



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2024. Т. 24, вып. 2. С. 298–315
Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics, 2024, vol. 24, iss. 2, pp. 298–315
<https://mmi.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2024-24-2-298-315>, EDN: LXBVIR

Научная статья
УДК 519.6

Использование параллельных вычислений для оценки процесса переноса загрязняющих веществ в мелководных водоемах

А. И. Сухинов¹, А. Е. Чистяков¹, В. В. Сидорякина^{1,2}✉,
И. Ю. Кузнецова^{1,3}, А. М. Атаян¹

¹Донской государственный технический университет, Россия, 344003, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, д. 1

²Таганрогский институт имени А. П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета (РИНХ), Россия, 347936, г. Таганрог, ул. Инициативная, д. 48

³Южный федеральный университет, Россия, 344006, г. Ростов-на-Дону, ул. Большая Садовая, д. 105, корп. 42

Сухинов Александр Иванович, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, заведующий кафедрой «Математика и информатика», sukhinov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5875-1523>, AuthorID: 143825

Чистяков Александр Евгеньевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем», cheese_05@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8323-6005>, AuthorID: 474527

Сидорякина Валентина Владимировна, кандидат физико-математических наук, ¹доцент кафедры «Математика и информатика»; ²доцент кафедры «Математика», cvv9@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7744-015X>, AuthorID: 124086

Кузнецова Инна Юрьевна, ¹старший преподаватель кафедры «Математика и информатика»; ³старший преподаватель кафедры интеллектуальных и многопроцессорных систем, ikuznecova@sfedu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1996-1605>, AuthorID: 650783

Атаян Ася Михайловна, старший преподаватель кафедры «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем», atayan24@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4629-1002>, AuthorID: 919484

Аннотация. Во многих странах мира отмечается ухудшение геоэкологического состояния водных объектов, связанное со значительно возросшим антропогенным воздействием на природные воды. При этом гарантированное качество водных ресурсов и его надежность обеспечиваются сопоставлением реализуемого качества и гарантированного. В настоящей статье рассматриваются модели поступления и перемещения загрязняющих веществ, содержащихся в водной среде. На основе используемых в настоящее время подходов и критериев загрязнения вод разработан комплекс параллельных программ для высокопроизводительных вычислительных систем, позволяющий моделировать рассматриваемые процессы, а также оценивать риски и уязвимость по отношению к антропогенным воздействиям, проводить районирование акватории мелководного водоема в соответствии с уровнями антропогенных нагрузок, осуществлять экологическое проектирование с позиции устойчивого развития.

Ключевые слова: перенос загрязняющих веществ, модель гидродинамики, модели диффузии-конвекции взвеси, явно-неявная схема, параллельные алгоритмы

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-21-00509).

Для цитирования: Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Сидорякина В. В., Кузнецова И. Ю., Атаян А. М. Использование параллельных вычислений для оценки процесса переноса загрязняющих веществ в мелководных водоемах // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2024. Т. 24, вып. 2. С. 298–315. <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2024-24-2-298-315>, EDN: LXBVIR

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)



Article

Using parallel computing to evaluate the transport of pollutants in shallow waters

A. I. Sukhinov¹, A. E. Chistyakov¹, V. V. Sidoryakina^{1,2✉},
I. Yu. Kuznetsova^{1,3}, A. M. Atayan¹

¹Don State Technical University, 1 Gagarin Sq., Rostov-on-Don 344000, Russia

²Taganrog Institute named after A.P. Chekhov (branch) of the Rostov State University of Economics, 48 Initiativnaya St., Taganrog 347936, Russia

³Southern Federal University, 105/42 Bolshaya Sadovaya St., Rostov-on-Don 344006, Russia

Alexander I. Sukhinov, sukhinov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5875-1523>, AuthorID: 143825

Alexander E. Chistyakov, cheese_05@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8323-6005>, AuthorID: 474527

Valentina V. Sidoryakina, cvv9@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7744-015X>, AuthorID: 124086

Inna Yu. Kuznetsova, ikuznecova@sfedu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1996-1605>, AuthorID: 650783

Asya M. Atayan, atayan24@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4629-1002>, AuthorID: 919484

Abstract. In many countries of the world, there is a deterioration in the geocological state of water bodies, associated with a significantly increased anthropogenic impact on natural waters. At the same time, the guaranteed quality of water resources and its reliability are ensured by comparing the realized quality and the guaranteed one. This article discusses models for the entry and movement of pollutants contained in the aquatic environment. Based on the currently used approaches and water pollution criteria, a set of parallel programs for high-performance computing systems has been developed, which allows modeling of the processes under consideration, as well as assessing risks and vulnerabilities in relation to anthropogenic impacts, zoning the water area of a shallow water body in accordance with the levels of anthropogenic loads, environmental design from the standpoint of sustainable development.

