

Комплекс моделей, явных регуляризованных схем повышенного порядка точности и программ для предсказательного моделирования последствий аварийного разлива нефтепродуктов*

А.И. Сухинов¹, А.В. Никитина², А.А. Семенякина², А.Е. Чистяков²

Донской государственный технический университет¹

Научно-исследовательский институт многопроцессорных вычислительных систем
имени академика А.В. Каляева Южного Федерального Университета²

В данной работе приведена построенная модель транспорта нефтепродуктов с учетом испарений легкой, нейтральной и неиспаряющейся псевдофракций нефтяного пятна, растворения нефтяного пятна и биоразложения. Для повышения запаса устойчивости явных схем Б.Н. Четверушкиным предложено использовать регуляризованные схемы. Аппроксимация задачи диффузии–конвекции выполнялась на основе схем повышенного порядка точности. На базе многопроцессорной вычислительной системы разработано экспериментальное программное обеспечение, предназначенное для математического моделирования возможных сценариев развития экосистем мелководных водоемов на примере Азово–Черноморского бассейна при нефтяных разливах. 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 512 вычислительных узлах и равнялось 228.36 раз. К достоинствам разработанного программного комплекса также следует отнести использование модели гидродинамики, включающую уравнения движения по трем координатным направлениям.

Ключевые слова: схемы повышенного порядка точности, транспорт нефтепродуктов, нефтяные пленки.

1. Введение

Различие свойств нефти и воды обуславливает особенности их нахождения в поверхностных и подземных водах. Нефть и нефтепродукты представляют собой смесь углеводородов с различной растворимостью в воде: для нефти (в зависимости от химического состава) растворимость составляет 10-50 мг/дм³; для бензинов – 9-505 мг/ дм³; для керосинов – 2-5 мг/ дм³; для дизельного топлива – 8-22 мг/ дм³. Растворимость углеводородов увеличивается в ряду: ароматические, циклопарафиновые, парафиновые. Растворимая доля нефти в воде от всей ее массы мала ($5 \cdot 10^{-3}$ %), но при этом необходимо учитывать два обстоятельства: в число растворяющихся компонентов нефти попадают наиболее токсичные ее компоненты; нефть может образовывать с водой стойкие эмульсии, так что в толщу воды может перейти до 15% всей нефти.

Смешиваясь с водой, нефть образует эмульсию двух типов: прямую – «нефть в воде» и обратную – «вода в нефти». Прямые эмульсии, составленные капельками нефти диаметром до 0.5 мкм, менее устойчивы и характерны для нефти, содержащей поверхностно активные вещества. При удалении летучих фракций нефть образует вязкие обратные эмульсии, которые могут сохраняться на поверхности в виде тонкой нефтяной пленки, которая перемещается со скоростью примерно в два раза большей, чем скорость течения воды. При соприкосновении с берегом и прибрежной растительностью нефтяная пленка оседает на них. В процессе распространения по поверхности воды легкие фракции нефти частично испаряются, растворяются, а тяже-

* Работа выполнена при частичной поддержке Задания №2014/174 в рамках базовой части государственного задания Минобрнауки России и программы фундаментальных исследований Президиума РАН №43 «Фундаментальные проблемы математического моделирования».

лые опускаются в толщу воды, оседают на дно, загрязняя донные отложения. В табл. 1 приведена классификация нефтяного загрязнения водоемов.

Влияние нефтяного загрязнения на водоем проявляется в: ухудшении физических свойств воды (замутнение, изменение цвета, вкуса, запаха); растворении в воде токсических веществ; образовании поверхностной пленки нефти и осадка на дне водоема, понижающей содержание в воде кислорода.

Характерный запах и привкус появляются при концентрации нефти и нефтепродуктов в воде 0.5 мг/дм^3 , а нафтеновых кислот – 0.01 мг/дм^3 . Значительные изменения химических показателей воды происходят при содержании нефти и нефтепродуктов более $100\text{-}500 \text{ мг/дм}^3$. Пленка нефти на поверхности водоема ухудшает газообмен воды с атмосферой, замедляя скорость аэрации и удаления углекислого газа, образующегося при окислении нефти. При толщине нефтяной пленки 4.1 мм и концентрации нефти в воде 17 мг/дм^3 количество растворенного кислорода за 20-25 суток понижается на 40%.

Таблица 1. Классификация нефтяных загрязнений водоемов

Категория загрязнения	Характеристика загрязнения	Содержание нефти, мг/л
Слабое	Нефтяная пленка отсутствует. Привкус нефти слабый. Запах не оказывает влияния на газовый режим, минерализацию, окисляемость и БПК воды. Рыба в водоеме обитает нормально, размножается, но имеет привкус нефтепродуктов. Отрицательное влияние на планктон незначительное, на бентос – не установлено.	<1
Среднее	Вода имеет запах и привкус нефти, поверхность покрыта отдельными нефтяными пятнами. Влияние на газовый режим, минерализацию, окисляемость и БПК воды незначительно или не наблюдается. Рыба в водоеме обитает, но имеет привкус нефтепродуктов. Наблюдается случаи гибели личинок рыб.	1-10
Сильное	Вода имеет запах и привкус нефти, отдельные участки ее поверхности покрыты нефтяной пленкой. Наблюдается изменение газового режима. Рыба избегает таких водоемов. При случайной задержке она погибает.	10-30
Очень сильное	Вода имеет сильный запах и привкус нефти, поверхность покрыта сплошной нефтяной пленкой. Берега и растительность покрыты нефтью и мазутом. Иногда дно покрыто тяжелыми фракциями нефти. Рыба отсутствует.	>30

В работе [1] разработаны три различные модели для описания транспорта нефтепродуктов с учетом испарений легкой, нейтральной и неиспаряющейся псевдофракций нефтяного пятна, растворения нефтяного пятна и биоразложения. В данной работе приведена построенная модель, которая описывает все выше перечисленные процессы. Анализ численного решения модельной задачи транспорта веществ показал, что с увеличением размеров расчетной сетки временные затраты для явной схемы существенно уменьшаются. Модификация явной схемы – введение разностной производной второго порядка с множителем–регуляризатором – позволяет существенно ослабить ограничения на допустимую величину шага по времени [2]. Кроме того, явные регуляризованные схемы показали преимущество по реальным временным затратам (10–15 раз и более) по сравнению с использовавшимися ранее традиционными неявными и нерегуляризованными явными схемами [3].

