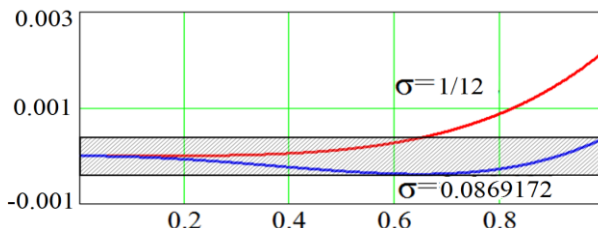


Рис. 3. График зависимости функции  $f$  от  $y$

В табл. 1 приведены оптимальные значения, с точки зрения сохранения значений частоты, распространения колебательных процессов, зависящие от ограничения на  $y$  и приведены значения отклонения частоты колебаний от реальных значений  $max(f)$ .

Таблица 1  
Отклонение частоты колебаний от реальных значений в зависимости от веса схемы

	Значение весового параметра $\sigma$	Ограничение на $y$	Значение $f, \%$
1	0.08375	0.34667	0.0005198
2	0.084	0.43794	0.001329
3	0.0842042	0.5	0.002266
4	0.0845	0.57782	0.004061
5	0.085	0.68882	0.008268
6	0.08531575	0.75	0.01168
7	0.0855	0.78332	0.01394
8	0.086	0.86674	0.02107
9	0.0865	0.94204	0.02964
10	0.0869172	1	0.0379

**Погрешность аппроксимации оператора второй разностной производной на основе схем второго и четвертого порядков точности.** В работе [9] получены разностные схемы второго и четвертого порядка точности:

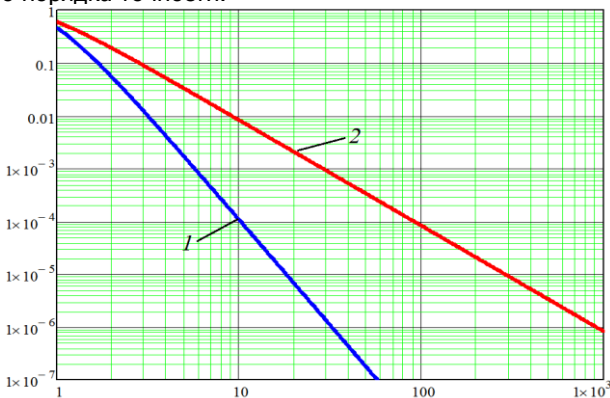
Схема второго порядка точности:  $\alpha_1(r) = 1 - 2(1 - \cos(\pi/r)) / (\pi/r)^2$ .

Схема четвертого порядка точности:

$$\alpha_2(r) = 1 - (15 - 16\cos(\pi/r) + \cos(2\pi/r)) / 6(\pi/r)^2.$$

Величина  $r$  описывает количество узлов, приходящихся на половину периода волны (на описание объекта). Полученные оценки позволяют получить численные значения выигрышей во времени счета при использовании схем повышенного порядка точности.

На рис. 4 представлены графики зависимости погрешности аппроксимации оператора второй производной для схем второго и четвертого порядка точности.



**Рис. 4.** Графики зависимости погрешности аппроксимации оператора второй производной (1 – схемы четвертого порядка точности, 2 – второго)

**Модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором.** Применение схем, учитывающих «заполненности» контрольных областей, потребовало использования модифицированного варианта попеременно-треугольного итерационного метода [5-8, 10]. Данный метод имеет хорошие оценки скорости сходимости и эффективен для решения задач на сетках, учитывающих сложную геометрию рассматриваемых объектов. В настоящее время МПТМ широко используют при решении задач аэродинамики и транспорта донных материалов [11–16], [21-24].

Для решения сеточных уравнений используем неявный итерационный процесс [5, 7-9]:  $B \frac{x^{m+1} - x^m}{\tau^m} + Ax^m = f$ ,  $B: H \rightarrow H$ ,

где  $A$  – линейный, положительно определенный оператор,  $m$  – номер итерации,  $\tau > 0$  – итерационный параметр,  $B$  – некоторый обратимый оператор. Следует отметить, что обращение оператора  $B$  должно быть существенно проще, чем непосредственное обращение исходного оператора  $A$ . При построении оператора  $B$  используем аддитивное представление оператора – симметричную часть оператора  $A$ .

$$A_0 = (A + A^*) / 2 = R_1 + R_2, \quad R_1 = R_2^*, \quad A_1 = (A - A^*) / 2.$$

Оператор-предобуславливатель зададим следующим образом:

$$B = (D + \omega R_1) D^{-1} (D + \omega R_2), \quad D = D^* > 0, \quad \omega > 0, y \in H.$$

где  $D$  – некоторый оператор.

Значение  $\omega$  минимально при  $\omega = \sqrt{\frac{(Dw^m, w^m)}{(D^{-1}R_2w^m, R_2w^m)}}$ , где  $w^m$  –

вектор поправки. Итерационные параметры для МПТМ минимальных поправок вычисляются по формуле:

$$\tau_{m+1} = \frac{(Aw^m, w^m)}{(B^{-1}Aw^m, Aw^m)}, \quad Bw^m = Ax^m - f, \quad m = 0, 1, \dots$$

Алгоритм попеременно-треугольного итерационного метода минимальных поправок имеет вид:

$$r^m = Ax^m - f, \quad B(\omega_m)w^m = r^m, \quad \omega_m^0 = \sqrt{\frac{(Dw^m, w^m)}{(D^{-1}R_2w^m, R_2w^m)}},$$

$$s_m^2 = 1 - \frac{(A_0w^m, w^m)^2}{(B^{-1}A_0w^m, A_0w^m)(Bw^m, w^m)}, \quad k_m = \frac{(B^{-1}A_1w^m, A_1w^m)}{(B^{-1}A_0w^m, A_0w^m)},$$

$$\theta_m = \left( 1 - \sqrt{\frac{s_m^2 k_m}{1 + k_m}} \right) / (1 + k_m (1 - s_m^2)), \quad \tau_{m+1} = \theta_m \frac{(A_0w^m, w^m)}{(B^{-1}A_0w^m, A_0w^m)},$$

$$x^{m+1} = x^m - \tau_{m+1} w^m, \quad \omega_{m+1} = \omega_m^0.$$

Оценка скорости сходимости алгоритма имеет вид:

$$\|z^{n+1}\| \leq \frac{\nu^* - 1}{\nu^* + 1} \|z^n\|, \quad \nu^* = \nu(\sqrt{k+1} + \sqrt{k})^2,$$



где  $\nu$  – число обусловленности матрицы  $C_0$  при  $k = \frac{(B^{-1}A_1\omega^m, A_1\omega^m)}{(B^{-1}A_0\omega^m, A_0\omega^m)} \leq 1$ .

Важным фактором при данном подходе является дополнительная априорная информация об исходной задаче. Для МПТМ данную информацию связывают с оценками  $\delta$  и  $\Delta$ :  $D \leq \frac{1}{\delta} A_0$ ,  $R_1 D^{-1} R_2 \leq \frac{\Delta}{4} A_0$ .

Оценка числа обусловленности имеет вид:

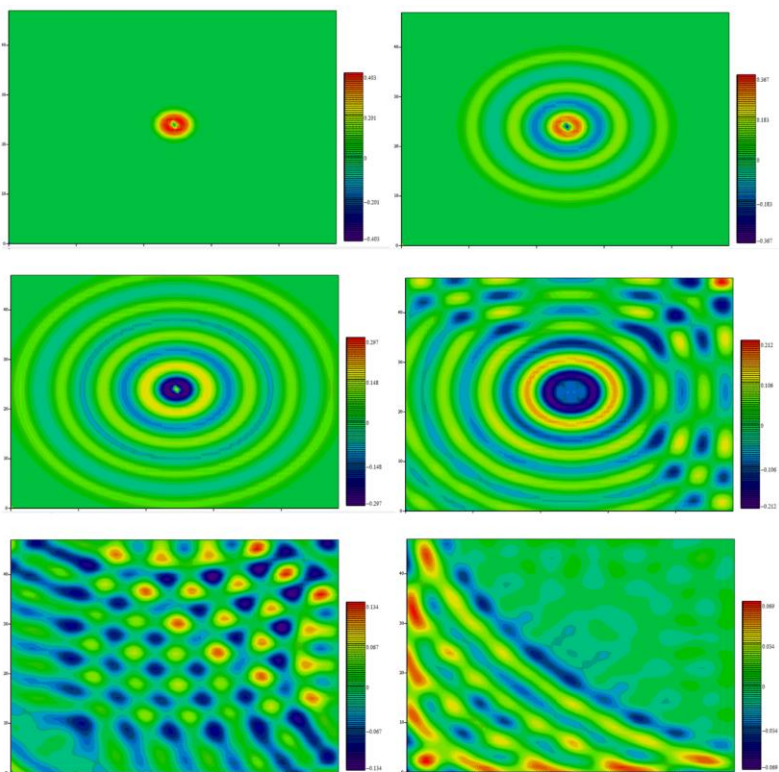
$$\nu \leq \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{\frac{\Delta}{\delta}} \right) = \frac{1 + \sqrt{\xi}}{2\sqrt{\xi}}, \quad \xi = \frac{\delta}{\Delta}.$$

**Программная реализация.** Разработанный программный комплекс для расчета распространения колебательных процессов со свободной границей включает в себя следующие компоненты: блок ввода исходных данных; блок расчета геометрии; блок расчета коэффициентов сеточных уравнений; блок расчета функций правых частей сеточных уравнений; блок перехода на более грубую сетку; блок расчета сеточных уравнений на основе модифицированного попеременно-треугольного метода; блок расчета положения расчетного окна; блок учета граничных условий; блок вывода рассчитываемых функций давления; блок вывода спектра; блок расчета фазы; блок расчета градиента фазы; блок расчета направленности; блок вывода направленности.

Разработанные численные алгоритмы и реализующий их комплекс программ были использованы для исследования динамики распространения волновых процессов при наличии свободной границы.

Рис. 5 иллюстрирует динамику распространения волновых процессов при наличии свободной границы. Свободными границами являются нижняя и левая, твердыми – верхняя и правая.