Keywords: pollutant transport, hydrodynamics model, suspension-diffusion-convection models, explicit-implicit scheme, parallel algorithms

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 23-21-00509).

For citation: Sukhinov A. I., Chistyakov A. E., Sidoryakina V. V., Kuznetsova I. Yu., Atayan A. M. Using parallel computing to evaluate the transport of pollutants in shallow waters. *Izvestiya of Saratov University. Mathematics. Mechanics. Informatics*, 2024, vol. 24, iss. 2, pp. 298–315 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2024-24-2-298-315>, EDN: LXBVIR

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

Прогнозирование процессов распространения загрязняющих веществ в природных водах необходимо для успешного управления водными ресурсами [1]. Для решения этой задачи необходимы научно обоснованные математические модели, которые не теряют свою достоверность при широком варьировании пространственных и временных масштабов.

Математические модели переноса загрязняющих веществ претерпели длительный период разработки. Они усложнялись за счет перехода от одного фактора качества воды к множеству факторов, от стационарной модели к динамической модели, от модели точечного источника к модели сопряжения точечных и неточечных источников, от одномерных к двумерным и трехмерным моделям [2, 3].

Как правило, первые модели переноса загрязняющих веществ разрабатывались для речных систем, подверженных влиянию бытовых и промышленных точечных источников загрязнения. Они фокусировались на взаимодействии различных компонентов качества воды [4].



Одной из первых была разработана одномерная модель билинейной системы БПК-РК [5], которая продолжительное время успешно использовалась исследователями и позднее была неоднократно модифицирована. Так, например, появились модели Streeter and Phelps (модели S-P). Для усовершенствования стационарной модели S-P в разное время учеными были внесены корректировки: введен коэффициент флокуляции, разделен параметр БПК на карбонизированный БПК и нитрифицированный БПК, добавлены эффекты дисперсии на основе уравнения Dobbins – Camp [6, 7], добавлен коэффициент скорости изменения БПК и др. Быстрое развитие исследований в области математического моделирования переноса загрязняющих веществ связано с появлением двумерных моделей и адаптации их для различных видов водоемов [6, 7]. Ведется разработка моделей нелинейных систем [8]. Эти модели включали систему круговорота азота и фосфора, систему фитопланктона и зоопланктона. Данные модели преимущественно были сфокусированы на отношениях между биологической скоростью роста и питательными веществами, солнечным светом и температурой, а также фитопланктоном и скоростью роста зоопланктона [9, 10]. К концу прошлого столетия количество переменных в моделях увеличилось, стал учитываться гидродинамический режим водоема и влияние наносов, осуществлен переход к трехмерным моделям [11, 12]. К настоящему времени проведено множество исследований путем разработки программ моделирования для имитации пространственного и временного распределения загрязняющих веществ: QUAL, WASP, MIKE11, QUAL 2K, WASP 6, QUASAR, SWAT, MIKE 21 и MIKE 31, INCA, QUAL 2K, HEC-RAS, EFDC и др. [13].

К настоящему времени разработано более 100 моделей переноса загрязняющих веществ, в том числе сотни модельных программ для ЭВМ, используемых для различных водоемов, различных загрязняющих веществ, в различных пространственно-временных масштабах и др. Однако каждая из моделей имеет свои ограничения, прежде всего, связанные с особенностями водоема. Таким образом, модели переноса загрязняющих веществ все еще нуждаются в дальнейшем изучении.

Авторами разработан комплекс взаимосвязанных пространственно-трехмерных моделей переноса загрязняющих веществ, включающий модели гидродинамики, динамики переноса физической субстанции (взвешенных частиц и наносов), модель эвтрофикации вод, предназначенных для мелководных водоемов. В рамках данной статьи читателю предлагается ознакомиться с параллельными алгоритмами численного решения переноса взвешенных частиц на супервычислительной системе с распределенной памятью при относительно небольшом количестве ядер (до 2048). Также авторами исследованы вопросы распараллеливания процессов численного решения данных задач на массивно-параллельных системах, обеспечивающих высокую эффективность алгоритмов для систем, содержащих многие десятки тысяч ядер. Приведены результаты численных экспериментов.