В работе [4] был предложен вариант метода конечных объемов в случае учета заполненностей контрольных областей. Алгоритм расчета, учитывающий частичную «заполненность» ячеек, лишен недостатка, связанного со ступенчатым представлением границы области на прямоугольной сетке. Предложенный метод был применен для решения трехмерных задач гидродинамики [5]. На основе данной модели выполнен расчет полей течений, которые использованы при расчете транспорта нефтепродуктов.

При решении задачи транспорта нефтепродуктов использованы схемы повышенного порядка точности. Следует отметить, что при решении модельной задачи диффузии удалось повысить точность в 66.7 раз, а для задачи диффузии–конвекции – в 48.7 раз [6].

2. Математическая модель гидродинамики

Входными данными задачи транспорта нефтепродуктов является поле вектора скорости водного потока, что требует в свою очередь построения математической модели движения водной среды. Исходными уравнениями гидродинамики мелководных водоемов являются [5]:

– уравнения движения (Навье – Стокса):

$$\begin{aligned} u'_t + uu'_x + vu'_y + wu'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_x + (\mu u'_x)'_x + (\mu u'_y)'_y + (v u'_z)'_z + 2\Omega(v \sin \theta - w \cos \theta), \\ v'_t + uv'_x + vv'_y + wv'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_y + (\mu v'_x)'_x + (\mu v'_y)'_y + (v v'_z)'_z - 2\Omega u \sin \theta, \\ w'_t + uw'_x + vw'_y + ww'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_z + (\mu w'_x)'_x + (\mu w'_y)'_y + (v w'_z)'_z + 2\Omega u \cos \theta + g(\rho_0 / \rho - 1); \end{aligned} \quad (1)$$

– уравнение неразрывности в случае переменной плотности запишется следующим образом:

$$\rho'_t + (\rho u)'_x + (\rho v)'_y + (\rho w)'_z = 0, \quad (2)$$

где $\vec{u} = \{u, v, w\}$ – компоненты вектора скорости; p – превышение давления над гидростатическим давлением невозмущенной жидкости; ρ – плотность; Ω – угловая скорость вращения земли; θ – угол между вектором угловой скорости и вертикалью; μ, ν – горизонтальная и вертикальная составляющие коэффициента турбулентного обмена.

Система уравнений (1) – (2) рассматривается при следующих граничных условиях:

– на входе (устье рек Дон и Кубань):

$$u(x, y, z, t) = u(t), \quad v(x, y, z, t) = v(t), \quad p'_n(x, y, z, t) = 0, \quad \vec{u}'_n(x, y, z, t) = 0,$$

– боковая граница (берег и дно):

$$\rho_v \mu (u')_n(x, y, z, t) = -\tau_x(t), \quad \rho_v \mu (v')_n(x, y, z, t) = -\tau_y(t), \quad \vec{u}'_n(x, y, z, t) = 0, \quad p'_n(x, y, z, t) = 0,$$

– верхняя граница:

$$\rho \mu (u')_n(x, y, z, t) = -\tau_x(t), \quad \rho \mu (v')_n(x, y, z, t) = -\tau_y(t), \quad (3)$$

$$w(x, y, t) = -\omega - p'_t / \rho g, \quad p'_n(x, y, t) = 0,$$

– на выходе (Керченский пролив):

$$p'_n(x, y, z, t) = 0, \quad \vec{u}'_n(x, y, z, t) = 0,$$

где ω – интенсивность испарения жидкости; τ_x, τ_y – составляющие тангенциального напряжения (закон Ван-Дорна); ρ_v – плотность взвеси.

Составляющие тангенциального напряжения для свободной поверхности:

$$\tau_x = \rho_a C_p (|\vec{w}|) w_x |\vec{w}|, \quad \tau_y = \rho_a C_p (|\vec{w}|) w_y |\vec{w}|,$$

где \vec{w} – вектор скорости ветра относительно воды; ρ_a – плотность атмосферы,

$$C_p(x) = \begin{cases} 0.0088, & x < 6,6 \text{ м/с} \\ 0.0026, & x \geq 6,6 \text{ м/с} \end{cases} \text{ – безразмерный коэффициент.}$$

Составляющие тангенциального напряжения для дна с учетом введенных обозначений могут быть записаны следующим образом:

$$\tau_x = \rho C_p (|\vec{u}|) u |\vec{u}|, \quad \tau_y = \rho C_p (|\vec{u}|) v |\vec{u}|.$$

На основании измеренных пульсаций скоростей рассмотренная ниже аппроксимация позволяет строить коэффициент вертикального турбулентного обмена, неоднородный по глубине [7]:

$$\nu = C_s^2 \Delta^2 \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)^2}, \quad (4)$$

где Δ – характерный масштаб сетки; C_s – безразмерная эмпирическая константа, значение которой обычно определяется на основе расчета процесса затухания однородной изотропной турбулентности.