**Результаты исследования.** Работа посвящена изучению волновых колебаний и построению комплекса программ, предназначенного для описания волновых процессов излучения со свободной границей. В основе предложенной математической модели лежит неоднородное волновое уравнение с соответствующими начальными и граничными условиями. Для решения поставленной задачи выбран метод сеток. Дискретная модель построена при помощи интегро-интерполяционного метода, при этом осуществлялся учет заполненности расчетных ячеек, что гарантировало выполнение основных законов сохранения (потока для электрического поля и циркуляции для магнитного поля) на дискретном уровне. Найдены оптимальные значения весового параметра.



**Рис. 5.** Распространение волновых процессов при наличии свободной границы

Полученные сеточные уравнения решены адаптивным модифицированным попеременно-треугольным итерационным методом вариационного типа, который имеет наилучшую скорость сходимости в классе двухслойных итерационных методов. На основе построенных параллельных алгоритмов для адаптивного МПТМ был разработан комплекс программ, предназначенный для моделирования распространения электромагнитных волн в волноводах, имеющих сложную геометрию. Разработанные численные алгоритмы и реализующий их комплекс программ использованы для исследования динамики распространения волновых процессов при наличии свободной границы.

### **Библиографический список**

1. Марков, Г.Т. Возбуждение электромагнитных волн / Г.Т. Марков, А.Ф. Чаплин. — Москва: Радио и связь, 1983. — 296 с.
2. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики / В.С. Владимиров. Учебник для физич. и механико-математ. спец. вузов. 4-е изд., испр. и доп. — Москва: Наука, 1981. — 512 с.
3. Сухинов, А.И. Уравнения математической физики / А.И. Сухинов, В.Н. Зуев, В.В. Семенистый // Таганрог: ТРТУ. — 2005.
4. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. — Москва: Наука, — 1989. — 616 с.
5. Самарский, А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. — Москва: Наука, — 1978. — 588 с.
6. Сухинов, А.И. Оценка погрешности решения уравнения диффузии на основе схем с весами / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, А.В. Шишени // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 11. — С. 53–64.
7. Сухинов, А.И. Методика построения разностных схем для задачи диффузии-конвекции-реакции, учитывающих степень заполненности контрольных ячеек / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Н.А. Фоменко // Известия Южного федерального университета. Технические науки. — 2013. — № 4. — С. 87–98.
8. Коновалов, А.Н. Метод скорейшего спуска с адаптивным попеременно-треугольным переобуславливателем / А.Н. Коновалов // Дифференциальные уравнения. — 2004. — Т. 40, № 7. — С. 953–963 с.
9. Сухинов, А.И. Точность численного решения уравнения диффузии-конвекции на основе второго и четвертого порядков точности / А.И.Сухинов, А.Е.Чистяков, М.В.Якобовский // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. — 2016. — Т. 5, № 1. — С. 47–62.
10. Сухинов, А.И. Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков // Математическое моделирование. — 2012. — Т.24, №1. — С. 3–21.
11. Сухинов, А.И. Математическая модель расчета прибрежных волновых процессов / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.Ф. Тимофеева, А.В. Шишени // Математическое моделирование. — 2012. — Т.24, №8. — С. 32–44.
12. Сухинов, А.И. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежной зоне мелководных водоемов / А.И. Сухинов, А.Е.

Чистяков, Е.А. Проценко // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 12. — С. 65–82.

13. Сухинов, А.И. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежных водных системах на многопроцессорной вычислительной системе / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. — 2014. — Т. 15, № 4. — С. 610–620.

14. Сухинов, А.И. Сравнение вычислительных эффективностей явной и неявной схем для решения задачи транспорта наносов в прибрежных водных системах / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко, С.А. Шретер // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. — 2015. — Т. 16, № 3. — С. 328–338.

15. Никитина, А.В. Применение схем повышенного порядка точности для решения задач биологической кинетики на многопроцессорной вычислительной системе / А.В. Никитина, А.А. Семенякина, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко, И.В. Яковенко // Фундаментальные исследования. — 2015. — № 12–3. — С. 500–504.

16. Sukhinov, A.I. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs / A.I. Sukhinov, A.E. Chistyakov, E.A. Protsenko // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2014. — Т. 6, № 4. — С. 351–363.

17. Никитина, А.В. Дифференциально-игровая модель предотвращения заморов в мелководных водоемах / А.В. Никитина, М.В. Пучкин, И.С. Семенов, А.И. Сухинов, Г.А. Угольницкий, А.Б. Усов, А.Е. Чистяков // Управление большими системами: сборник трудов, 2015. — № 55. — С. 343–361.

18. Сухинов, А.И. Построение дискретной двумерной математической модели транспорта наносов [Текст] / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко // Известия ЮФУ. Технические науки, 2011. — № 8 (121). — С. 32–44.

19. Сухинов, А.И. Двумерная гидродинамическая модель, учитывающая динамическое перестроение геометрии дна мелководного водоема [Текст] / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко // Известия ЮФУ. Технические науки, 2011. — № 8 (121). — С. 159–167.

20. Sukhinov, A.I. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs / A.I. Sukhinov, A.E. Chistyakov, E.A. Protsenko // Mathematical Models and Computer Simulations, 2014. — Vol. 6, Issue 4. — P. 351–363.

21. Petrov Igor B. Application of grid-characteristic method for numerical solution of deformable solid mechanics dynamical problems //

Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 1-20.

22. Sukhinov, A. I., Sidoryakina, V. V., Sukhinov, A.A. Sufficient convergence conditions for positive solutions of linearized two-dimensional sediment transport problem // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 21-35.

23. Nikitina, A.V., Semenyakina, A.A. Mathematical modeling of eutrophication processes in Azov Sea on supercomputers // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp 82-101.

24. Chistyakov, A.E., Protsenko, E.A., Timofeeva, E.F. Mathematical modeling of oscillatory processes with a free boundary // Computational Mathematics and Information Technologies. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 102-112.

## METADATA

**Title:** The solution of oscillatory processes propagation problem in area with a free boundary.

**Authors:** A.I. Sukhinov, S.V. Protsenko, A.W. Chistyakov, E.A. Protsenko.

**Abstract:** The paper covers the research of wave fluctuations process and the development programs complex intended to describe the propagation of wave processes. The aim of this work is the mathematical modeling and implements the model of the complex of programs is intended to describe the propagation of wave oscillations with free boundary based on the finite-difference method. A mathematical model describing the dynamics of propagation of the wave oscillation is based on an inhomogeneous wave equation with the appropriate initial and boundary conditions. The model discretization was performed using the integro-interpolation method; this approach is implemented taking into account the partial "filling" of computational cells. For the solution of the obtained difference equations is applied to adaptive modified alternating triangular iterative method of variational type with the highest rate of convergence in the class of two-layer iterative methods. The developed mathematical model and software were used for numerical simulation the wave propagation. The results of numerical experiments was given. Developed numerical algorithms and it computer implementation were used to research the dynamics of wave processes propagation in the presence on free boundary for controlling, evaluation and diagnosis, etc.

**Key words:** wave problem; grid equations; adaptive modified alternating triangular iterative method.

## АДАПТИВНЫЙ МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ПОПЕРЕМЕННО-ТРЕУГОЛЬНЫЙ МЕТОД\*

А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков

Донской государственной технической университет,  
г. Ростов-на-Дону, Россия

**Аннотация.** Работа посвящена разработке адаптивных методов для решения задач конвекции-диффузии. Для данного класса задач построен вариант адаптивного модифицированного попеременно-треугольного метода минимальных поправок и аналитически получены оценки скорости сходимости для данного метода.

**Ключевые слова:** сеточные уравнения с несамосопряженным оператором, адаптивный попеременно-треугольный метод, параллельные алгоритмы решения сеточных уравнений.

**Актуальность и методы исследования.** Часто в прикладных задачах, например при математическом моделировании гидродинамики, теплопереноса, геофльтрации, динамики популяций и других процессов, возникает необходимость решать уравнения вида конвекции-диффузии. В случае использования неявных схем и схем с весами такие задачи приводят к линейным алгебраическим уравнениям с несамосопряженным оператором. Одним из подходов к решению подобных задач является метод симметризации по Гауссу[3]. Недостатком данного метода является увеличение в квадрат раз числа обусловленности оператора задачи.

В классе двухслойных итерационных методов одним из наиболее успешных является предложенный А. А. Самарским попеременно-треугольный метод [1]. Позднее, академиком А.Н. Коноваловым был разработан адаптивный вариант ПТМ [2]. В работе [4] приведено описание модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона, так же приведено описание метода простой итерации в случае несамосопряженного оператора. В [8] продемонстрирована техника повышения скорости сходимости ПТМ с априорной информацией за счет уточнения спектральных оценок предобусловленного оператора. В данной работе разработан вариант модифицированного итерационного попеременно-треугольного метода минимальных поправок для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором и выполнены

---

\* Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 17-11-01286

оценки скорости сходимости. Следует также отметить, что предложенный вариант метода минимальных поправок является отдельным методом. Разработанные алгоритмы были применены для решения сеточных уравнений, полученных в результате аппроксимации трехмерной математической модели гидродинамики мелководных водоемов [9-16]. Описана параллельная реализация алгоритма адаптивного модифицированного итерационного попеременно-треугольного метода минимальных поправок [17-22].

**Модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод.** В конечномерном гильбертовом пространстве  $H$  рассматривается задача об отыскании решения операторного уравнения:

$$Ax = f, \quad A: H \rightarrow H, \quad (1)$$

где  $A$  – линейный, положительно определенный оператор ( $A > 0$ ). Для нахождения задачи (1) будем использовать неявный итерационный процесс:

$$B \frac{x^{m+1} - x^m}{\tau} + Ax^m = f, \quad B: H \rightarrow H. \quad (2)$$

В уравнении (2)  $m$  – номер итерации,  $\tau > 0$  – итерационный параметр, а  $B$  – некоторый обратимый оператор. Обращение оператора  $B$  в (2) должно быть существенно проще, чем непосредственное обращение исходного оператора  $A$  в (1). При построении  $B$  будем исходить из аддитивного представления оператора  $A_0$  – симметричной части оператора  $A$ .

$$A_0 = R_1 + R_2, \quad R_1 = R_2^* \quad (3)$$

Также здесь и далее будем использовать кососимметричную часть оператора  $A$ :

$$A_1 = \frac{A - A^*}{2}.$$

В силу (3)  $(Ay, y) = (A_0y, y) = 2(R_1y, y) = 2(R_2y, y)$ . Поэтому в (3)  $R_1 > 0, R_2 > 0$ . Пусть в (2)

$$B = (D + \omega R_1)D^{-1}(D + \omega R_2), \quad D = D^* > 0, \quad \omega > 0, \quad y \in H, \quad (4)$$

где  $D$  – некоторый оператор.