1. Комплекс взаимосвязанных 3D моделей транспорта загрязняющих веществ

Будем использовать прямоугольную декартовую систему координат $Oxyz$, где оси Ox и Oy проходят по поверхности невозмущенной водной поверхности и направлены на север и восток соответственно, ось Oz направлена вниз.

Пусть $G \subset \mathbb{R}^3$ — область, где происходит процесс, представляет собой параллелепипед $G = \{0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z \leq L_z\}$. Обозначим нижнее основание параллелепипеда — Σ_b , верхнее основание — Σ_f , боковую поверхность — Σ_l .

1.1. Модель гидродинамики

В основу разрабатываемой модели расчета трехмерных полей вектора скорости движения водной среды положена математическая модель гидродинамики мелководных водоемов [14–16].



Данная модель включает следующие уравнения:

– уравнения движения по трем координатным направлениям (система уравнений Навье – Стокса)

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

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

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

– уравнение неразрывности (закон сохранения массы)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0; \quad (4)$$

– уравнение транспорта тепла

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} + \frac{\partial(wT)}{\partial z} \right) = \\ = \mu_h \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial T}{\partial z} \right); \end{aligned} \quad (5)$$

– уравнение состояния для плотности

$$\rho_0 = \rho(T_0). \quad (6)$$

Здесь использованы следующие обозначения: u, v, w – компоненты вектора \vec{U} скорости движения жидкости; t – временная переменная; P – давление; g – ускорение свободного падения; ρ – плотность жидкости; μ_h, μ_v – коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии соответственно; T – температура в конкретной точке области; T_0 – температура, при которой плотность максимальна.

Система уравнений (1)–(6) рассматривается при начальном условии

$$u = u_0, \quad v = v_0, \quad w = w_0, \quad (7)$$

и при следующих граничных условиях:

$$\Sigma_l : u = u_0, \quad v = v_0, \quad \frac{\partial P}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \frac{\partial \vec{V}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (8)$$

$$\Sigma_f : \rho \mu_h \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = -\tau_x, \quad \rho \mu_h \frac{\partial v}{\partial \vec{n}} = -\tau_y, \quad \frac{\partial P}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \frac{\partial \vec{V}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (9)$$

$$\Sigma_b : \rho \mu_h \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = -\tau_x, \quad \rho \mu_h \frac{\partial v}{\partial \vec{n}} = -\tau_y, \quad w = -\omega - \frac{\partial P}{\partial t} \frac{1}{\rho g}, \quad \frac{\partial P}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (10)$$

где ω – интенсивность испарения жидкости, τ_x, τ_y – составляющие тангенциального напряжения.

1.2. Модель диффузии-конвекции-агрегирования взвесей

Для описания транспорта взвешенных частиц воспользуемся уравнением диффузии-конвекции, которое может быть записано в следующем виде:

$$\frac{\partial c_r}{\partial t} + \frac{\partial(uc_r)}{\partial x} + \frac{\partial(vc_r)}{\partial y} + \frac{\partial((w + w_{gr})c_r)}{\partial z} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_h \frac{\partial c_r}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_h \frac{\partial c_r}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial c_r}{\partial z} \right) + F_r, \quad (11)$$

где c_r — концентрация r -й фракции взвеси; w_{gr} — скорость осаждения r -й фракции взвеси; F_r — функция, описывающая интенсивность распределения источников r -й фракции взвеси.

Уравнения (11) дополняются начальным условием

$$c_r(x, y, z, 0) = c_{r0}(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \bar{G}, \quad (12)$$

и следующими граничными условиями:

$$\Sigma_l : \quad c_r = c'_r, \quad c'_r = \text{const}, \quad \text{если } u_{\vec{n}} < 0; \quad \frac{\partial c_r}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \text{если } u_{\vec{n}} \geq 0, \quad (13)$$

где $u_{\vec{n}}$ — проекция вектора скорости на внешнюю нормаль \vec{n} к границе; c'_r — известные значения концентрации;

$$\Sigma_f : \quad \frac{\partial c_r}{\partial z} = 0; \quad (14)$$

$$\Sigma_b : \quad \frac{\partial c_r}{\partial z} = - \frac{w_{gr}}{\mu_{vr}} c_r. \quad (15)$$