Для решения поставленной задачи (1) – (3) использован метод сеток [8]. Аппроксимация уравнений по временной переменной выполнена на основе схем расщепления по физическим процессам [9] в форме метода поправки к давлению.

3. Математическая модель транспорта нефтепродуктов

Для описания процесса транспорта нефтепродуктов с учетом испарений легкой, нейтральной и неиспаряющейся псевдофракций нефтяного пятна, растворения нефтяного пятна и био-разложения была использована система уравнений [1]:

$$c'_{i,t} + uc'_{i,x} + vc'_{i,y} = (\mu c'_{i,x})'_x + (\mu c'_{i,y})'_y - \left(\frac{K_E P_i}{RT} + K_D S_i \right) X_i M_i^{(m)} - \frac{1}{q} \frac{\mu_m c_i}{c_i + K_s} M, \quad (5)$$

$$M'_t + uM'_x + vM'_y = (\mu M'_x)'_x + (\mu M'_y)'_y - \frac{\mu_m c_i}{c_i + K_s} M + \lambda M,$$

где c_i – концентрация i -ой фракции нефти; $M_i^{(m)}$ – значение молярной массы i – ой компоненты, [кг/моль]; $K_E = 2,5 \cdot 10^{-3} U^{0.78}$ – коэффициент массопереноса для углеводорода, [м/с]; U – скорость ветра относительно воды, [м/с]; X_i – молярная доля компонента с номером i , равная $v_i / \sum v_i$; v_i – количество вещества i – ой компоненты, [моль]; P_i – давление паров i – ой компоненты, [Па]; $R = 8,314$ Дж/моль·К – универсальная газовая постоянная; T – температура окружающей среды над поверхностью пятна, [К]; $K_D = kK_{D0}$ – коэффициент массопереноса растворения; K_{D0} – начальное значение коэффициента массопереноса растворения; k – коэффициент, зависящий от волнения моря; S_i – растворимость в воде i – ой компоненты, [кг/м³]; A – площадь пятна нефти, [м²]; M – концентрация микроорганизмов; μ_m – максимальная скорость роста микроорганизмов; K_s – коэффициент насыщения; λ – скорость отмирания клеток; q – коэффициент пропорциональности между количеством бактерий и поглощенным субстратом.

Изменение начальной растворимости нефти описывается уравнением:

$$S = S_0 e^{-0,1t},$$

где S_0 – начальная растворимость нефти; t – время, [сутки].

Коэффициент горизонтальной турбулентной диффузии зависит от гидродинамических и климатических условий, в которых протекает процесс. Для сложных гидродинамических и климатических условий Азово–Черноморского бассейна коэффициент горизонтальной турбулентной диффузии будет подчиняться закону «четырёх третей» Ричардсона [11]:

$$\mu \approx \varepsilon^{1/3} L^{4/3}, \quad (6)$$

где L – характерный размер диффундирующего пятна; ε – скорость диссипации турбулентной энергии, у поверхности имеет значения порядка $1-10^{-1}$ см²/с³ и в среднем убывает с глубиной до значений порядка $10^{-3}-10^{-4}$ см²/с³.

При решении вышеописанных систем уравнений были приняты граничные и начальные условия для одномоментного залпового выброса нефти:

$$c|_{t=0, (x,y) \in S_0} = c_0, \quad c|_{t=0, (x,y) \notin S_0} = 0,$$

где S_0 – область, покрытая пятном; c_0 – концентрация нефти в изучаемой области.

4. Аппроксимация задачи транспорта нефтепродуктов

Для реализации модели транспорта нефтепродуктов рассмотрим двумерную задачу диффузии–конвекции следующего вида:

$$c'_t + uc'_x + vc'_y = (\mu c'_x)'_x + (\mu c'_y)'_y + f, \quad (7)$$

с граничными условиями: $c'_n(x, y, t) = \alpha_n c + \beta_n$, где u, v – компоненты вектора скорости; μ – коэффициент турбулентного обмена; f – функция, описывающая интенсивность и распределение источников.

Введем равномерную прямоугольную сетку:

$$w_h = \{t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y; n = \overline{0..N_t}, i = \overline{0..N_x}, j = \overline{0..N_y}; N_t\tau = T, N_x h_x = l_x, N_y h_y = l_y\}$$

где τ – шаг по времени; h_x, h_y – шаги по пространству; N_x, N_y – границы по пространству; N_t – верхняя граница по времени.

Для повышения запаса устойчивости явных схем Б.Н. Четверушкиным было предложено использовать регуляризированные схемы [2]. Для построения явной регуляризированной схемы для уравнения (7) используется модифицированное уравнение:

$$c'_i + \frac{\tau^*}{2} c''_i + uc'_x + vc'_y = (\mu c'_x)'_x + (\mu c'_y)'_y + f, \quad (8)$$

где $\tau^* \approx h/c^*$ – параметр регуляризации; h – шаг сетки; c^* – скорость звука в водной среде. Для устойчивости явной схемы, при добавлении в нее слагаемого–регуляризатора (второй разностной производной по времени с множителем τ^*) достаточно выполнения ограничения на шаг по временной переменной – $\tau \leq O(h^{3/2})$, что является менее жестким по сравнению с условием для явной нерегуляризированной схемы – $\tau \leq O(h^2)$.

Проведем дискретизацию операторов конвективного и диффузионного переносов второго порядка погрешности аппроксимации в случае частичной заполненности ячеек следующим образом:

$$(q_0)_{i,j} uc'_x = (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x}, \quad (9)$$

$$(q_0)_{i,j} (\mu c'_x)'_x = (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2} - \left| (q_1)_{i,j} - (q_2)_{i,j} \right| \mu_{i,j} \frac{\alpha_x c_{i,j} + \beta_x}{h_x},$$

где q_i – коэффициенты, описывающие заполненность контрольных областей [12].