Поскольку  $A_0 = A_0^* > 0$ , то вместе с (3) это дает  $B = B^* > 0$ . Соотношения (2)-(4) задают модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) решения задачи, если определены операторы  $R_1, R_2$  и указаны способы определения параметров  $\tau, \omega$  и оператора  $D$ .

**Вариационная оптимизация МПТМ.** В нестационарном МПТМ вариационного типа:

$$B \frac{x^{m+1} - x^m}{\tau_{m+1}} + Ax^m = f \quad (5)$$

итерационные параметры  $\tau_{m+1}$  выбирается из соображений минимизации [1, 4]:

$$(\hat{D}^m, z^{m+1}) \rightarrow \min, \hat{D}^m = \hat{D}^m > 0. \quad (6)$$

Критерий (6) вместе с  $z^{m+1} = z^m - \tau_{m+1} B^{-1} A z^m$ , дает

$$(\hat{D}^m - \tau_{m+1} \hat{D} B^{-1} A z^m, z^m - \tau_{m+1} B^{-1} A z^m) \rightarrow \min \quad (7)$$

или

$$(\hat{D}^m, z^m) - \tau_{m+1} (\hat{D} B^{-1} A z^m, z^m) - \tau_{m+1} (\hat{D}^m, B^{-1} A z^m) + \tau_{m+1}^2 (\hat{D} B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m) \rightarrow \min.$$

Минимум достигается при

$$\tau_{m+1} = \frac{(\hat{D} B^{-1} A z^m, z^m) + (\hat{D}^m, B^{-1} A z^m)}{2(\hat{D} B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m)} \quad (8)$$

Итерационные методы вариационного типа (6), (8), для которых  $\hat{D}^m = A^* B^{-1} A$  дают:

$$\begin{aligned} \tau_{m+1} &= \frac{(A^* B^{-1} A B^{-1} A z^m, z^m) + (A^* B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m)}{2(A^* B^{-1} A B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m)} = \\ &= \frac{(A B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m) + (A^* B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m)}{2(B^{-1} A B^{-1} A z^m, A B^{-1} A z^m)} = \\ &= \frac{(A B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m) + (A B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m)}{2(B^{-1} A B^{-1} A z^m, A B^{-1} A z^m)} = \frac{(A B^{-1} A z^m, B^{-1} A z^m)}{(B^{-1} A B^{-1} A z^m, A B^{-1} A z^m)} \end{aligned}$$

Тогда итерационные параметры для МПТМ минимальных поправок вычисляются по формуле:

$$\tau_{m+1} = \frac{(A w^m, w^m)}{(B^{-1} A w^m, A w^m)}, \quad B w^m = A x^m - f \quad m = 0, 1, \dots \quad (9)$$

В случае  $A = A^* > 0$ , итерационные параметры  $\tau_{m+1}$  можно рассчитывать согласно методу скорейшего спуска ( $\hat{D}^m = A$ ):

$$\tau_{m+1} = \frac{(w^m, r^m)}{(A w^m, w^m)}, \quad m = 0, 1, \dots$$

В работе [10] предложено на каждой итерации выбирать шаг  $\tau_{m+1}$ , равномерно распределенный на отрезке  $[\tau_2, \tau_1]$ , где  $\tau_1$  – итерационные



шаг, вычисленный на основе метода скорейшего спуска,  $\tau_2$  – минимальных поправок (невязок).

### **Адаптивная оптимизация МПТМ минимальных поправок.**

Существенным элементом при таком подходе является дополнительная априорная информация об исходной задаче (1). Для МПТМ эту информацию связывают с оценками  $\delta$  и  $\Delta$ :

$$D \leq \frac{1}{\delta} A_0, \quad R_1 D^{-1} R_2 \leq \frac{\Delta}{4} A_0.$$

Запишем оценки параметров МПТМ с учетом введенных обозначений:

$$B = (D + \omega R_1) D^{-1} (D + \omega R_2) = (D - \omega R_1) D^{-1} (D - \omega R_2) + 2\omega A_0,$$

$$(By, y) = \|(D - \omega R_2)y\|_{D^{-1}}^2 + 2\omega(A_0 y, y) \geq 2\omega(A_0 y, y).$$

Получим оценку сверху для скалярного произведения:

$$(A_0 y, y) \leq \frac{1}{2\omega} (By, y),$$

используя замену  $C_0 = B^{-1/2} A_0 B^{-1/2}$ , получим:

$$\gamma_2(C_0) = \frac{1}{2\omega} \quad (10)$$

Оценим  $(A_0 y, y)$  снизу:

$$B = (D + \omega R_1) D^{-1} (D + \omega R_2) = D + \omega A_0 + \omega^2 R_1 D^{-1} R_2 \leq \left( \frac{1}{\delta} + \omega + \frac{\omega^2}{4} \Delta \right) A_0,$$

$$\frac{1}{\left( \frac{1}{\delta} + \omega + \frac{\omega^2}{4} \Delta \right)} (By, y) \leq (A_0 y, y) \Rightarrow \gamma_1(C_0) = \frac{\delta}{\left( 1 + \omega\delta + \frac{\omega^2}{4} \Delta\delta \right)}.$$

Скорость сходимости итерационных методов зависит от числа обусловленности оператора  $C_0$ :

$$\nu(C_0) = \frac{\lambda_{\max}(C_0)}{\lambda_{\min}(C_0)} = \frac{\lambda_{\max}(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2})}{\lambda_{\min}(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2})}. \quad (12)$$

Теперь заметим, что для МПТМ оценка оператора (10)  $2\omega A_0 \leq B$  неулучшаема [2]. С учетом данного факта получим оценку числа обусловленности:

$$\nu(C_0) = \frac{\lambda_{\max}(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2})}{\lambda_{\min}(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2})} \leq \frac{1}{2\omega\lambda_{\min}(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2})} = \max_{y \neq 0} \frac{(y, y)}{2\omega(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2} y, y)} =$$

$$\begin{aligned}
&= \max_{y \neq 0} \frac{(By, y)}{2\omega(A_0y, y)} = \max_{y \neq 0} \frac{\left( (D + \omega A_0 + \omega^2 R_1 D^{-1} R_2)y, y \right)}{2\omega(A_0y, y)} = \\
&= \max_{y \neq 0} \frac{(Dy, y) + \omega(A_0y, y) + \omega^2(D^{-1}R_2y, R_2y)}{2\omega(A_0y, y)} = \\
&= \max_{y \neq 0} \left( \frac{(Dy, y)}{2\omega(A_0y, y)} + \frac{1}{2} + \frac{\omega(D^{-1}R_2y, R_2y)}{2(A_0y, y)} \right) = \max_{y \neq 0} \left( \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{(Dy, y)(D^{-1}R_2y, R_2y)}}{2(A_0y, y)} \cdot \right. \\
&\quad \left. \cdot \left[ \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{(Dy, y)}{(D^{-1}R_2y, R_2y)}} + \omega \sqrt{\frac{(D^{-1}R_2y, R_2y)}{(Dy, y)}} \right] \right).
\end{aligned}$$

Его значение минимально при:

$$\omega = \sqrt{\frac{(Dy, y)}{(D^{-1}R_2y, R_2y)}}. \quad (13)$$

Таким образом, получили оценку для оптимального значения параметра  $\omega$ . С учетом (13) найдем оценку числа обусловленности:

$$\nu(C_0) \leq \max_{y \neq 0} \left( \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{(Dy, y)(D^{-1}R_2y, R_2y)}}{(A_0y, y)} \right) \leq \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{\frac{\Delta}{\delta}} \right) = \frac{1 + \sqrt{\xi}}{2\sqrt{\xi}}, \quad \xi = \frac{\delta}{\Delta},$$

Вектор  $y$  в формуле (13) зададим следующим образом:  $y = w^m$ , где  $w^m$  - вектор поправки. В качестве оператора  $D$  можно взять диагональную часть матрицы  $A$ . Оптимальный оператор  $D$  строится из условия максимизации соотношения  $\xi = \delta/\Delta$ , которое определяет число итераций. В [4] предложена методика расчет оператора  $D$  для решения задачи Пуассона. В работе [5] обобщен данный результат на случай наличия линейной функции источника.

**Усовершенствованный итерационный МПТМ.** Перепишем систему разностных уравнений (1) в виде с однородными граничными условиями, изменив соответствующим образом правую часть [4].

$$Ay = u, \quad Ay = -\sum_{\alpha=1}^3 (a_{\alpha}^{+1} y_{x_{\alpha}})_{\bar{x}_{\alpha}} + qy, \quad x \in \omega, \quad (14)$$

$$y(x) = 0, \quad x \in \gamma, \quad (15)$$

$$u(x) = \varphi(x) + \varphi_1(x)/h_1^2 + \varphi_2(x)/h_2^2 + \varphi_3(x)/h_3^2, \quad x \in \omega,$$

где

$$\varphi_1(x) = \begin{cases} a_1(h_1, x_2, x_3) \cdot \mu(0, x_2, x_3), & x_1 = h_1 \\ 0, & 2h_1 \leq x_1 \leq l_1 - 2h_1 \\ a_1(l_1, x_2, x_3) \cdot \mu(l_1, x_2, x_3), & x_1 = l_1 - h_1 \end{cases}, \quad x_2 \in \omega_2, \quad x_3 \in \omega_3;$$

$$\varphi_2(x) = \begin{cases} a_2(x_1, h_2, x_3) \cdot \mu(x_1, 0, x_3), & x_2 = h_2 \\ 0, & 2h_2 \leq x_2 \leq l_2 - 2h_2 \\ a_2(x_1, l_2, x_3) \cdot \mu(x_1, l_2, x_3), & x_2 = l_2 - h_2 \end{cases}, \quad x_1 \in \omega_1, \quad x_3 \in \omega_3;$$

$$\varphi_3(x) = \begin{cases} a_3(x_1, x_2, h_3) \cdot \mu(x_1, x_2, 0), & x_3 = h_3 \\ 0, & 2h_3 \leq x_3 \leq l_3 - 2h_3 \\ a_3(x_1, x_2, l_3) \cdot \mu(x_1, x_2, l_3), & x_3 = l_3 - h_3 \end{cases}, \quad x_1 \in \omega_1, \quad x_2 \in \omega_2.$$

Функция источников  $q$ , входящая в уравнение (14) носит  $\delta$  – образный характер и в подавляющем большинстве узлов сетки равна 0.

