Никитина Алла Валерьевна – e-mail: nikitina.vm@gmail.com; тел.: 89515168538; кафедра высшей математики; к. ф.-м.н.; доцент.

Семенов Илья Сергеевич – e-mail: flanker555@yandex.ru; тел.: 89085029807; кафедра высшей математики; аспирант.

Сухинов Александр Иванович – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет»; e-mail: sukhinov@gmail.com; 347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44; тел.: 89281021106; д.ф.-м.н.; профессор.

Nikitina Alla Valer`evna – e-mail: nikitina.vm@gmail.com; phone: +79515168538; the department of higher mathematics; cand. of pthis.-math. sc. associate professor.

Semenov Ilya Sergeevich – e-mail: flanker555@yandex.ru; phone: +79085029807; the department of higher mathematics; postgraduate student.

УДК 519.6:532.5

И.С. Семенов

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СЛАУ ДЛЯ ЗАДАЧ ДИНАМИКИ ПОПУЛЯЦИЙ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К АКВАТОРИИ АЗОВСКОГО МОРЯ

Работа посвящена разработке параллельного алгоритма, учитывающего архитектуру суперЭВМ с распределенной памятью. Параллельный алгоритм разрабатывается для численного решения задачи биологической кинетики на примере модели взаимодействия планктона и рыб. В работе для численного расчета модельной задачи динамики планктонных и рыбных популяций используются методы решения СЛАУ вариационного типа, а также их параллельная реализация на многопроцессорной вычислительной системы с распределенной памятью. Использование библиотеки MPI обеспечивает лучшее распределение ресурсов компьютера и прирост эффективности алгоритма на распределенных вычислительных системах.

Математическая модель; планктон; алгоритм; эффективность; k-means; MPI; Азовское море.

I.C. Semenov

DEVELOPMENT OF METHODS OF THE SOLUTION OF SLAE FOR THE PROBLEMS OF THE DYNAMICS OF POPULATIONS IN RELATION TO THE WATER AREA OF THE AZOV SEA

The work is devoted to the development of a parallel algorithm that takes into account the architecture of supercomputers with distributed memory. The parallel algorithm is developed for numerical solution of the problem of biological kinetics on the example of model of interaction of plankton and fish. In the work for the numerical calculation of the model problem of the dynamics of plankton and fish populations are used methods of the solution of SLAE of variational type, as well as their parallel implementation on multiprocessor computer systems with distributed memory. Using the MPI library provides a better distribution of the resources of your computer and increases the effectiveness of the algorithm on distributed computing systems.

Mathematical model; plankton; algorithm; efficiency; k-means; MPI; the Sea of Azov.

Введение. С развитием вычислительной техники возникает необходимость в создании эффективных алгоритмов, предназначенных для высокопроизводительных систем. На сегодняшний день суперЭВМ используются во всех сферах человеческой жизни. При численной реализации математических моделей требуется создание высокоэффективных параллельных алгоритмов. При переходе от непрерывных моделей к дискретным возникает необходимость в решении систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) большой размерности. В работе представлены методы решения СЛАУ вариационного типа, а также их параллельная реализация на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью.

Постановка задачи. Рассмотрим нелинейную пространственно-неоднородную 3D-модель взаимодействия планктона и популяции промысловой рыбы пеленгас: “рыба – фитопланктон – зоопланктон – питательные вещества – детрит”, которая описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных в области G, представляющей собой замкнутый бассейн, ограниченный невозмущенной поверхностью водоёма Σ_0, дном $\Sigma_H = \Sigma_H(x, y)$ и цилиндрической поверхностью, для интервала $0 < t \le T_0$. $\Sigma = \Sigma_0 \cup \Sigma_H \cup \sigma$ – кусочно-гладкая граница области G [1], [2]:

$$\frac{\partial X}{\partial t} + div\left(\vec{U}X\right) = \mu_X \Delta X + \frac{\partial}{\partial z}\left(\nu_X \frac{\partial X}{\partial z}\right) + \gamma_X \alpha_S XS - \delta_X XZ - \varepsilon_X X - \sigma_X XP,$$