Аппроксимация оператора конвективного переноса uc' разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, имеет следующий вид [13]:

$$\begin{aligned} (q_0)_i L(c) = & -(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_1)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} c_{i+2} - \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \right) + \right. \\ & \left. + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} + (q_1)_i \left(-\frac{u_{i+1/2}}{2h} + k_i^{(1)} + k_i^{(2)} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_2)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} \right) + \right. \\ & \left. + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_1)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} \right) + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{2h} - (q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{2h} - \left((q_2)_i - (q_1)_i \right) k_i^{(1)} + \left((q_2)_i + (q_1)_i \right) k_i^{(2)} \right) c_i + \\ & - \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \right) + (q_2)_i \left(\frac{u_{i-1/2}}{2h} + k_i^{(2)} - k_i^{(1)} \right) \right) c_{i-1} - \left(-(q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_2)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} \right) c_{i-2}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $k_i^{(1)} = \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} (u_{i+1} - u_i) - \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} (u_i - u_{i-1}) \right) / (8h)$, $k_i^{(2)} = \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \frac{u_{i+1} - u_i}{8h} + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \frac{u_i - u_{i-1}}{8h}$.

Аппроксимации оператора диффузионного переноса $(\mu c')'$ разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} (q_0)_i (L(c)) \square = & -(q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_1)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} c_{i+2} + \left((q_1)_i \frac{\mu_{i+1/2}}{h^2} c_{i+1} + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} + 2 \right) + \right. \\ & \left. + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} - (q_1)_i \left(\frac{\mu_{i+1}'' - \mu_{i-1}''}{12} + k_i \right) \right) c_{i+1} - \left((q_1)_i \frac{\mu_{i+1/2}}{h^2} + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1/2}}{h^2} + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \left(\frac{(q_2)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} + 2 \right) + \right. \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
 & + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \left(\frac{(q_1)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} + 2 \right) + (q_2)_i \left(\frac{\mu_i'' - \mu_{i-1}''}{12} - k_i \right) - (q_1)_i \left(\frac{\mu_{i+1}'' - \mu_i''}{12} + k_i \right) \Big) c_i + \left((q_2)_i \frac{\mu_{i-1/2}}{h^2} c_{i-1} + \right. \\
 & \left. + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \left(\frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + 2 \right) + (q_2)_i \left(\frac{\mu_i'' - \mu_{i-1}''}{12} - k_i \right) \right) c_{i-1} - (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_2)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} c_{i-2},
 \end{aligned}$$

где $\mu_i'' = \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} c_{i+1} - 2c_i + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} c_{i-1} \right) / h^2$, $k_i = \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \frac{\mu_{i+1} - \mu_i}{4h^2} - \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \frac{\mu_i - \mu_{i-1}}{4h^2}$.

5. Параллельная реализация

При параллельной реализации использованы методы декомпозиции сеточных областей для вычислительно трудоемких задач диффузии–конвекции, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы. Максимальная производительность МВС составляет 18,8 терафлопс. В качестве вычислительных узлов использовались 128 однотипных 16–ядерных Blade–серверов HP ProLiant BL685c, каждый из них оснащен четырьмя четырех–ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и оперативной памятью в объеме 32 Гб.

Таблица 2. Зависимость ускорения и эффективности от количества процессоров

		100x100	200x200	500x500	1000x1000	2000x2000	5000x5000
1	Время	0.000271	0.00429	0.00846	0.03608	0.138	1.633
	Ускорение	1	1	1	1	1	1
	Эффективность	1	1	1	1	1	1
2	Время	0.000074	0.00060	0.00866	0.02193	0.08041	0.825
	Ускорение	3.662	7.15	0.977	1.645	1.716	1.979
	Эффективность	1.831	3.575	0.488	0.823	0.858	0.99
4	Время	0.000052	0.00017	0.00341	0.00978	0.04376	0.533
	Ускорение	5.212	25.235	2.481	3.689	3.156	3.064
	Эффективность	1.303	6.309	0.62	0.922	0.788	0.766
8	Время	0.000029	0.000089	0.00207	0.00745	0.02924	0.188
	Ускорение	9.345	48.202	4.087	4.843	4.72	8.686
	Эффективность	1.168	6.025	0.511	0.605	0.59	1.086
16	Время	0.000025	0.000063	0.00054	0.00628	0.01921	0.142
	Ускорение	10.84	68.095	15.667	5.745	7.184	11.5
	Эффективность	0.677	4.256	0.979	0.359	0.449	0.719
32	Время	0.000060	0.000089	0.00018	0.00247	0.01051	0.078
	Ускорение	4.517	48.202	47	14.607	13.13	20.936
	Эффективность	0.141	1.506	1.469	0.456	0.41	0.654
64	Время	0.000125	0.000142	0.00016	0.00110	0.00584	0.044
	Ускорение	2.168	30.211	52.875	32.8	23.63	37.114
	Эффективность	0.034	0.472	0.826	0.513	0.369	0.58
128	Время	-	0.000364	0.00040	0.00048	0.00485	0.017
	Ускорение	-	11.786	21.15	75.167	28.454	96.059
	Эффективность	-	0.092	0.165	0.587	0.222	0.75
256	Время	-	-	0.000801	0.000653	0.003215	0.00987
	Ускорение	-	-	10.562	55.253	42.924	165.434
	Эффективность	-	-	0.041	0.216	0.168	0.646
512	Время	-	-	-	0.001294	0.002051	0.00715
	Ускорение	-	-	-	27.883	67.284	228.36
	Эффективность	-	-	-	0.054	0.131	0.446

В табл. 2 приведены временные затраты для одного временного слоя на различных сетках, а также значения ускорения и эффективности для различного числа вычислительных ядер многопроцессорной вычислительной системы.