Математические модели транспорта взвешенных частиц позволяют спрогнозировать распространение шлейфов взвеси в водной среде и изменение рельефа дна в связи с выпадением взвешенных частиц грунта в осадок. На основе модели (11)–(15) могут быть рассмотрены процессы движения и осаждения взвешенных частиц при проведении дноуглубительных работ, а также возможность оптимизации площадей существующих отвалов грунта. Оптимизация размеров областей отвалов грунта позволяет минимизировать ущерб, наносимый биотопам. Численное решение дифференциальных уравнений (11) совместно с уравнениями гидродинамики (1)–(10) позволяет моделировать разнообразные процессы стационарного и нестационарного загрязнений мелких водоемов.

1.3. Модель эвтрофикации вод

На основе уже рассмотренного выше уравнения диффузии-конвекции может быть построена модель эвтрофикации вод, т. е. описан процесс насыщения водоемов биогенными элементами, сопровождающийся ростом биологической продуктивности акватории. Эвтрофикация может быть результатом как естественных изменений в водоеме, так и антропогенных воздействий. Модель представляет собой совокупность уравнений для каждого s_i — значения концентрации i -й примеси:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial (us_i)}{\partial x} + \frac{\partial (vs_i)}{\partial y} + \frac{\partial ((w + w_{gi}) s_i)}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_h \frac{\partial s_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_h \frac{\partial s_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial s_i}{\partial z} \right) + \Psi_i, \end{aligned} \quad (16)$$

где w_{gi} — гравитационное осаждение i -й компоненты, если она находится во взвешенном состоянии; ψ_i — химико-биологический источник (сток) или член, описывающий агрегирование (слипание-разлипание), если соответствующая компонента является взвесью, индекс i указывает на вид субстанции, $i = \overline{1, 15}$: 1 — сероводород (H_2S); 2 — элементарная сера (S); 3 — сульфаты (SO_4); 4 — тиосульфаты (и сульфиты); 5 — общий органический азот (N); 6 — аммоний (NH_4) (аммонийный азот); 7 — нитриты (NO_2); 8 — нитраты (NO_3); 9 — фитопланктон; 10 — зоопланктон; 11 — растворенный кислород (O_2); 12 — силикаты (SiO_3 — метасиликат; SiO_4 — ортосиликат); 13 — фосфаты (PO_4); 14 — железо (Fe^{2+}); 15 — кремниевая кислота (H_2SiO_3 — метакремневая; H_2SiO_4 — ортокремневая).



Уравнения (16) дополняются начальным условием

$$s_i(x, y, z, 0) = s_{i0}(x, y, z), \quad (x, y, z) \in \bar{G}, \quad i = \overline{1, 15}, \quad (17)$$

и следующими граничными условиями

$$\Sigma_l : s_i = 0, \quad \text{если } u_{\vec{n}} < 0; \quad \frac{\partial s_i}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \text{если } u_{\vec{n}} \geq 0, \quad i = \overline{1, 15}, \quad (18)$$

где $u_{\vec{n}}$ — проекция вектора скорости на внешнюю нормаль \vec{n} к границе, c'_r — известные значения концентрации;

$$\Sigma_f : \frac{\partial s_i}{\partial z} = \varphi(s_i), \quad i = \overline{1, 15}; \quad (19)$$

$$\Sigma_b : \frac{\partial s_r}{\partial z} = -\varepsilon_{s_i} s_i, \quad (20)$$

где ε_{s_i} — коэффициент поглощения i -й примеси донными отложениями.

При штилях и близких к ним ветровых ситуациях возникают анаэробные условия в придонных слоях мелководных водоемов (например, Азовского моря). Восстановление поверхностного водонасыщенного ила влечет за собой высвобождение в раствор (кроме сероводорода) сульфатов, двухвалентного марганца и железа, органических соединений, аммония, силикатов и фосфатов. С помощью модели (16)–(20) могут быть описаны процессы аммонификации, нитрификации, нитратредукции (денитрификации), ассимиляции NH_4 , окисления H_2S , сульфатредукции, окисления и восстановления марганца, а также можно изучать механизм условий формирования заморов в результате антропогенной эвтрофикации, прогнозировать изменения кислородного и биогенного режимов.