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + div\left(\vec{U}Z\right) = \mu_Z \Delta Z + \frac{\partial}{\partial z}\left(\nu_Z \frac{\partial Z}{\partial z}\right) + \gamma_Z \delta_X XZ - \varepsilon_Z Z - \delta_Z ZP,$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + div\left(\vec{U}S\right) = \mu_S \Delta S + \frac{\partial}{\partial z}\left(\nu_S \frac{\partial S}{\partial z}\right) + \gamma_S \varepsilon_D D - \alpha_S XS + B\left(S_P - S\right) + f, \tag{1}$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} + div\left(\vec{U}D\right) = \mu_D \Delta D + \frac{\partial}{\partial z}\left(\nu_D \frac{\partial D}{\partial z}\right) + \varepsilon_X X + \varepsilon_Z Z - \varepsilon_D D - \beta_D DP,$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + div\left(\vec{U}_P P\right) = \mu_P \Delta P + \frac{\partial}{\partial z}\left(\nu_P \frac{\partial P}{\partial z}\right) + \gamma_P \beta_D DP - \varepsilon_P P + \xi_P \sigma_X XP - \delta_P P,$$

$$\vec{u}_P = k_D gradD + k_Z gradZ + k_X gradX.$$

В системе (1) приняты следующие обозначения: X, Z, S, D, P – концентрации фитопланктона (Coscinodiscus), зоопланктона (Copepoda), биогенного вещества (азота), детрита, пеленгаса; α_S – коэффициент потребления биогенного вещества фитопланктоном; $\gamma_X, \gamma_Z, \gamma_P$ – передаточные коэффициенты трофических функций; γ_S – доля питательного вещества, находящегося в биомассе фитопланктона; $\varepsilon_Z, \varepsilon_P$ – коэффициенты элиминации (смертности) Z, P соответственно; ε_X – коэффициент, учитывающий смертность и метаболизм X; δ_X – убыль фитопланктона за счет выедания зоопланктоном; δ_Z – убыль зоопланктона за счет выедания рыбами (пеленгасом); δ_P – убыль пеленгаса за счет выедания рыбами и вылова; S_P – предельно возможная концентрация биогенного вещества; $f = f(t, x, y, z)$ – функция источника загрязнения; B – удельная скорость поступления загрязняющего вещества; ε_D – коэффициент разложения детрита; β_D – скорость потребления органических остатков пеленгасом; σ_X – коэффициент убыли фитопланктона в результате потребления его пеленгасом; ξ_P – передаточный коэффициент роста концентрации пеленгаса за счет фитопланктона; μ_i – диффузионные коэффициенты в горизонтальном направлении субстанций

$i \in \{P, X, Z, S\}$ соответственно; ν_i – диффузионные коэффициенты в вертикальном направлении для $i \in \{D, X, Z, S, P\}$ соответственно; Δ – двумерный оператор Лапласа; $\vec{u}$ – поле скоростей водного потока; $\vec{U} = \vec{u} + \vec{u}_{0i}$ – скорость конвективного переноса вещества; $\vec{U}_P = \vec{u} + \vec{u}_P$ – скорость конвективного переноса пеленгаса; $\vec{u}_P$ – скорость движения рыбы относительно воды, k_D, k_Z, k_X – коэффициенты таксиса, $\vec{u}_{0i}$ – скорость осаждения *i*-й субстанции; $i \in \{X, Z, S, D\}$ [3].

Пусть n – вектор внешней нормали к поверхности, u_n – нормальная по отношению к $\sum$ составляющая вектора скорости водного потока.