Представим схему итерационного двухслойного модифицированного попеременно-треугольного метода в виде:

$$(D + \omega R_1)D^{-1}(D + \omega R_2) \frac{y^{n+1} - y^n}{\tau_{n+1}} + Ay^n = f, \quad (16)$$

где

$$R_1 y = \sum_{\alpha=1}^3 \left( \frac{a_{\alpha}}{h_{\alpha}} y_{\bar{x}_{\alpha}} + \frac{a_{\alpha x_{\alpha}}}{2h_{\alpha}} y + \frac{1}{6} qy \right), \quad (17)$$

$$R_2 y = -\sum_{\alpha=1}^3 \left( \frac{a_{\alpha}^{+1}}{h_{\alpha}} y_{x_{\alpha}} + \frac{a_{\alpha x_{\alpha}}}{2h_{\alpha}} y - \frac{1}{6} qy \right). \quad (18)$$

Видно, что операторы, введенные в соответствии с равенствами (17) и (18) являются сопряженными на множестве сеточных функций, обращающихся в ноль на границе сетки:

$$R_1 = R_2^*, \quad A = R_1 + R_2.$$

Получены оценки для постоянных  $\Delta$  и  $\delta$

$$\delta D \leq R_1 + R_2, \quad R_1 D^{-1} R_2 \leq \frac{\Delta}{4} (R_1 + R_2), \quad (19)$$

а также сеточная функция  $d(x)$ , определяющая элементы диагональной матрицы  $D$ .

$$d(x) = \sum_{\alpha=1}^3 \left( a_{\alpha}^{+1} + h_{\alpha}^2 \chi_{\alpha} \left| \frac{a_{\alpha x_{\alpha}}}{2h_{\alpha}} - \frac{q}{6} \right| \right) \frac{\theta_{\alpha}}{h_{\alpha}^2}, \quad x \in \omega. \quad (20)$$

Будем считать, что  $v^{\alpha}(x)$  – решение краевой задачи

$$\left( a_\alpha v_{x_\alpha}^\alpha \right)_{x_\alpha} - \frac{q}{3} v^\alpha = - \left| \frac{a_{\alpha x_\alpha}}{2h_\alpha} - \frac{q}{6} \right|, \quad \alpha = 1, 2, 3; \quad x_\alpha \in \omega_\alpha \quad (21)$$

$$v^\alpha = 0, \quad x_\alpha = 0, \quad x_\alpha = l_\alpha.$$

Положим

$$c_\alpha(x_\beta, x_\delta) = \max_{x_\alpha \in \omega_\alpha} v^\alpha(x), \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in \omega, \quad (22)$$

$$\text{где } c_\alpha(x_\beta, x_\delta) = \begin{cases} c_1(x_2, x_3), & (x_2, x_3) \in \omega_2 \times \omega_3, & \text{если } \alpha = 1; \\ c_2(x_1, x_3), & (x_1, x_3) \in \omega_1 \times \omega_3, & \text{если } \alpha = 2; \\ c_3(x_1, x_2), & (x_1, x_2) \in \omega_1 \times \omega_2, & \text{если } \alpha = 3. \end{cases}$$

Рассмотрим теперь другую совокупность трехточечных разностных задач:

$$\left( a_\alpha w_{x_\alpha}^\alpha \right)_{x_\alpha} - \frac{q}{3} w^\alpha = - \frac{a_\alpha^{+1}}{h_\alpha^2}, \quad w^\alpha = 0, \quad x_\alpha = 0, \quad x_\alpha = l_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3; \quad (23)$$

$$x_\alpha \in \omega_\alpha, \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in \omega.$$

Пусть

$$b_\alpha(x_\beta, x_\delta) = \max_{x_\alpha \in \omega_\alpha} w^\alpha(x), \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in \omega, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (24)$$

$$\text{где } b_\alpha(x_\beta, x_\delta) = \begin{cases} b_1(x_2, x_3), & (x_2, x_3) \in \omega_2 \times \omega_3, & \text{если } \alpha = 1; \\ b_2(x_1, x_3), & (x_1, x_3) \in \omega_1 \times \omega_3, & \text{если } \alpha = 2; \\ b_3(x_1, x_2), & (x_1, x_2) \in \omega_1 \times \omega_2, & \text{если } \alpha = 3; \end{cases}$$

$$(\beta, \delta) = \begin{cases} (2, 3), & \text{если } \alpha = 1; \\ (1, 3), & \text{если } \alpha = 2; \\ (1, 2), & \text{если } \alpha = 3. \end{cases}$$

$$\text{Тогда } \left( d \overset{o}{y}, 1 \right) \leq \left( A \overset{o}{y}, \overset{o}{y} \right), \quad \delta \equiv 1.$$

Положим

$$\bar{q} = \max_{(x_1, x_2, x_3) \in \omega} \{ q(x_1, x_2, x_3) \} \quad (25)$$

$$\gamma_1 = \frac{4}{h_1^2} \max \left\{ a_1(0, x_2, x_3), a_1(l_1, x_2, x_3), \max_{0 \leq x_1 \leq l_1 - h_1} \left( \frac{a_1(x_1, x_2, x_3) + a_1(x_1 + h_1, x_2, x_3)}{2} \right) \right\},$$

$$\gamma_2 = \frac{4}{h_2^2} \max \left\{ a_2(x_1, 0, x_2), a_2(x_1, l_2, x_2), \max_{0 \leq x_2 \leq l_2 - h_2} \left( \frac{a_2(x_1, x_2, x_2) + a_2(x_1, x_2 + h_2, x_2)}{2} \right) \right\},$$

$$\gamma_3 = \frac{4}{h_3^2} \max \left\{ a_3(x_1, x_2, 0), a_3(x_1, x_2, 1_3), \max_{0 \leq x_3 \leq l_3 - h_3} \left( \frac{a_3(x_1, x_2, x_3) + a_3(x_1, x_2, x_3 + h_3)}{2} \right) \right\},$$

Введем постоянные величины (коэффициенты) в соответствии с равенствами:

$$k_{1\alpha} = \gamma_\alpha / (\gamma_\alpha + \bar{q} / 3), \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (26)$$

Выражение для определения функции  $d(x)$  запишется так:

$$d(x) = \sum_{\alpha=1}^3 \left( \frac{a_\alpha^{+1}}{h_\alpha^2} + \left( \frac{b_\alpha}{k_{1\alpha}} \right)^{\frac{1}{2}} \left| \frac{a_{\alpha x_\alpha}}{2h_\alpha} - \frac{q}{6} \right| \right) \left( b_\alpha + c_\alpha \left( \frac{b_\alpha}{k_{1\alpha}} \right)^{\frac{1}{2}} \right)^{-1}. \quad (27)$$

Оценка для параметра  $\Delta$  имеет вид

$$\Delta = \max_{\alpha=1,2,3} \left[ \max_{x_\beta \in \omega_\beta, x_\delta \in \omega_\delta} \left( b_\alpha(x_\beta, x_\delta) k_{1\alpha}(x_\beta, x_\delta) \right)^{\frac{1}{2}} + c_\alpha(x_\beta, x_\delta) \right]^2,$$

$$\alpha = 1, 2, 3, \quad x_\beta \in \omega_\beta, \quad x_\delta \in \omega_\delta,$$

$$(\beta, \delta) = \begin{cases} (2, 3), & \text{если } \alpha = 1 \\ (1, 3), & \text{если } \alpha = 2 \\ (1, 2), & \text{если } \alpha = 3. \end{cases}$$

С учетом равенства  $\delta = 1$ , приходим к равенству, определяющему параметр  $\omega_0$ :

$$\omega_0 = 2 / \sqrt{\Delta} \quad (28)$$

В случае применения чебышевского ускорения итерационного процесса для числа итераций  $n_0(\varepsilon)$ , требуемого для достижения заданной точности  $\varepsilon$  справедлива оценка:

$$n_0(\varepsilon) = \frac{\sqrt[4]{\Delta} \ln \left( \frac{2}{\varepsilon} \right)}{2\sqrt{2}}, \quad n_0(\varepsilon) = O \left( \sqrt{N_0} \ln \left( \frac{2}{\varepsilon} \right) \right), \quad N_0 = \max \{N_1, N_2, N_3\}. \quad (29)$$

**Сходимость МПТМ минимальных поправок.** Если  $x^m - x = z^m$  – вектор погрешности,  $w^m = B^{-1}Az^m$  – вектор поправки, то из уравнений (1), (2) получаем:

$$B(\omega)z^{m+1} = B(\omega)z^m - \tau Az^m, \quad (30)$$

данное выражение можно записать в следующем виде:

$$w^{m+1} = w^m - \tau B^{-1}Aw^m,$$

используя замену  $v^m = B^{1/2}w^m, C = B^{-1/2}AB^{-1/2}$ , получим:

$$B^{-1/2}v^{m+1} = B^{-1/2}v^m - \tau B^{-1}AB^{-1/2}v^m \text{ или} \\ v^{m+1} = v^m - \tau Cv^m = (E - \tau C)v^m. \quad (31)$$

Оценим  $\|v^{m+1}\|$ :

$$\|v^{m+1}\| = \|(E - \tau C)v^m\| = \|((\theta E - \tau C_0) + ((1 - \theta)E - \tau C_1))v^m\|,$$

где  $C = C_0 + C_1$ ,  $C_0 = C_0^*$ ,  $C_1 = -C_1^*$ .