1.4. Оценка уязвимости мелководных водоемов по отношению к антропогенным воздействиям

Поскольку целью настоящей статьи является описание результатов использования программного комплекса и проведенных численных экспериментов по переносу загрязняющих веществ, то авторы в работе не будут сосредоточены на описании методик оценок риска. Остановимся лишь на порядке проведения оценки уязвимости по отношению к антропогенным воздействиям, которая может быть описана следующим образом:

- 1) изучение географических, топологических, климатических, геологических, гидрологических особенностей водного объекта;
- 2) определение возможных источников поступления загрязняющих веществ: стоки рек, сбросы загрязняющих веществ предприятиями, судоходство и т.д. Моделирование возможных сценариев распространения загрязняющих веществ на основе моделей, описываемых выражениями (1)–(10), (11)–(15) и (16)–(20);
- 3) оценка токсического эффекта загрязняющих веществ, которые могут поступать из определенных выше источников;
- 4) расчет фактора риска R на основе формулы

$$R = Ef_S \cdot E_S,$$

где Ef_S — фактор эффективности воздействия загрязняющих веществ, E_S — фактор экспозиции, $E_S = P_S k_{BA} / Y$ (c — концентрация частиц, Y — способ использования химиката, P_S — характеристика скорости гидролиза, k_{BA} — фактор биоаккумуляции). Факторы экспозиции для воды могут принимать значения 0.4–25 c_r ;

- 5) нормализация фактора риска R :

$$c_y = \frac{c - c_{\min}}{c_{\max} - c_{\min}},$$

где c_y — нормализованный фактор риска, если риск возрастает с ростом концентрации c частиц. При этом нормализованный фактор риска $c_y \in [0, 1]$;

- 6) на основании полученной оценки риска делаются предварительные заключения: риск считается высоким при $c_y > 0.55$, потенциально значимым при $0.3 < c_y < 0.55$, отсутствующим при $c_y < 0.3$.

2. Численные методы решения задачи диффузии-конвекции-агрегирования взвесей

2.1. Построение явно-неявной схемы

Уравнение (11) запишем в виде

$$\frac{\partial c_r}{\partial t} = A c_r + F_r(x, y, z, t), \quad (x, y, z) \in G, \quad t \in [0, T], \quad (21)$$

где $A c_r$ — дифференциальный эллиптический оператор по пространственным переменным с младшими производными, для которого справедливо следующее представление:

$$\begin{aligned} A c_r &= \frac{\partial (u c_r)}{\partial x} + \frac{\partial (v c_r)}{\partial y} + \frac{\partial ((w + w_{gr}) c_r)}{\partial z} - \\ &- \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_h \frac{\partial c_r}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_h \frac{\partial c_r}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial c_r}{\partial z} \right) = (A_{12} + A_3) c_r, \\ A_{12} c_r &= \frac{\partial (u c_r)}{\partial x} + \frac{\partial (v c_r)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_h \frac{\partial c_r}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_h \frac{\partial c_r}{\partial y} \right), \\ A_3 c_r &= \frac{\partial ((w + w_{gr}) c_r)}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_v \frac{\partial c_r}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

На временном отрезке $0 \leq t \leq T$ построим равномерную сетку ω_τ с шагом τ , т.е. множество точек

$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad N\tau = T\}.$$

Если решение $c_r^{n-1}(x, y, z, t_{n-1})$ в некоторый момент времени t_{n-1} известно, то решение в момент времени t_n можно выразить через это известное решение. На каждом шаге по времени решение задачи (21), (12)–(15) представим в виде

$$\frac{c_r^{n+1} - c_r^n}{\tau} + A_{12} c_r^n + A_3 c_r^{n+1/2} = F_r^n, \quad n = 1, \dots, N. \quad (23)$$

Для увеличения допустимого шага по времени при аппроксимации двумерной задачи (7), (22) явной разностной схемой добавим в левую часть уравнения (23) производную по времени второго порядка с малым множителем-регуляризатором [17, 18], не превосходящим характерное время распространения возмущений концентраций по горизонтальным направлениям:

$$\begin{aligned} \frac{\tau^*}{2} \frac{c_r^{n+1} - 2c_r^n + c_r^{n-1}}{\tau^2} + \frac{c_r^{n+1} - c_r^n}{\tau} + A_{12} c_r^n + A_3 c_r^{n+1/2} &= F_r^n, \quad n = 2, \dots, N, \\ \tau^* \frac{c_r^{n+1} - c_r^n}{\tau^2} + \frac{c_r^{n+1} - c_r^n}{\tau} + A_{12} c_r^n + A_3 c_r^{n+1/2} &= F_r^n, \quad n = 1, \end{aligned} \quad (24)$$

где коэффициент τ^* , $\tau^* \sim (\tau/\tilde{c})$, связан с характерным шагом пространственной сетки τ и характерной скоростью звука в водной среде. Было показано [19], что при $\tau^* \rightarrow 0$ решение задачи (24) стремится к решению задачи (23).