6. Описание программного комплекса

На базе многопроцессорной вычислительной системы разработано экспериментальное программное обеспечение, предназначенное для математического моделирования возможных сценариев развития экосистем мелководных водоемов на примере Азово–Черноморского бассейна. Программный комплекс «Azov3d» предназначен для построения оперативных прогнозов движения турбулентных потоков водной среды – поля скоростей водной среды на сетках с высокой разрешающей способностью. Данная программа используется для расчета трехмерного вектора скорости течения водной среды в акватории Азовского моря, учитывает такие физические параметры как: сила Кориолиса, турбулентный обмен, сложная геометрия дна и береговой линии, испарение, стоки рек, сгонно–нагонные явления, ветровые течения и трение о дно, и обеспечивает выполнение следующих функций: расчет поля скорости без учета давления; расчет гидростатического давления (используется в качестве начального приближения для гидродинамического давления); расчет гидродинамического давления; расчет трехмерного поля скорости водного потока.

Выходными параметрами программного комплекса являются: шаги по пространственным координатам, погрешность вычисления сеточных уравнений, размеры расчетной сетки, временной интервал, интенсивность испарения, начальные распределения компонент вектора скорости движения водной среды и давления.

Разработанный комплекс программ допускает внедрение новых расчетных функций, в частности, в данный комплекс были встроены программные блоки, предназначенные для вычисления транспорта нефтепродуктов с учетом испарения легкой, нейтральной и не испаряющейся псевдофракций нефтяного пятна, растворения нефтяного пятна и биоразложения. Поля скоростей водного потока, рассчитанные на основе математической модели (1) – (4), относятся к входным данным для модели транспорта нефтепродуктов (5).

7. Результаты численных экспериментов

В работе [11] приведены результаты натуральных экспериментов по изучению деструкции сырой нефти в морской воде. Из результатов экспериментов следует, что лишь 3-15% от исходного количества сырой нефти подвержены процессам окисления, биodeградации, фотохимическим реакциям, тогда как испаряется от 10 до 40%. Пик ее растворимости приходился на 10-е сутки экспозиции (рис. 1).

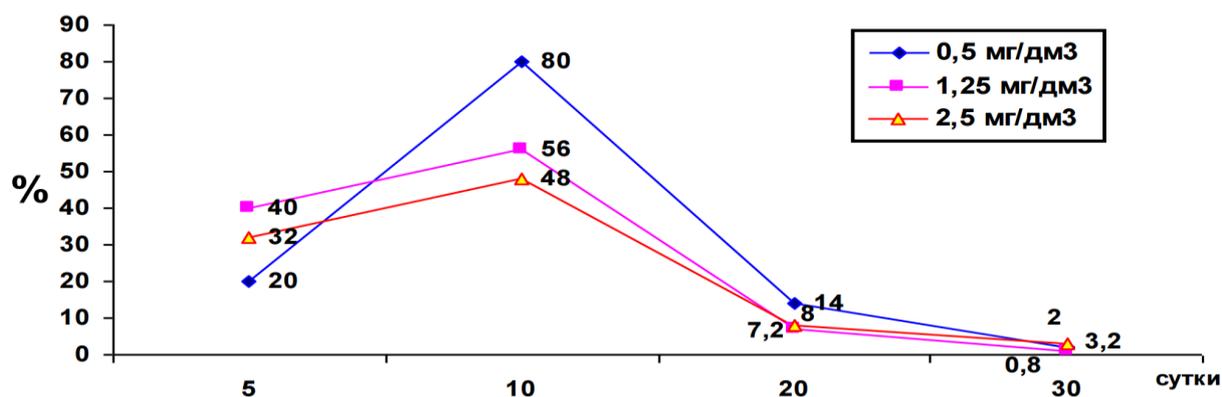


Рис. 1. Динамика деструкции сырой нефти

Согласно [12] при поступлении сообщения о разливе нефти и нефтепродуктов время локализации разлива не должно превышать 4 часов при разливе в акватории, 6 часов – при разливе на почве с момента обнаружения разлива нефти и нефтепродуктов или с момента поступления информации о разливе. Будем рассматривать случай, когда не приняты меры по локализации нефтяных разливов. Из приведенных результатов натуральных экспериментов следует, что расчетный интервал должен составлять 20-30 суток.

Скорость ветра в диапазоне 3-8 м/с является идеальной для обнаружения нефтяных загрязнений: в этом случае слики¹ выглядят темными пятнами на светлой (взволнованной) поверхности моря (см. рис. 2).