Воспользуемся неравенством треугольника:

$$\|v^{m+1}\| \leq \theta \left\| \left( E - \frac{\tau}{\theta} C_0 \right) v^m \right\| + \|(1 - \theta)E - \tau C_1\| \|v^m\|. \quad (32)$$

Оценим первое слагаемое в правой части неравенства (32):

$$\left\| \left( E - \frac{\tau}{\theta} C_0 \right) v^m \right\|^2 = \left\| \left( E - \frac{\tau}{\theta} C_0 \right) B^{1/2} w^m \right\|^2 = \left\| \left( B^{1/2} - \frac{\tau}{\theta} B^{-1/2} A_0 \right) w^m, \left( B^{1/2} - \frac{\tau}{\theta} B^{-1/2} A_0 \right) w^m \right\|^2 = \\ = (B^{1/2} w^m, B^{1/2} w^m) - 2 \frac{\tau}{\theta} (A_0 w^m, w^m) + \left( \frac{\tau}{\theta} \right)^2 (A_0 w^m, B^{-1} A_0 w^m).$$

с учетом того, что минимум отношения  $\tau/\theta$  достигается при

$$\frac{\tau}{\theta} = \frac{(A_0 w^m, w^m)}{(B^{-1} A_0 w^m, A_0 w^m)},$$

получим вариант метода минимальных поправок и оценка запишется:

$$\left\| \left( E - \frac{\tau}{\theta} C_0 \right) v^m \right\|^2 = (B^{1/2} w^m, B^{1/2} w^m) - 2 \frac{(A_0 w^m, w^m)}{(B^{-1} A_0 w^m, A_0 w^m)} (A_0 w^m, w^m) + \\ + \left( \frac{(A_0 w^m, w^m)}{(B^{-1} A_0 w^m, A_0 w^m)} \right)^2 (A_0 w^m, B^{-1} A_0 w^m) = (B^{1/2} w^m, B^{1/2} w^m) - \frac{(A_0 w^m, w^m)^2}{(B^{-1} A_0 w^m, A_0 w^m)} = \\ = (v^m, v^m) - \frac{(A_0 B^{-1/2} v^m, B^{-1/2} v^m)^2}{(B^{-1} A_0 B^{-1/2} v^m, A_0 B^{-1/2} v^m)} = (v^m, v^m) - \frac{(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2} v^m, v^m)^2}{(B^{-1/2} A_0 B^{-1/2} v^m, B^{-1/2} A_0 B^{-1/2} v^m)} = \\ = (v^m, v^m) - \frac{(C_0 v^m, v^m)^2}{(C_0 v^m, C_0 v^m)(v^m, v^m)} = \left( 1 - \frac{(C_0 v^m, v^m)^2}{(C_0 v^m, C_0 v^m)(v^m, v^m)} \right) \|v^m\|^2.$$

В результате чего получим:

$$\left\| \left( E - \frac{\tau}{\theta} C_0 \right) v^m \right\| = \sqrt{1 - \frac{(C_0 v^m, v^m)^2}{(C_0 v^m, C_0 v^m)(v^m, v^m)}} \|v^m\|. \quad (33)$$

Для второго слагаемого (32) с учетом  $(C_1 v^m, v^m) = 0$  имеем:

$$\begin{aligned} \left\| \left( (1-\theta)E - \tau C_1 \right) v^m \right\|^2 &= \left( (1-\theta)v^m, (1-\theta)v^m \right) - \left( \tau C_1 v^m, (1-\theta)v^m \right) + \\ &+ \left( \tau C_1 v^m, \tau C_1 v^m \right) = (1-\theta)^2 (v^m, v^m) + \theta^2 \left( \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m, \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m \right). \end{aligned} \quad (34)$$

Подстановка (33), (34) в (32) дает:

$$\begin{aligned} \|v^{m+1}\| &\leq \theta \left\| \left( E - \frac{\tau}{\theta} C_0 \right) v^m \right\| + \left\| \left( (1-\theta)E - \tau C_1 \right) v^m \right\| = \\ &= \theta \sqrt{1 - \frac{(C_0 v^m, v^m)^2}{(C_0 v^m, C_0 v^m)(v^m, v^m)}} \|v^m\| + \sqrt{(1-\theta)^2 (v^m, v^m) + \theta^2 \left( \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m, \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m \right)} = \\ &= \theta \sqrt{1 - \frac{(C_0 v^m, v^m)^2}{(C_0 v^m, C_0 v^m)(v^m, v^m)}} \|v^m\| + \sqrt{(1-\theta)^2 + \theta^2 \frac{\left( \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m, \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m \right)}{(v^m, v^m)}} \|v^m\|. \end{aligned}$$

Для удобства введем обозначения:

$$\begin{aligned} s &= \sqrt{1 - \frac{(C_0 v^m, v^m)^2}{(C_0 v^m, C_0 v^m)(v^m, v^m)}}, \quad \gamma = \frac{\left( \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m, \frac{\tau}{\theta} C_1 v^m \right)}{(v^m, v^m)}, \\ \tau &= \frac{(A_0 \omega^m, \omega^m) \theta}{(B^{-1} A_0 \omega^m, A_0 \omega^m)}. \end{aligned} \quad (35)$$

Оценка  $\|v^{m+1}\|$  с учетом (35) примет вид:

$$\|v^{m+1}\| \leq \left( \theta s + \sqrt{(1-\theta)^2 + \theta^2 \gamma} \right) \|v^m\| = \left( \theta s + \sqrt{1 - 2\theta + \theta^2 (1 + \gamma)} \right) \|v^m\|.$$

Введем замену переменных  $\theta = \frac{1-\eta}{1+\gamma}$ :

$$\begin{aligned} \|v^{m+1}\| &\leq \left( \frac{1-\eta}{1+\gamma} s + \sqrt{\frac{1+\gamma-2+2\eta+(1-\eta)^2}{1+\gamma}} \right) \|v^m\| = \\ &= \left( \frac{1-\eta}{1+\gamma} s + \sqrt{\frac{1+\gamma-2+2\eta+1-2\eta+\eta^2}{1+\gamma}} \right) \|v^m\|, \\ \|v^{m+1}\| &\leq \left( \frac{1-\eta}{1+\gamma} s + \sqrt{\frac{\gamma+\eta^2}{1+\gamma}} \right) \|v^m\|. \end{aligned} \quad (36)$$

Найдем оптимальный параметр  $\eta$  для этого возьмем производную правой части (36):

$$\left( \frac{1-\eta}{1+\gamma} s + \sqrt{\frac{\gamma+\eta^2}{1+\gamma}} \right)'_{\eta} = -\frac{s}{1+\gamma} + \frac{\eta}{\sqrt{(1+\gamma)(\gamma+\eta^2)}} = 0. \quad (37)$$

Оптимальный  $\eta$  равен:

$$\eta = \sqrt{\frac{s^2\gamma}{(1+\gamma-s^2)}} \quad (38)$$

в силу (37) и  $\left( \frac{1-\gamma}{1+k} s + \sqrt{\frac{\gamma+\eta^2}{1+\gamma}} \right)''_{\eta} > 0.$

Подставим (38) в (36):

$$\begin{aligned} \|v^{m+1}\| &\leq \left( \frac{1 - \sqrt{\frac{s^2\gamma}{(1+\gamma-s^2)}}}{1+\gamma} s + \sqrt{\frac{\gamma + \frac{s^2\gamma}{(1+\gamma-s^2)}}{1+\gamma}} \right) \|v^m\| = \\ &= \left( \frac{1 - \sqrt{\frac{s^2\gamma}{(1+\gamma-s^2)}}}{1+\gamma} s + \sqrt{\frac{\gamma(1+\gamma-s^2) + s^2\gamma}{(1+\gamma)(1+\gamma-s^2)}} \right) \|v^m\| = \\ &= \left( \frac{s - s^2 \sqrt{\frac{\gamma}{(1+\gamma-s^2)}}}{1+\gamma} + \sqrt{\frac{\gamma}{(1+\gamma-s^2)}} \right) \|v^m\| = \\ &= \left( \frac{s + (1+\gamma-s^2) \sqrt{\frac{\gamma}{(1+\gamma-s^2)}}}{1+\gamma} \right) \|v^m\| = \left( \frac{s + \sqrt{\gamma(1+\gamma-s^2)}}{1+\gamma} \right) \|v^m\|. \end{aligned}$$

Таким образом, получим оценку сходимости:



$$\rho \leq \left( \frac{s + \sqrt{\gamma(1 + \gamma - s^2)}}{1 + \gamma} \right). \quad (39)$$

Скорость сходимости МПТМ ( $v^m = B^{1/2}w^m, C_0 = B^{-1/2}A_0B^{-1/2}$ ) зависит от:

$$s = \sqrt{\left( 1 - \frac{(C_0 v^m, v^m)^2}{(C_0 v^m, C_0 v^m)(v^m, v^m)} \right)} = \sqrt{\left( 1 - \frac{(A_0 w^m, w^m)^2}{(A_0 B^{-1} A_0 w^m, w^m)(B w^m, w^m)} \right)}.$$

Воспользуемся неравенством  $xy \leq (ax + y/a)^2/4$ . Данное неравенство выполняется для всех  $a$ .

$$\begin{aligned} s^2 &\leq 1 - \frac{4(A_0 w^m, w^m)^2}{(a(A_0 B^{-1} A_0 w^m, w^m) + (B w^m, w^m)/a)^2} = \\ &= 1 - \frac{4}{(a(C_0 v^m, C_0 v^m)/(C_0 v^m, v^m) + (B w^m, w^m)/a(A_0 w^m, w^m))^2}. \end{aligned}$$

Теперь заметим, что для МПТМ оценка оператора (10)  $2\omega A_0 \leq B$  неулучшаема [2].

$$s^2 \leq 1 - \frac{4}{(a/2\omega + (B w^m, w^m)/a(A_0 w^m, w^m))^2}$$

В качестве параметра  $a$  возьмем  $2\omega b$

$$s^2 \leq 1 - \frac{4}{\left( b + \frac{(B w^m, w^m)}{2\omega b(A_0 w^m, w^m)} \right)^2}.$$

Скорость сходимости метода зависит от  $(B w^m, w^m)/(2\omega A_0 w^m, w^m)$ .