Зададим начальные условия:

$$X(x,y,z,0) = X_0(x,y,z), Z(x,y,z,0) = Z_0(x,y,z), S(x,y,z,0) = S_0(x,y,z),$$
$$D(x,y,z,0) = D_0(x,y,z), P(x,y,z,0) = P_0(x,y,z), (x,y,z) \in \bar{G}, t = 0. \quad (2)$$

Граничные условия (условие Неймана на границах, образованных береговой линией области, и третьего рода для X, Z, S, D, P на открытых участках водоема) для системы (1) будут иметь вид

$$X = Z = S = D = P = 0 \;\; на \;\; \sigma, \; если \; u_n < 0;$$
$$\frac{\partial X}{\partial n} = \frac{\partial Z}{\partial n} = \frac{\partial S}{\partial n} = \frac{\partial D}{\partial n} = \frac{\partial P}{\partial n} = 0 \;\; на \;\; \sigma, \; если \; u_n \geq 0;$$
$$\frac{\partial X}{\partial z} = \frac{\partial Z}{\partial z} = \frac{\partial S}{\partial z} = \frac{\partial D}{\partial z} = \frac{\partial P}{\partial z} = 0 \;\; на \;\; \Sigma_0; \quad (3)$$
$$\frac{\partial X}{\partial z} = -\varepsilon_1 X, \frac{\partial S}{\partial z} = -\varepsilon_2 S, \frac{\partial Z}{\partial z} = -\varepsilon_3 Z, \frac{\partial D}{\partial z} = -\varepsilon_4 D, \frac{\partial P}{\partial z} = -\varepsilon_5 P \;\; на \;\; \Sigma_H,$$

где $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5$ – неотрицательные постоянные; ε_1, $\varepsilon_3, \varepsilon_5$ – учитывают опускание водорослей, зоопланктона и пеленгаса на дно и их затопление; $\varepsilon_2, \varepsilon_4$ – учитывают поглощение биогенного вещества и детрита донными отложениями [4], [5].

Метод решения СЛАУ. Для модельной задачи вида (1)–(3) была проведена дискретизация с использованием неявной схемы с центральными разностями [6], [7]. Возникающие в результате сеточные уравнения можно записать в матричном виде

$$Ax = f, \quad (4)$$

где *A* – линейный, положительно определенный оптор ($A > 0$). Для нахождения решения задачи (4) будем использовать неявный итерационный процесс [8]:

$$B\frac{x^{m+1} - x^m}{\tau_{m+1}} + Ax^m = f \quad (5)$$

В уравнении (5) m – номер итерации, $\tau > 0$ – итерационный параметр, а B – некоторый обратимый оператор, который является предобуславливателем или стабилизатором. Обращение оператора B должно быть существенно проще, чем непосредственное обращение исходного оператора A в (4).

Опишем использование метода минимальных поправок (ММП). Этот метод можно применять для решения уравнения с несамосопряженным, но положительно определенным оператором A. Требуется, чтобы оператор B был самосопряженным, положительно определенным и ограниченным. Метод минимальных поправок определяется следующим выбором оператора D: $D = A^* B^{-1} A$.

Формула для итерационного параметра τ_{k+1} в методе минимальных поправок имеет вид

$$\tau_{k+1} = \frac{(A\omega_k, \omega_k)}{(B^{-1}A\omega_k, A\omega_k)}, \quad k = 0,1, \ \ldots \tag{6}$$

При минимизации нормы поправки в H_B для выбранного оператора D получим:

$$\| z_k \|_D^2 = (Dz_k, z_k) = (A^* B^{-1} A z_k, z_k) = (\omega_k, r_k) = (B\omega_k, \omega_k) = \| \omega_k \|_B^2 .$$

Норма поправки в H_B может вычисляться в итерационном процессе и использоваться для контроля его окончания.