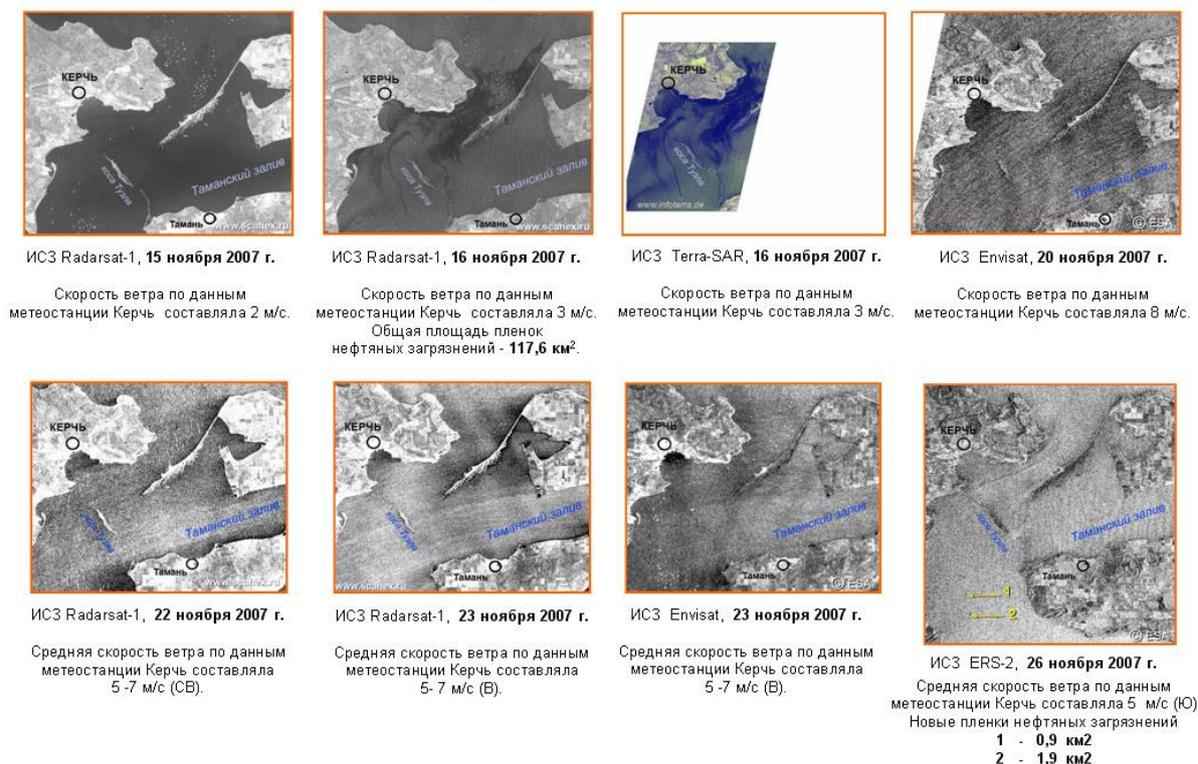


Рис. 2. Радиолокационные изображения участка во время катастрофического разлива нефти

На рис. 3 приведены данные о скорости и направлении ветра во время экстремального шторма в ноябре 2007 года. Наибольшая скорость ветра была 11 ноября в районе Керченского пролива и по данным Gismeteo [13] составила 24 м/с.

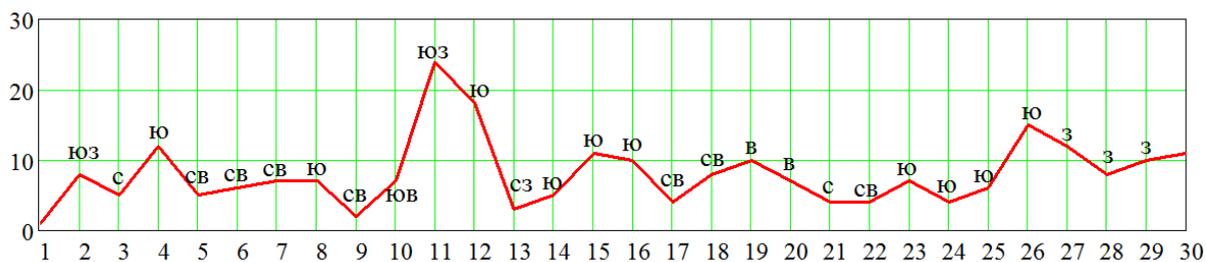


Рис. 3. Скорость ветра в районе Керченского пролива в ноябре 2007 года

На рис. 4 приведены результаты численных экспериментов по моделированию транспорта легкой нефти в районе Керченского пролива на 16 ноября 2007 года. Расчет выполнен на основе разработанного программного комплекса и результаты применены для тестирования работоспособности данного комплекса.

В дальнейшем планируется разработка модели для расчета транспорта донных материалов [14, 15], а также для расчета транспорта растворенных субстанций и нефтяных паров. Для разработки модели транспорта нефтяных паров требуется построение трехмерной математической модели приземной аэродинамики. При моделировании разливов нефти также важно учитывать влияние растворенных нефтепродуктов на характер и протекание гидробиологических процессов в водоеме [16, 17].

¹ Слик от англ. slick - гладкий, блестящий.