Оценим данное выражение

$$\begin{aligned} \frac{(B w^m, w^m)}{2\omega(A_0 w^m, w^m)} &= \frac{((D + \omega A_0 + \omega^2 R_1 D^{-1} R_2) w^m, w^m)}{2\omega(A_0 w^m, w^m)} = \\ &= \left( \frac{(D w^m, w^m)}{2\omega(A_0 w^m, w^m)} + \frac{1}{2} + \frac{\omega(D^{-1} R_2 w^m, R_2 w^m)}{2(A_0 w^m, w^m)} \right) = \left( \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{(D w^m, w^m)(D^{-1} R_2 w^m, R_2 w^m)}}{2(A_0 w^m, w^m)} \right). \end{aligned}$$

$$\left[ \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{(Dw^m, w^m)}{(D^{-1}R_2w^m, R_2w^m)}} + \omega \sqrt{\frac{(D^{-1}R_2w^m, R_2w^m)}{(Dw^m, w^m)}} \right]$$

Значение  $\omega$  минимально при

$$\omega = \sqrt{\frac{(Dw^m, w^m)}{(D^{-1}R_2w^m, R_2w^m)}}.$$

Таким образом, оптимальный  $y$  в формуле (39) задается:  $y = w^m$ , где  $w^m$  – вектор поправки. Получили оценку для оптимального значения параметра  $\omega$ .

$$\nu = \max_{y \neq 0} \left( \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{(Dy, y)(D^{-1}R_2y, R_2y)}}{(A_0y, y)} \right) \leq \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{\frac{\Delta}{\delta}} \right) = \frac{1 + \sqrt{\xi}}{2\sqrt{\xi}}, \quad \xi = \frac{\delta}{\Delta}.$$

Возьмем в качестве  $b = \nu^{1/2}$ , при этом нетрудно убедиться, что выражение, стоящее в правой части (39), меньше единицы при  $s < 1$ . Для  $s$  и  $\gamma$  имеют место оценки:

$$s \leq \sqrt{1 - \frac{4}{(\nu^{1/2} + \nu^{-1/2})^2}} = \frac{\nu - 1}{\nu + 1} = s_{\max}; \quad (40)$$

$$\gamma = \frac{(B^{-1}A_1w^m, A_1w^m)}{(B^{-1}A_0w^m, A_0w^m)} (1 - s^2) \leq \frac{(B^{-1}A_1w^m, A_1w^m)}{(B^{-1}A_0w^m, A_0w^m)},$$

где  $\nu$  – число обусловленности матрицы  $C_0$ .

Введем обозначение

$$k = \frac{(B^{-1}A_1w^m, A_1w^m)}{(B^{-1}A_0w^m, A_0w^m)}, \quad \gamma = k(1 - s^2). \quad (41)$$

Возьмем производную по  $s$  от правой части (39) с учетом (41):

$$\left( \frac{s + (1 - s^2)\sqrt{k(k+1)}}{1 + k(1 - s^2)} \right)'_s = \frac{(1+k) - 2s\sqrt{k(k+1)} + ks^2}{(1+k(1-s^2))^2} \geq 0. \quad (42)$$

Оценка (39) с учетом (42) запишется в виде:

$$\rho \leq \left( \frac{s_{\max} + \sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)}}{1 + \gamma} \right). \quad (43)$$

Умножим числитель и знаменатель выражения (43) на

$$\left( s_{\max} \gamma + \sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)} \right) / (1 + \gamma),$$

в результате получим:

$$\rho \leq s_{\max} \frac{\gamma / s_{\max} + \sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)}}{s_{\max} \gamma + \sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)}}.$$

В силу (40) получим:

$$\rho \leq \frac{v \sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)} + \gamma - 1}{\sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)} - \gamma} \quad \text{или}$$

$$v \frac{\sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)} + \gamma + 1}{\sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)} - \gamma}$$

$$\rho \leq \frac{v^* - 1}{v^* + 1}, \quad (44)$$

где

$$v^* = v \frac{\sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)} + \gamma}{\sqrt{\gamma(1 + \gamma - s_{\max}^2)} - \gamma}. \quad (45)$$

Выражение (45) с учетом (41),(42) примет вид:

$$v^* = v (\sqrt{1+k} + \sqrt{k})^2, \quad (46)$$

где  $v$  – число обусловленности матрицы  $C_0$ .

Для монотонных схем [3]:  $Pe < 2$  ( $Pe$  – сеточное число Пекле) имеет место ограничение  $k < 1$ . Получим оценку параметра  $v^*$ :

$$v^* < v(3 + 2\sqrt{2}).$$

Таким образом, алгоритм расчета сеточных уравнений запишется в виде:

$$r^m = Ax^m - f, \quad (47)$$

$$B(\omega_m)w^m = r^m, \quad (48)$$

$$\omega_m^* = \sqrt{\frac{(Dw^m, w^m)}{(D^{-1}R_2w^m, R_2w^m)}}, \quad (49)$$

$$s_m^2 = 1 - \frac{(A_0w^m, w^m)^2}{(B^{-1}A_0w^m, A_0w^m)(Bw^m, w^m)}, \quad (50)$$

$$k_m = \frac{(B^{-1}A_1 w^m, A_1 w^m)}{(B^{-1}A_0 w^m, A_0 w^m)}, \quad (51)$$

$$\theta_m = \frac{1 - \sqrt{\frac{s_m^2 k_m}{1 + k_m}}}{1 + k_m (1 - s_m^2)}, \quad (52)$$

$$\tau_{m+1} = \theta_m \frac{(A_0 w^m, w^m)}{(B^{-1}A_0 w^m, A_0 w^m)}, \quad (53)$$

$$x^{m+1} = x^m - \tau_{m+1} w^m, \quad (54)$$

$$\omega_{m+1} = \omega_m^{\circ}.$$

(55)

**Результаты исследования.** В работе построен вариант модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода минимальных поправок для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором и выполнены оценки скорости сходимости. Из полученной оценки следует то, что скорость сходимости итерационных методов зависит от числа обусловленности симметричной части оператора  $A$ . Этот факт послужил основой для построения варианта попеременно-треугольного метода, который показал свою эффективность для умеренных чисел Пекле. Отметим, что разработанный вариант метода минимальных поправок (53) совпадает с классическим вариантом данного метода (9) в самосопряженном случае.

### Библиографический список

1. Самарский А.А. Теория разностных схем. М. Наука, 1989.
2. Коновалов А.Н. К теории попеременно - треугольного итерационного метода // Сибирский математический журнал, 2002, 43:3, с. 552-572.
3. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М., Эдиториал УРСС, 1999.
4. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М. Наука, 1978.
5. Сухинов А.И. Модифицированный попеременно – треугольный метод для задач теплопроводности и фильтрации// Вычислительные системы и алгоритмы. – Ростов – на– Дону: Изд-во РГУ,1984. – С. 52-59.
6. Чистяков А.Е. Трехмерная модель движения водной среды в Азовском море с учетом транспорта солей и тепла// Известия ЮФУ. Технические науки. Тематический выпуск «Актуальные проблемы

математического моделирования». – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2009. – №8(97). – С 75-82.

7. Чистяков А.Е. Теоретические оценки ускорения и эффективности параллельной реализации ПТМ скорейшего спуска// Известия ЮФУ. Технические науки. Тематический выпуск «Актуальные проблемы математического моделирования». – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2010, №6(107). С 237-249.

8. Сухинов А.И., Шиненя А.В. Улучшение оценки параметра  $\cdot 1$  попеременно-треугольного итерационного метода с априорной информацией// Известия ЮФУ. Технические науки. Тематический выпуск «Актуальные проблемы математического моделирования». – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2010, №6(107). С 7-15.

10. Сухинов, А.И. Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков // Математическое моделирование. – 2012. – Т.24, №1. – С. 3-21.

11. Сухинов, А.И. Математическая модель расчета прибрежных волновых процессов / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.Ф. Тимофеева, А.В. Шишени // Математическое моделирование. – 2012. – Т.24, №8. – С. 32–44.

12. Сухинов, А.И. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежной зоне мелководных водоемов / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 12. — С. 65–82.

13. Сухинов, А.И. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежных водных системах на многопроцессорной вычислительной системе / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2014. – Т. 15, № 4. – С. 610-620.

14. Сухинов, А.И. Сравнение вычислительных эффективностей явной и неявной схем для решения задачи транспорта наносов в прибрежных водных системах / А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко, С.А. Шретер // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2015. – Т. 16, № 3. – С. 328-338.

15. Никитина, А.В. Применение схем повышенного порядка точности для решения задач биологической кинетики на многопроцессорной вычислительной системе / А.В. Никитина, А.А. Семенякина, А.Е. Чистяков, Е.А. Проценко, И.В. Яковенко // Фундаментальные исследования. – 2015. – № 12–3. – С. 500-504.

16. Sukhinov, A.I. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs / A.I. Sukhinov, A.E. Chistyakov,

E.A. Protsenko // *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2014. – Т. 6, № 4. – С. 351-363.

17. Никитина, А.В. Дифференциально-игровая модель предотвращения заморов в мелководных водоемах / А.В. Никитина, М.В. Пучкин, И.С. Семенов, А.И. Сухинов, Г.А. Угольницкий, А.Б. Усов, А.Е. Чистяков // *Управление большими системами: сборник трудов*, 2015. – № 55. – С. 343-361.

18. Sukhinov, A.I. Mathematical modeling of sediment transport in the coastal zone of shallow reservoirs / A.I. Sukhinov, A.E. Chistyakov, E.A. Protsenko // *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2014. – Vol. 6, Issue 4. – P. 351-363.

19. Petrov Igor B. Application of grid-characteristic method for numerical solution of deformable solid mechanics dynamical problems // *Computational Mathematics and Information Technologies*. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 1-20.

20. Sukhinov A. I., Sidoryakina V. V., Sukhinov A.A. Sufficient convergence conditions for positive solutions of linearized two-dimensional sediment transport problem // *Computational Mathematics and Information Technologies*. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 21-35.

21. Nikitina A.V., Semenyakina A.A. Mathematical modeling of eutrophication processes in Azov Sea on supercomputers // *Computational Mathematics and Information Technologies*. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp 82-101.

22. Chistyakov A.E., Protsenko E.A., Timofeeva E.F. Mathematical modeling of oscillatory processes with a free boundary // *Computational Mathematics and Information Technologies*. – 2017. Vol.1, No 1. – Pp. 102-112.

## METADATA

**Title:** An adaptive modified alternating-triangular method.

**Authors:** A.I. Sukhinov, A.E. Chistyakov.

**Abstract:** The paper covers the development of adaptive methods for solving convection-diffusion problems. For this class of problems a version of minimal correction adaptive modified alternating-triangular method was developed, as well the convergence rate of the method was analytically estimated. Numerical results have been presented for solving real hydrodynamical problem in shallow water using parallel algorithm of developed method.

**Key words:** wave problem; grid equations; adaptive modified alternating triangular iterative method.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ОПТИМАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ МОРЯ<sup>§§§</sup>

В.П. Шутяев, Е.И. Пармузин  
Институт вычислительной математики РАН,  
г. Москва, Россия

**Аннотация.** Предложены алгоритмы исследования чувствительности оптимального решения к погрешностям данных наблюдений в задаче вариационного усвоения данных о температуре поверхности моря с целью восстановления потоков тепла для нестационарной системы уравнений термодинамики. Представлены численные эксперименты в приложении к модели термодинамики Балтийского моря.