Реализация ММП на системе с распределенной памятью. Для реализации ММП на суперэвм необходимо решить следующие задачи:

- равномерно распределить вычислительные ресурсы задачи по имеющимся вычислительным процессорам;
- организовать обмен данными между вычислителями и указать точки синхронизации [9].

Для равномерного распределения ресурсов задачи между вычислителями требуется передать каждому узлу подобласть расчетной области (провести декомпозицию расчетной области) [10]. Стоит отметить, что декомпозиция области напрямую зависит от выбора метода решения СЛАУ. Представим алгоритм разбиения расчетной области для вариационных методов решения СЛАУ на примере ММП.

Расчет параметра τ_{m+1} осуществляется по формуле (6). Заметим, что вычисление числителя и знаменателя в формуле (6) может осуществляться параллельно в любой произвольной подобласти расчетной области. Это важное свойство позволяет использовать методы декомпозиции (кластеризации), в частности k-means.

Метод k-means основан на минимизации функционала суммарной выборочной дисперсии разброса элементов (узлов расчетной сетки) относительно центра тяжести подобластей: $Q = Q^{(3)}$, где X_i – множество расчетных узлов сетки, входящих в *i*-ю подобласть, $i \in \{1, \ldots, m\}$, m заданное количество подобластей. $Q^{(3)} = \sum_i \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} d^2(x, c_i) \to \min$, где $c_i = \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} x$ – центр подобласти X_i, а $d(x, c_i)$ – расстояние между расчетным узлом сетки x и центром подобласти c_i в Эвклидовой метрике. Метод k-means является сходящимся только тогда, когда все подобласти будут примерно равны.

Алгоритм k-means состоит из следующих шагов:

1. Выбираются начальные центры подобластей при помощи максиминного алгоритма.
2. Все расчетные узлы разбиваются на m клеток Вороного по методу ближайшего соседа. То есть текущий расчетный узел сетки $x \in X_c$, где X_c – подобласть, выбирается из условия $\|x - s_c\| = \min_{1 \le i \le m} \|x - s_i\|$, где s_c – центр области X_c.
3. Рассчитываются новые центры по формуле $s_c^{(k+1)} = \frac{1}{|X_i^{(k)}|} \sum_{x \in X_i^{(k)}} x$.
4. Проверяется условие остановки $s_c^{(k+1)} = s_c^{(k)}$ для всех $k = 1, \ldots, m$. Если условие остановки не выполняется, то осуществляется переход на п. 2 алгоритма.

В качестве центров подобластей максиминный алгоритм выбирает расчетные узлы сетки следующим образом:

1) первый центр – первый расчетный узел области;
2) второй центр находится в расчетном узле сетки, расположенном на максимальном расстоянии от первого центра;
3) если количество подобластей больше 3-х, то каждый следующий центр находится на максимальном удалении от ближайшего центра [11].

Результат работы метода k-means для модельной области представлен на рис. 1.

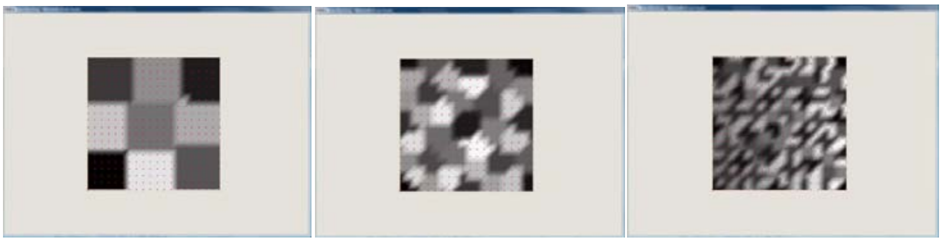

Рис. 1. Результат работы алгоритма k-means для разбиения модельной области на 9, 38, 150 подобластей

Для организации обмена данными требуется найти все точки, лежащие на границе каждой подобласти. Для этой цели используем алгоритм Джарвиса (задача построения выпуклой оболочки).