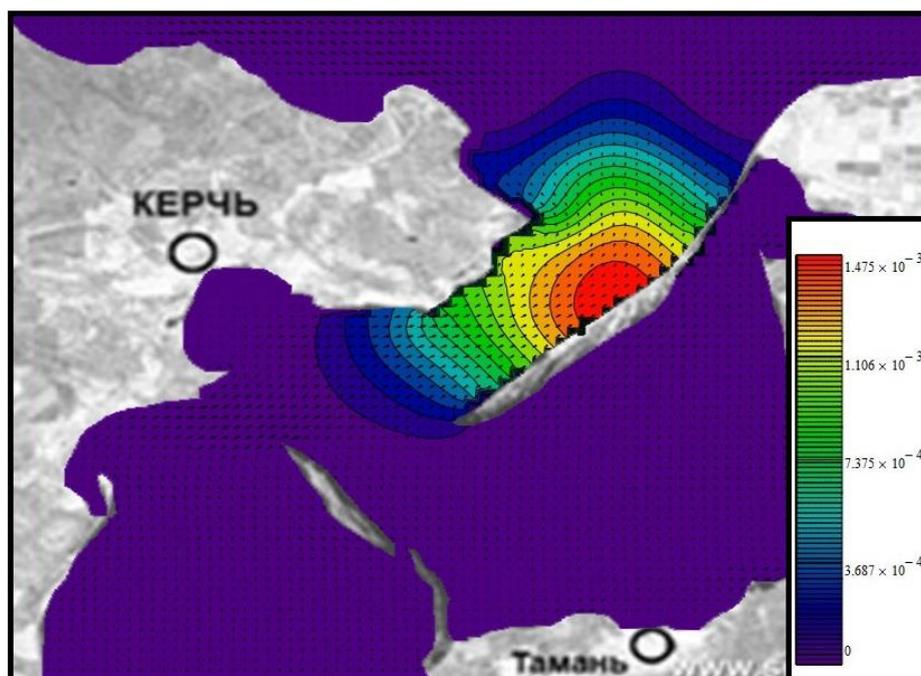


Рис. 4. Картина поля концентрации легких нефтепродуктов

Сопоставляя результаты расчета концентрации легких нефтепродуктов, приведенного на рис. 4, с результатами радиолокационных снимков участка, где произошел катастрофический разлив нефти (рис. 2), видим их качественное совпадение. Время прогноза составило 4 суток с момента разлива.

Заключение

Разработана математическая модель транспорта нефтепродуктов, отличающиеся от известных учетом: испарений легкой, нейтральной и не испаряющейся псевдофракций нефтяного пятна, растворения нефтяного пятна и биоразложения. Для повышения запаса устойчивости явных схем Б.Н. Четверушкиным было предложено использовать регуляризованные схемы [2]. Аппроксимация задачи диффузии–конвекции выполнялась на основе схем повышенного порядка точности. Выполнена программная реализация математической модели гидродинамических процессов применительно к мелководным водоемам на многопроцессорной вычислительной системе с распределенной памятью. Выполнены теоретические расчеты ускорения и эффективности параллельных алгоритмов. Разработанный комплекс программ допускает внедрение новых расчетных функций, в частности, в данный комплекс были встроены программные блоки, предназначенные для моделирования транспорта нефтепродуктов с учетом испарений легкой, нейтральной и не испаряющейся псевдофракций нефтяного пятна, растворения нефтяного пятна и биоразложения. На базе многопроцессорной вычислительной системы было разработано экспериментальное программное обеспечение, предназначенное для математического моделирования возможных сценариев развития экосистем мелководных водоемов на примере Азово–Черноморского бассейна при нефтяных разливах. 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 512 вычислительных узлах и равнялось 228.36 раз. К достоинствам разработанного программного комплекса также следует отнести использование модели гидродинамики, включающую уравнения движения по трем координатным направлениям.

Литература

1. Глухенький И.Ю., Лаврентьев А.В., Попова Г.Г. Моделирование аварийных разливов нефти в Керченском проливе // *Безопасность в техносфере*. 2011. №6. С. 3–6.
2. Четверушкин Б.Н. Пределы детализации и формулировка моделей уравнений сплошных сред // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24. № 11. С. 33–52.
3. Сухинов А.И., Проценко Е.А., Чистяков А.Е., Шретер С.А. Сравнение вычислительных эффективностей явной и неявной схем для задачи транспорта наносов в прибрежных водных системах // *Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии*. 2015. Т 16. №3. С. 328–338
4. Сухинов А.И., Тимофеева Е.Ф., Чистяков А.Е. Построение и исследование дискретной математической модели расчета прибрежных волновых процессов // *Известия ЮФУ. Технические науки*. 2011. №8 (121). С 22–32.
5. Сухинов А.И., Чистяков А.Е. Параллельная реализация трехмерной модели гидродинамики мелководных водоемов на супервычислительной системе // *Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии*. 2012. Т.13. С. 290–297
6. 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. №2. С. 256–267
7. Белоцерковский О. М. Турбулентность: новые подходы. М.: Наука, 2003.
8. Самарский А.А. Теория разностных схем. М. Наука, 1989.
9. Белоцерковский О. М., Гуцин В. А., Щенников В. В. Метод расщепления в применении к решению задач динамики вязкой несжимаемой жидкости // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1975. 15:1. С. 197–207.
10. Абдусаматов А.С., Панарин А.П., Магомедов А.К., Коваленко Л.Д., Гусейнова Б.Р., Дохтукаева А.М., Дудурханова Л.А. Растворимость и деструкция нефти в морской воде // *География и геоэкология. Юг России: экология, развитие*. 2012. №1. С 165–166.
11. Постановление Правительства Российской Федерации от 15 апреля 2002 г. № 240 «О порядке организации мероприятий по предупреждению и ликвидации разливов нефти и нефтепродуктов на территории российской федерации»
12. Gismeteo. URL: <https://www.gismeteo.ru/diary/5211/2007/11/> (дата обращения: 27.09.2015)
13. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежной зоне мелководных водоемов // *Математическое моделирование*. 2013. 25. № 12. 65–82. 27.
14. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежных водных системах на многопроцессорной вычислительной системе // *Вычислительные методы и программирование*. 2014. 15. С. 610–620.
15. 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. 14. С. 103–112.
16. Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е. Моделирование сценария биологической реабилитации Азовского моря // *Математическое моделирование*. 2012. 24. № 9. С. 3–21.

Complex of models, explicit regularized schemes of high-order of accuracy and applications for predictive modeling of aftermath of emergency oil spill

A.I. Sukhinov¹, A.V. Nikitina², A.A. Semenyakina², A.E. Chistyakov²

Don state technical University¹

Kalyaev Scientific Research Institute of Multiprocessor Computer Systems
at Southern Federal University²

The paper covers the dolloped model of oil products transport in view the evaporation of light, neutral and no-evaporating pseudofractal of oil spot, dissolution of oil spot and biodegradation. B.N. Chetverushkin has been proposed the idea of use of regularized schemes to increase the safety factor of explicit schemes. Approximation of diffusion-convection problem was performed on the basis of schemes of high-order of accuracy. Experimental software was developed for mathematical modeling of possible scenarios of development of ecosystems of shallow waters for oil spills on the example of the Azov-Black Sea basin, based on multiprocessor computer systems. Decomposition methods of grid domains have been used for computationally laborious diffusion-convection tasks in parallel implementation. Maximum acceleration was equal to 228.36 times on 512 computational nodes.