**Ключевые слова:** математическое моделирование; вариационное усвоение данных; оптимальное управление; сопряженные уравнения; чувствительность к погрешностям

**Введение.** При математическом моделировании изменений климата для различных районов планеты важную роль играет теория чувствительности избранных функционалов по отношению к характеристикам континентов, Мирового океана, начальным данным, внешним источникам и внутренним параметрам задачи. Исследование чувствительности климата позволяет на основе реальных данных оценить ретроспективно качество моделей и найти новые механизмы, ответственные за формирование климата.

В настоящее время в связи с исследованиями глобальных изменений на планете Земля очень важной является проблема получения и рационального использования данных измерений с целью ретроспективного анализа в различных областях знаний. Математическая модель данной проблемы может быть сформулирована как задача об усвоении и обработке многомерных (включающих зависимость от временной и пространственных переменных) данных, представляющая собой одну из задач оптимального управления (см. [1]-[5]). Наряду с разработкой и обоснованием алгоритмов численного решения задач вариационного усвоения данных наблюдений, важную роль играют

---

<sup>§§§</sup> Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-11-00609, исследования в разделах 2-3) и РФФИ (проект 12-01-00322, в рамках которого были проведены численные расчеты)

свойства самого оптимального решения (см. [6]-[9]). Чрезвычайно важным является вопрос о чувствительности оптимальных решений задач вариационного усвоения к погрешностям данных наблюдений и параметрам моделей, малоисследованный до последнего времени.

В настоящей работе рассматривается проблема исследования чувствительности оптимального решения задачи вариационного усвоения данных наблюдений о температуре поверхности моря для модели термодинамики в постановке, аналогичной введенной в работе [5]. На основе соотношений, связывающих погрешности оптимального решения задачи вариационного усвоения с ошибками данных наблюдений через гессиан функционала стоимости, предложены алгоритмы вычисления коэффициентов чувствительности как норм операторов отклика, возникающих в уравнениях для погрешностей.

**Задача об усвоении данных наблюдений для модели термодинамики моря.** Рассмотрим модель термодинамики моря в виде ([10], [11]):

$$\begin{aligned}
 T_t + (\bar{U}, \text{Grad})T - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad } T) &= f_T \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \\
 T &= T_0 \quad \text{при } t = t_0 \quad \text{в } D, \\
 -\nu_T \frac{\partial T}{\partial z} &= Q \quad \text{на } \Gamma_S \times (t_0, t_1), \quad \frac{\partial T}{\partial N_T} = 0 \quad \text{на } \Gamma_{w,c} \times (t_0, t_1), \\
 \bar{U}_n^{(-)} T + \frac{\partial T}{\partial N_T} &= \bar{U}_n^{(-)} d_T + Q_T \quad \text{на } \Gamma_{w,op} \times (t_0, t_1), \\
 \frac{\partial T}{\partial N_T} &= 0 \quad \text{на } \Gamma_H \times (t_0, t_1),
 \end{aligned} \tag{1}$$

где  $T = T(x, y, z, t)$  – неизвестная функция температуры,  $t \in (t_0, t_1)$ ,  $(x, y, z) \in D = \Omega \times (0, H)$ ,  $\Omega \subset R^2$ ,  $H = H(x, y)$  – функция рельефа дна,  $Q = Q(x, y, t)$  – поток тепла через верхнюю границу,  $\bar{U} = (u, v, w)$ ,  $\hat{a}_T = \text{diag}((a_T)_{ii})$ ,  $(a_T)_{11} = (a_T)_{22} = \mu_T$ ,  $(a_T)_{33} = \nu_T$ ,  $f_T = f_T(x, y, z, t)$  – заданные функции. Граница области  $\Gamma \equiv \partial D$  представляется как объединение четырех непересекающихся частей  $\Gamma_S, \Gamma_{w,op}, \Gamma_{w,c}, \Gamma_H$ , где  $\Gamma_S = \Omega$  (невозмущенная поверхность моря),  $\Gamma_{w,op}$  – жидкая (открытая) часть вертикальной боковой границы,  $\Gamma_{w,c}$  – твердая часть вертикальной боковой границы,  $\Gamma_H$  – дно моря. Другие обозначения и детальное описание постановки задачи можно найти в работах [5], [10].

Задачу (1) можно записать в форме операторного уравнения:



$$\begin{aligned} T_t + LT &= F + BQ, \quad t \in (t_0, t_1), \\ T &= T_0 \quad \text{при } t = t_0, \end{aligned} \quad (2)$$

где равенство понимается в слабом смысле, а именно:

$$(T_t, \mathbf{H}) + (LT, \mathbf{H}) = (F, \mathbf{H}) + (BQ, \mathbf{H}) \quad \forall \mathbf{H} \in W_2^1(D), \quad (3)$$

при этом  $L, F, B$  определяются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} (LT, \mathbf{H}) &\equiv \int_D (-T \operatorname{Div}(\bar{U} \mathbf{H})) + \int_{\Gamma_{w,op}^-} \bar{U}_n^{\langle + \rangle} T \mathbf{H} d\Gamma + \int_D \mathcal{S} \operatorname{Grad}(T) \cdot \operatorname{Grad}(\mathbf{H}) dD, \\ F(\mathbf{H}) &= \int_{\Gamma_{w,op}^-} (Q_T + \bar{U}_n^{\langle - \rangle} d_T) \mathbf{H} dT + \int_D f_T \mathbf{H} dD, \\ (T_t, \mathbf{H}) &= \int_D T_t \mathbf{H} dD, \quad (BQ, \mathbf{H}) = \int_{\Omega} Q \mathbf{H}|_{z=0} d\Omega, \end{aligned}$$

а функции  $\mathcal{S}, Q_T, f_T, Q$  таковы, что равенство (3) имеет смысл. Свойства оператора  $L$  исследованы в работе [5].

Мы рассмотрим задачу об усвоении данных о температуре поверхности моря (см. [5]). Предположим, что в задаче (1) функция  $Q \in L_2(\Omega \times (t_0, t_1))$  неизвестна. Пусть задана функция данных наблюдений  $T_{\text{obs}}(x, y, t)$  на  $\bar{\Omega} \equiv \Omega \cup \partial\Omega$  при  $t \in (t_0, t_1)$ , которая по своему физическому смыслу есть приближение к функции поверхностной температуры на  $\Omega$ , т.е. к  $T|_{z=0}$ . Предполагаем, что  $T_{\text{obs}} \in L_2(\Omega \times (t_0, t_1))$ , однако большей гладкостью функция  $T_{\text{obs}}$  может не обладать, поэтому ее нельзя использовать в качестве граничного условия на  $\Gamma_S$ . Допускается случай, когда  $T_{\text{obs}}$  имеется лишь на некотором подмножестве из  $\Omega \times (t_0, t_1)$ , характеристическую функцию которого обозначим через  $m_0$ . Вне этого подмножества для определенности считаем  $T_{\text{obs}}$  тривиальной.

Рассмотрим задачу об усвоении данных о температуре поверхности в виде: найти  $T$  и  $Q$ , такие что

$$\begin{cases} T_t + LT &= F + BQ, \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \\ T &= T_0 \quad \text{при } t = t_0 \\ J(Q) &= \inf_Q J(Q), \end{cases} \quad (4)$$

где

$$J(Q) = \frac{\alpha}{2} \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} |Q - Q^{(0)}|^2 d\Omega dt + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_1} \int_{\Omega} m_0 |T|_{z=0} - T_{\text{obs}}|^2 d\Omega dt, \quad (5)$$

$Q^{(0)} = Q^{(0)}(x, y, t)$  – заданная функция,  $\alpha = const > 0$ . Функционал  $J$  определяет среднеквадратичное отклонение от наблюдаемых величин.

При  $\alpha > 0$  поставленная задача вариационного усвоения данных имеет единственное решение. Существование оптимального решения следует из классических результатов теории экстремальных задач, так как нетрудно показать, что решение задачи (2) непрерывно зависит от потока  $Q$  (имеют место априорные оценки в соответствующих функциональных пространствах). При  $\alpha = 0$  задача имеет решение не всегда, однако как показано в работе [5], имеет место однозначная и плотная разрешимость, что позволяет построить последовательность регуляризованных решений, минимизирующую функционал.

Система оптимальности, которая определяет решение сформулированной задачи вариационной ассимиляции данных (4)-(5) согласно необходимому условию  $gradJ = 0$ , имеет вид:

$$T_i + LT = F + BQ \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \quad (6)$$

$$T = T_0 \quad \text{при } t = t_0,$$

$$-(T^*)_i + LT^* = Bm_0(T - T_{obs}) \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \quad (7)$$

$$T^* = 0 \quad \text{при } t = t_1,$$

$$\alpha(Q - Q^{(0)}) + T^* = 0 \quad \text{на } \Omega \times (t_0, t_1), \quad (8)$$

где  $L^*$  – оператор, сопряженный к  $L$ .

В дальнейшем мы предполагаем, что  $\text{supp}(m_0) = \bar{\Omega} \times [t_0, t_1]$  и исследуем вопрос о чувствительности оптимального решения  $Q$  к входным данным, а именно к погрешностям задания функций  $T_{obs}$  и  $Q^{(0)}$ .

**Алгоритмы исследования чувствительности оптимального решения к погрешностям данных наблюдений.** В результате решения задачи вариационного усвоения данных (6)-(8) мы получаем функцию полного потока  $Q$ , которая является оптимальным решением в смысле минимизации функционала (5). Это решение зависит от функции данных наблюдений  $T_{obs}$  на поверхности моря. Важным является вопрос о чувствительности оптимального решения к изменениям функции  $T_{obs}$ . Этот вопрос имеет большое значение с точки зрения прогноза, поскольку оптимальное решение, найденное в результате решения задачи вариационного усвоения, используется в дальнейшем для интегрирования модели на следующем временном интервале. В настоящем разделе рассматриваются алгоритмы исследования чувствительности оптимального решения к погрешностям данных наблюдений.