Необходимо сформировать список соседних подобластей для каждой подобласти и разработать алгоритм пересылки данных между подобластями [12]–[15].

При решении СЛАУ методом минимальных поправок для расчета итерационного параметра τ. Используем метод сдваивания (рис. 2). Синхронизация алгоритма решения задачи (1)–(3) требуется только в ММП при переходе на следующую итерацию [16].

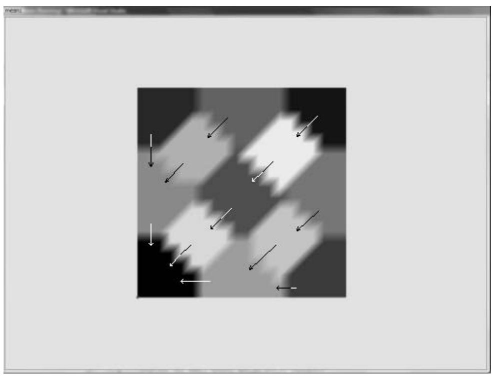

Рис. 2. Расчет параметра τ при решении СЛАУ методом минимальных поправок

Заключение. В работе описан параллельный алгоритм численного решения задачи динамики популяций на примере модели взаимодействия планктона и рыб [17].

Предлагаемый алгоритм численного решения поставленной задачи на супер-ЭВМ с использованием метода k-means позволит существенно сократить время работы программного комплекса, численно реализующего описанную модельную задачу динамики взаимодействующих популяций в Азовском море.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Сухинов А.И., Никитина А.В.* Математическое моделирование и экспедиционные исследования качества вод в Азовском море // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 8 (121). – С. 62-73.
2. *Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Алексеенко Е.В.* Численная реализация трехмерной модели гидродинамики для мелководных водоемов на супервычислительной системе // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23, № 3. – С. 3-21.
3. *Никитина А.В.* Модели биологической кинетики, стабилизирующие экологическую систему Таганрогского залива // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 8 (97). – С. 130-134.
4. *Никитина А.В.* Численное решение задачи динамики токсичных водорослей в Таганрогском заливе // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 113-117.
5. *Sukhinov A.I., Sukhinov A.A.* Reconstruction 0f 2001 Ecological Disaster in the Azov Sea on the Basis of Precise Hydrophysics Models. Parallel Computational Fluid Dynamics, Mutidisciplinary Applications, Prcoceedings of Parallel CFD 2004 Conference, Las Palmas de Gran Canaria, Spain, ELSEVIER, Amsterdam-Berlin-London-New York-Tokyo, 2005. – P. 231-238.
6. *Никитина А.В., Долгой В.Е.* Построение пространственно-неоднородных математических моделей в Таганрогском заливе // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2008. – № 1 (78). – С. 177-178.
7. *Никитина А.В., Третьякова М.В.* Моделирование процесса альголизации мелководного водоема путем вселения в него штамма зеленой водоросли Chlorellavulgarisbin // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2012. – № 1 (126). – С. 128-133.
8. *Чистяков А.Е.* Теоретические оценки ускорения и эффективности параллельной реализации ПТМ скорейшего спуска // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 237-249.
9. *Гергель В.П.* Высокопроизводительные вычисления для многопроцессорных многоядерных систем. – М.: Изд-во МГУ. –2010. – 534 с.
10. *Воеводин В.В.* Вычислительная математика и структура алгоритмов. – М.: Изд.-во МГУ, 2010. – 166 с.
11. *Лепский А.Е., Броневич А.Г.* Математические методы искусственного интеллекта. – Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2009. – 39 с.
12. *Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е.* Моделирование сценария биологической реабилитации Азовского моря // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 9. – С. 3-21.
13. *Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е., Семенов И.С.* Математическое моделирование условий формирования заморов в мелководных водоемах на многопроцессорной вычислительной системе // Вычислительные методы и программирование. – 2013. – Т. 14. – С. 103-112.
14. *Сухинов А.И., Никитина А.В.* Создание комплекса математических моделей трофических взаимодействий комаров-звонцов (хирономид) и рыб с целью улучшения экологической обстановки в г. Таганроге и акватории Таганрогского залива // Тр. Междунар. науч.-практ. конф. «Преобразование Таганрога – ключ к возрождению России», 29-30 января 2013 г. – С. 137-38.
15. *Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е.* Восстановление качества вод Азовского моря с помощью численного моделирования // Тр. Междунар. науч.-практ. конф. «Преобразование Таганрога – ключ к возрождению России», 29-30 января 2013 г. – С. 135-137.
16. *Никитина А.В., Семенов И.С.* Параллельная реализация модели динамики токсичной водоросли в Азовском море с применением многопоточности в операционной системе Windows // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2013. – № 1 (138). – С. 130-135.
17. *Никитина А.В., Чистяков А.Е., Фоменко Н.А.* Применение адаптивного модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода для численной реализации двумерной математической модели движения водной среды // Электронный научно-инновационный журнал. Инженерный вестник Дона. – 2012. – С. 4.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор Я.Е. Ромм.