Keywords: schemes of high-order of accuracy, transport of oil products, oil films.

References

1. Gluhenky I.Y., Lavrent'ev A.V., Popov, G.G. Modelirovaniye avariynykh razlivov Nefti v Kerchenskom prolive [Simulation of Oil Spills in the Kerch Strait]. Bezopasnost' v tekhnosfere [Safety in Technosphere]. 2011. No. 6. P. 3–6.
2. Chetverushkin B.N. Resolution limits of continuous media models and their mathematical formulations // Mathematical Models and Computer Simulations. 2012. Vol. 24, No. 11. P. 33–52.
3. Sukhinov A.I., Protsenko E.A., Chistyakov A.E., Shreter S.A. Sravneniye vychislitel'nykh effektivnostey yavnoy i neyavnoy skhem dlya zadachi transporta nanosov v pribrezhnykh vodnykh sistemakh [Comparison of computational efficiency of explicit and implicit schemes for the sediment transport problem in coastal zones]. Vychislitel'nyye metody i programmirovaniye [Numerical Methods and Programming]. 2015. Vol. 16, No. 3. P. 328–338.
4. Sukhinov A. I., Chistyakov A. E., Timofeeva E. F., Shishenya A. V. Postroenie i issledovanie diskretnoj matematicheskoy modeli rascheta pribrezhnykh volnovykh processov [Mathematical model for calculating coastal wave processes]. Izvestija JuFU. Tehnicheskie nauki. [News of SFU. Technical sciences]. 2011. No. 8(121). P. 22–32.
5. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E. Parallel'naya realizatsiya trekhmernoy modeli gidrodinamiki melkovodnykh vodoyemov na supervychislitel'noy sisteme [Parallel implementation of a three-dimensional hydrodynamic model of shallow water basins on supercomputing systems]. Vychislitel'nyye metody i programmirovaniye [Numerical Methods and Programming]. 2012. Vol. 13, No. 1. P. 290–297.
6. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Semenyakina A.A., Nikitina A.V. Parallel'naya realizatsiya zadach transporta veshchestv i vosstanovleniya donnoy poverkhnosti na osnove skhem povyshennogo poryadka tochnosti [Parallel implementation of the tasks of transport agents and the bottom surface of the restoration on the basis of schemes of increased order of accuracy]. Vychislitel'nyye metody i programmirovaniye [Numerical Methods and Programming]. 2015. Vol. 16, No. 2. P. 256–267.

7. Belotserkovskii O. M. Turbulentnost': novye podhody [Turbulence: New Approaches]. Moscow: Science, 2003.
8. Samarskii A.A. Teoriya raznostnykh shem [The theory of difference schemes]. Moscow: Science, 1989.
9. Belocerkovskij O.M., Gushhin V.A., Shhennikov V.V. Use of the splitting method to solve problems of the dynamics of a viscous incompressible fluid // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1975. Vol. 15, No. 1. P. 190–200.
10. Abdusamadov A.S., Panarin A.P. Magomedov A.K. , Kovalenko L.D., Huseynov B.R., Doh-tukaeva A.M., Dudurhanova L.A. Rastvorimost' i destruktsiya nefti v morskoy vode [The solubility and degradation of oil in seawater]. Geografiya i geokologiya. Yug Rossii: ekologiya, razvitiye [Geography and Geoecology. Southern Russia: ecology, razvitie]. 2012. No 1. P.165–166.
11. Postanovleniye Pravitel'stva Rossiyskoy federatsii ot 15 aprelya 2002 g. № 240 «O poryadke organizatsii meropriyatiy po preduprezhdeniyu i likvidatsii razlivov nefti i nefteproduktov na territorii rossiyskoy federatsii» [Resolution of the Government of the Russian Federation at April 15, 2002 No. 240 «About the procedure for organizing the activities to the prevention and liquidation of oil spills in the Russian Federation»]
12. Gismeteo. URL: <https://www.gismeteo.ru/diary/5211/2007/11/> (accessed: 27.09.2015).
13. 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. Vol. 6, No. 4. P. 351–363.
14. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A. Matematicheskoye modelirovaniye transporta nanosov v pribrezhnykh vodnykh sistemakh na mnogoprotsessornoy vychislitel'noy sisteme [Mathematical modeling of sediment transport in coastal aquatic systems on a multiprocessor computer system]. Vychislitel'nyye metody i programmirovaniye [Numerical Methods and Programming]. 2014. Vol. 15, P. 610–620.
15. Sukhinov A.I., Nikitina A.V., Chistyakov A.E., Semenov I.S. Matematicheskoye modelirovaniye usloviy formirovaniya zamorov v melkovodnykh vodoyemakh na mnogoprotsessornoy vychislitel'noy sisteme [Mathematical modeling of the formation of suffocation conditions in shallow basins using multiprocessor computing systems]. Vychislitel'nyye metody i programmirovaniye [Numerical Methods and Programming]. 2013. Vol. 14, P. 103–112.
16. Sukhinov A. I., Nikitina A.V., Chistyakov A. E. Numerical simulation of biological remediation Azov Sea // Mathematical Models and Computer Simulations. 2012. Vol. 24, No. 9. P. 3–21.