

Poluyanovich Nikolay Konstantinovich – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”; e-mail: nik1-58@mail.ru; 44, Nekrasovsky, Taganrog, 347928, Russia; phone: +79185693365; the department of electrical engineering and mechatronics; associate professor.

УДК 519.6:532.5

А.В. Никитина, И.С. Семенов

ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ БИОЛОГИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ В АЗОВСКОМ МОРЕ

Разработан параллельный алгоритм, учитывающий архитектуру суперЭВМ с распределенной памятью. Для численного расчета модельной задачи динамики планктонных и рыбных популяций используются методы решения СЛАУ вариационного типа. При решении возникающей СЛАУ методом минимальных поправок для расчета итерационного параметра τ использовался алгоритм сдваивания. Параллельная реализация численного решения СЛАУ на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью основана на выделении для каждого процессора части расчетной области с помощью метода k -means. Предлагаемый алгоритм численного решения поставленной задачи на суперЭВМ с использованием метода k -means позволит существенно сократить время работы программного комплекса, численно реализующего описанную модельную задачу динамики взаимодействующих популяций в Азовском море. Использование библиотеки MPI обеспечивает лучшее распределение ресурсов компьютера и прирост эффективности алгоритма на распределенных вычислительных системах. Разработанные модели используются для прогнозирования изменения концентрации биологических популяций в мелководных водоемах.

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

A.V. Nikitina, I.S. 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

Developed parallel algorithm that considers the architecture of supercomputers with distributed memory. For numerical computation of the model problem of the dynamics of plankton and fish populations are used methods of the solution of SLAE of variation type. At the decision arising SLAE for calculation of iterative parameter was used by a method of the minimum amendments algorithm of doubling. Parallel implementation of the numerical solution of SLAE on a multiprocessor computer system with distributed memory is based on the allocation for each processor part of the computational domain by the method of k -means. The offered algorithm of the numerical solution of an objective with use of the k -means method will allow reducing by the super computer significantly operating time of the program complex realizing the described model problem of dynamics of interacting populations in the Sea of Azov. 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. The developed models are used to predict changes in the concentration of biological populations in the shallow waters.

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 моде-

лей 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 $0 < t \leq T_0$. $\Sigma = \Sigma_0 \cup \Sigma_H \cup \sigma$ – кусочно-гладкая граница области G [1, 2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{U}X) &= \mu_X \Delta X + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_X \frac{\partial X}{\partial z} \right) + \gamma_X \alpha_S XS - \delta_X XZ - \varepsilon_X X - \sigma_X XP, \\ \frac{\partial Z}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{U}Z) &= \mu_Z \Delta Z + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_Z \frac{\partial Z}{\partial z} \right) + \gamma_Z \delta_X XZ - \varepsilon_Z Z - \delta_Z ZP, \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{U}S) &= \mu_S \Delta S + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_S \frac{\partial S}{\partial z} \right) + \gamma_S \varepsilon_D D - \alpha_S XS + B(S_P - S) + f, \quad (1) \\ \frac{\partial D}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{U}D) &= \mu_D \Delta D + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_D \frac{\partial D}{\partial z} \right) + \varepsilon_X X + \varepsilon_Z Z - \varepsilon_D D - \beta_D DP, \\ \frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{U}_P P) &= \mu_P \Delta P + \frac{\partial}{\partial z} \left(v_P \frac{\partial P}{\partial z} \right) + \gamma_P \beta_D DP - \varepsilon_P P + \xi_P \sigma_X XP - \delta_P P, \\ \vec{u}_P &= k_D \operatorname{grad} D + k_Z \operatorname{grad} Z + k_X \operatorname{grad} X. \end{aligned}$$

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; v_i – диффузион-

ные 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 Σ составляющая вектора скорости водного потока.

Зададим начальные условия:

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

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:

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

где $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5$ – неотрицательные постоянные; $\varepsilon_1, \varepsilon_3, \varepsilon_5$ – 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 оператор ($A > 0$). 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 в 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

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

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

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

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, $i \in \{1, \dots, m\}$, m – заданное количество подобластей.

$$Q^{(3)} = \sum_i \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} d^2(x, c_i) \rightarrow \min, \quad \text{где } c_i = \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} x \text{ – центр подобласти } X_i, \text{ а}$$

$d(x, c_i)$ – расстояние между расчетным узлом сетки x и центром подобласти c_i в Евклидовой 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, т.е. текущий расчетный узел сетки $x \in X_c$, где X_c – подобласть выбирается 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 $s_c^{(k+1)} = \frac{1}{|X_i^{(k)}|} \sum_{x \in X_i^{(k)}} x$.

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 п.2 алгоритма.

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

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

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. Синхронизация алгоритма решения задачи (1)–(3) требуется только в ММП при переходе на следующую итерацию [16].

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

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 Of 2001 Ecological Disaster in the Azov Sea on the Basis of Precise Hydrophysics Models. Parallel Computational Fluid Dynamics, Multidisciplinary Applications, Proceedings 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., Семенов И.С. Моделирование процессов эвтрофикации мелководного водоема // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2013. – № 4 (141). – С. 37-44.
7. Никитина А.В., Третьякова М.В. Моделирование процесса альголизации мелководного водоема путем вселения в него штамма зеленой водоросли *Chlorellavulgaris*bin // 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 заморозов 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 (хируномид) и рыб с целью улучшения экологической обстановки в г. Таганроге и акватории Таганрогского залива // Труды международной научно-практической конференции «Преобразование Таганрога – ключ к возрождению России», 29-30 января 2013 г. – С. 137-138.
15. *Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е.* Восстановление качества вод Азовского моря с помощью численного моделирования // Труды международной научно-практической конференции «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.

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

Никитина Алла Валерьевна – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет»; e-mail: nikitina.vm@gmail.com; 347928, г. Таганрог, Некрасовский, 44; тел.: 89515168538; кафедра высшей математики; к.ф.-м.н.; доцент.

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

Nikitina Alla Valer`evna – Federal State Owned-Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Educational “Southern Federal University”; e-mail: nikitina.vm@gmail.com; 44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347922, Russia; phone: +79515168538; the department of higher mathematics; cand. of phis.-math. sc. associate professor.

Semenov Ilya Sergeevich – e-mail: flanker555@yandex.ru; phone: +79515168538; the department of higher mathematics; postgraduate student.