Семенов Илья Сергеевич – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет»; e-mail: flanker555@yandex.ru; 347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44; тел.: 89085029807; кафедра высшей математики; аспирант.

Semenov Ilya Sergeevich – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”; e-mail: flanker555@yandex.ru; 44, Nekrasovsky, Taganrog, 347928, Russia; phone: +79085029807; the department of higher mathematics; postgraduate student.

УДК 534.222

Д.В. Лапин, И.Н. Тетеревлев, О.А. Савицкий, Т.А. Чистякова

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗВУКОВЫХ ПУЧКОВ КОНЕЧНОЙ АМПЛИТУДЫ В КВАДРАТИЧНО-НЕЛИНЕЙНЫХ СРЕДАХ БЕЗ ФИЗИЧЕСКОЙ ДИСПЕРСИИ*

Разработан новый программный комплекс для моделирования звуковых пучков конечной амплитуды в квадратично-нелинейных средах без физической дисперсии (MSB). Программный комплекс позволяет выполнять научные исследования в области нелинейных волновых процессов, является мощным инструментом для решения инженерных задач разработки приборов и комплексов, основанных на принципах нелинейной акустики. Описаны принципы построения, математической модели, ее программно-алгоритмической реализации. Продемонстрированы возможности программного комплекса, определена область применения. Проведены тестовые расчеты и выполнена верификация результатов математического моделирования. Выполнено сравнение разработанного программного обеспечения с аналогичными программными комплексами.

Программный комплекс; математическое моделирование; звуковой пучок; волна конечной амплитуды.

D.V. Lapin, I.N. Teterevlev, O.A. Savitskiy, T.A. Chistyakova

SOFTWARE MODELING SOUND BEAM OF FINITE AMPLITUDE IN A QUADRATIC NONLINEAR MEDIUM WITHOUT PHYSICAL DISPERSION

A new software package for the simulation of finite-amplitude sound beams in quadratic nonlinear media without physical dispersion. The software package allows you to perform scientific research in the field of nonlinear wave processes is a powerful tool for solving engineering problems of development of devices and systems based on the principles of non-linear acoustics. The principles of mathematical model, software and algorithmic implementation are described. The possibilities of the software system, sets out sphere of application. The test calculations are performed and verification of the results of mathematical modeling. The comparison of the developed software with the same program set.

Program complex; mathematical modeling; sound beam; finite amplitude wave.

Введение. Одним из перспективных направлений развития акустических и ультразвуковых технологий является применение нелинейных акустических эффектов. Акустическая аппаратура, в основе действия которой лежат принципы нелинейной акустики, обладает рядом уникальных возможностей, не свойственных традиционным акустическим устройствам. Примером удачного применения

* Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.», проект №14.A18.21.0680.