Пусть данные наблюдений заданы с ошибками:

$$Q^{(0)} = \bar{Q} + \xi_1, T_{\text{obs}} = \bar{T} |_{z=0} + \xi_2, \quad (9)$$

где  $\bar{T} \in L_2(\Omega \times (t_0, t_1))$ , а  $\bar{T}$  есть точное решение прямой задачи при  $Q = \bar{Q}$ :

$$\begin{aligned} \bar{T}_t + L\bar{T} &= F + B\bar{Q} \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \\ \bar{T} &= T_0 \quad \text{при } t = t_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Функции  $\xi_1, \xi_2$  можно рассматривать как погрешности входных данных  $Q^{(0)}$  и  $T_{\text{obs}}$  соответственно. Влияние этих ошибок на оптимальное решение  $Q$ , полученное из системы оптимальности (6)–(8), исследовалось в работах [6, 12], где показано, что уравнение для погрешности оптимального решения при  $\alpha > 0$  имеет единственное решение

$$\delta Q = \alpha H^{-1} \xi_1 + H^{-1} R \xi_2, \quad (11)$$

где  $H = H_0 + \alpha E$ ,  $E$  – единичный оператор,  $H_0$  определяется на  $v \in L_2(\Omega \times (t_0, t_1))$  последовательным решением задач:

$$\begin{aligned} \psi_t + L\psi &= Bv \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \\ \psi &= 0 \quad \text{при } t = t_0, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} -(\psi^*)_t + L^*\psi^* &= Bm_0\psi \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \\ \psi^* &= 0 \quad \text{при } t = t_1, \end{aligned} \quad (13)$$

$$H_0 v = \psi^* \quad \text{на } \Omega \times (t_0, t_1), \quad (14)$$

а оператор  $R$  действует на функции  $g \in L_2(\Omega \times (t_0, t_1))$  по формуле  $Rg = \theta^* |_{z=0}$ , где  $\theta^*$  – решение сопряженной задачи

$$\begin{aligned} -(\theta^*)_t + L^*\theta^* &= Bm_0g \quad \text{в } D \times (t_0, t_1), \\ \theta^* &= 0 \quad \text{при } t = t_1. \end{aligned}$$

Заметим, что оператор  $H$  есть гессиан функционала  $J$ , определенного формулой (5).

Таким образом, погрешность оптимального решения  $\delta Q$  в явном виде выражается через погрешности исходных данных  $\xi_1, \xi_2$ . В работе [12] детально исследованы свойства операторов задачи и приведены оценки для коэффициентов чувствительности, описывающих чувствительность оптимального решения задачи вариационного усвоения данных наблюдений для модели динамики моря. В качестве характеристики чувствительности оптимального решения к ошибкам данных наблюдений мы рассмотрим величину

$$r = \sqrt{PH_0(H_0 + \alpha E)^{-2}P}, \quad (15)$$

где  $H_0$  задается формулами (12)–(14). Коэффициент  $r$  характеризует величину нормы оператора отклика  $H^{-1}R$  в уравнении (11). Отметим, что в качестве нормы в (15) можно рассматривать верхнюю оценку спектра оператора  $H_0(H_0 + \alpha E)^{-2}$ . При конечномерной аппроксимации оператор  $H_0$  является матрицей и коэффициент  $r$  вычисляется по формуле:

$$r = \sup_k \frac{\sqrt{\mu_k}}{\alpha + \mu_k}, \quad (16)$$

где  $\mu_k$  – собственные значения  $H_0$ , а  $\frac{\sqrt{\mu_k}}{\alpha + \mu_k}$  – сингулярные числа оператора  $H^{-1}R$ .

На основе изложенного выше можно сформулировать следующий алгоритм вычисления коэффициента чувствительности оптимального решения к ошибкам данных наблюдений:

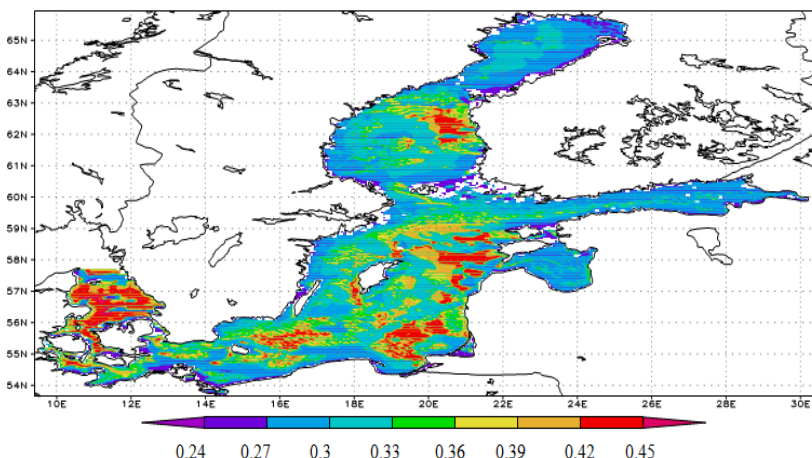
- 1) вычислить гессиан  $H_0$ , определяемый по формулам (12)–(14);
- 2) найти собственные числа гессиана  $H_0$ ;
- 3) вычислить коэффициент чувствительности  $r$  по формуле (16).

Здесь следует подчеркнуть, что при конечномерной аппроксимации  $H_0$  оказывается плохо обусловленной матрицей, у которой наименьшее собственное число  $\mu_{\min}$  близко к нулю. В этом

случае при  $\alpha = 0$  коэффициент  $r = \frac{1}{\sqrt{\mu_{\min}}}$  может быть достаточно

большим, т.е. оптимальное решение может быть очень чувствительным к ошибкам наблюдений. Это означает, что в данной задаче необходимо введение регуляризатора с параметром  $\alpha > 0$ , что сделает задачу определения оптимального решения устойчивой по отношению к ошибкам наблюдений.

**Результаты численных экспериментов.** Для численных экспериментов мы воспользовались трехмерной численной моделью гидротермодинамики Балтийского моря, разработанной в ИВМ РАН на основе метода расщепления [13] и дополненной процедурой ассимиляции [5] температуры поверхности с целью восстановления потоков тепла. Приведем некоторые результаты численных экспериментов по исследованию чувствительности оптимального решения.



**Рис. 1.** Сингулярные числа оператора  $H^{-1}R$  после 1000 шагов расчета

На рис. 1 представлены сингулярные числа оператора  $H^{-1}R$ , которые определяют коэффициент чувствительности  $\gamma$ . Наибольшие сингулярные числа соответствуют точкам  $x, y$ , лежащим вблизи областей с небольшой глубиной, особенно в местах на склонах впадин. Таким образом, оптимальное решение оказывается чувствительным к погрешностям наблюдений в точках поверхности вблизи этих областей, и устойчивость задачи о восстановлении потоков тепла на поверхности может ухудшаться в этих точках.

**Заключение.** В настоящей работе рассмотрены численные алгоритмы исследования чувствительности решения задачи вариационного усвоения данных о температуре поверхности моря с целью восстановления потоков тепла на поверхности. Уравнение для погрешности оптимального решения через ошибки данных наблюдений связано с гессианом исходного функционала наблюдений. Это уравнение приводит к определению коэффициентов чувствительности как норм операторов отклика, которые характеризуют степень влияния ошибок данных наблюдений на оптимальное решение задачи вариационного усвоения. Предложенная методология позволяет определять подобласти, в которых оптимальное решение наиболее чувствительно к ошибкам наблюдений при вариационном усвоении данных, обработке изображений, в случае, когда значения ошибок заранее не известны.

### **Библиографический список**

1. Marchuk G.I. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. – Dordrecht: Kluwer, 1995. - 466p.
2. Marchuk G.I., Penenko V.V. Application of optimization methods to the problem of mathematical simulation of atmospheric processes and environment // In: Modelling and Optimization of Complex Systems: Proc. of the IFIP-TC7 Working conf. - New York: Springer, 1978, pp. 240-252.
3. Le Dimet F.X., Talagrand O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus. – 1986. - V.38A. - P. 97-110.
4. Шутяев В.П. Операторы управления и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. - М.: Наука, 2001. -239 с.
5. Агошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П. Численный алгоритм вариационной ассимиляции данных наблюдений о температуре поверхности океана // ЖВМ и МФ. – 2008. - Т.48, №8. - С.1371-1391.
6. Le Dimet F.-X., Shutyaev V. On deterministic error analysis in variational data assimilation // Nonlinear Processes in Geophysics. – 2005. - V.12. - P.481-490.
7. Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.P. On analysis error covariances in variational data assimilation // SIAM J. Sci. Comput. – 2008. - V.30, no.4. - P.1847-1874.
8. Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.P. On optimal solution error covariances in variational data assimilation problems // J. Comp. Phys. – 2010. - V.229. - P.2159-2178.
9. Gejadze I., Shutyaev V.P., Le Dimet F.-X. Analysis error covariance versus posterior covariance in variational data assimilation // Quartely Journal of the Royal Meteorological Society. – 2013. - V.139. – P.1826-1841.
10. Алексеев В.В., Залесный В.Б. Численная модель крупномасштабной динамики океана // Вычислительные процессы и системы. - М.: Наука, 1993, с. 232-253.
11. Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б. Математические модели в геофизической гидродинамике и численные методы их реализации. - Л.: Гидрометеоиздат, 1987. - 352 с.
12. Parmuzin E.I., Shutyaev V.P. The study of solution sensitivity for the variational observation data assimilation problem in the Black Sea dynamics model // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2013. - V.28, no.1. - P.37-52.
13. Zalesny V.B., Gusev A.V., Chernobay S.Yu., Aps R., Tamsalu R., Kujala P., Rytkönen J. The Baltic Sea circulation modelling and assessment of marine pollution // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. – 2014. - V.29, no.2. - P.129-138.

## METADATA

**Title:** Research the optimal solution sensitivity of variational data assimilation problem for a model of sea thermodynamics.

**Authors:** V.P. Shutyaev, E.I. Parmuzin.

**Abstract:** Algorithms are proposed for researching the sensitivity of the optimal solution to the errors of the observational data in the problem of variational assimilation of the sea surface temperature data with the aim of restoring heat fluxes for the nonstationary system of thermodynamic equations. Numerical experiments are presented in an application to the model of the thermodynamics of the Baltic Sea.

**Key words:** mathematical modeling; variational data assimilation; optimal control; adjoint equations; sensitivity to errors.

Научное издание

**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ  
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ,  
ОБРАБОТКИ ИЗОБРАЖЕНИЙ И  
ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ 2017  
(СПММОИИПВ-2017)**

Труды  
Международной научной конференции

Том I

(пос. Дивноморское, г. Геленджик, Краснодарский край  
4 – 11 сентября 2017 г.)

---

В печать 10.11.2017.  
Формат 60x84/16. Объём 20 усл. п.л.  
Заказ № 28/11. Цена свободная

---

ООО «ДГТУ-Принт»  
Адрес полиграфического предприятия:  
344000, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1.