В области \bar{G} построим связную сетку $\bar{\omega}_h$. Множество узлов данной сетки состоит из внутренних и граничных узлов. Совокупность ω_h внутренних узлов задаем множеством точек:

$$\omega_h = \left\{ x_i = i h_x, \quad y_j = j h_y, \quad z_k = k h_z; \quad i = \overline{0..N_x}, \quad j = \overline{0..N_y}, \quad k = \overline{0..N_z}; \right. \\ \left. N_x h_x = L_x, \quad N_y h_y = L_y, \quad N_z h_z = L_z \right\},$$



где h_x, h_y, h_z — шаги по пространству, N_x, N_y, N_z — количество узлов по пространственным координатам.

Через $o_{i,j,k}$ обозначена «заполненность» ячейки (i, j, k) . Вводятся коэффициенты $q_0, q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6$, описывающие заполненность областей, находящихся в окрестности ячейки [20].

На основе метода баланса с учетом коэффициентов заполненности контрольных областей $q_m, m = 0, \dots, 6$ можно аппроксимировать уравнения (24), при этом дискретный аналог регуляризованного уравнения для расчета транспорта взвеси примет вид

$$\begin{aligned}
 & q_0(i, j, k) \frac{\tau^* c_{r(i,j,k)}^{n+1} - 2c_{r(i,j,k)}^n + c_{r(i,j,k)}^{n-1}}{\tau^2} + q_0(i, j, k) \frac{c_{r(i,j,k)}^{n+1} - c_{r(i,j,k)}^n}{\tau} + \\
 & + q_1(i, j, k) u^{(i+1/2, j, k)} \frac{c_{r(i+1,j,k)}^n - c_{r(i,j,k)}^n}{2h_x} + q_2(i, j, k) u^{(i-1/2, j, k)} \frac{c_{r(i,j,k)}^n - c_{r(i-1,j,k)}^n}{2h_x} + \\
 & + q_3(i, j, k) v^{(i, j+1/2, k)} \frac{c_{r(i,j+1,k)}^n - c_{r(i,j,k)}^n}{2h_y} + q_4(i, j, k) v^{(i, j-1/2, k)} \frac{c_{r(i,j,k)}^n - c_{r(i,j-1,k)}^n}{2h_y} + \\
 & + q_5(i, j, k) (w_{(i, j, k+1/2)} + w_{gr}) \frac{c_{r(i,j,k+1)}^{n+1/2} - c_{r(i,j,k)}^{n+1/2}}{2h_z} + \\
 & + q_6(i, j, k) (w_{(i, j, k-1/2)} + w_{gr}) \frac{c_{r(i,j,k)}^{n+1/2} - c_{r(i,j,k-1)}^{n+1/2}}{2h_z} = \\
 = & q_1(i, j, k) \mu h \frac{c_{r(i+1,j,k)}^n - c_{r(i,j,k)}^n}{h_x^2} - q_2(i, j, k) \mu h \frac{c_{r(i,j,k)}^n - c_{r(i-1,j,k)}^n}{h_x^2} + q_3(i, j, k) \mu h \frac{c_{r(i,j+1,k)}^n - c_{r(i,j,k)}^n}{h_y^2} - \\
 & - q_4(i, j, k) \mu h \frac{c_{r(i,j,k)}^n - c_{r(i,j-1,k)}^n}{h_y^2} + q_5(i, j, k) \mu v^{(i, j, k+1/2)} \frac{c_{r(i,j,k+1)}^{n+1/2} - c_{r(i,j,k)}^{n+1/2}}{h_z^2} - \\
 & - q_6(i, j, k) \mu v^{(i, j, k-1/2)} \frac{c_{r(i,j,k)}^{n+1/2} - c_{r(i,j,k-1)}^{n+1/2}}{h_z^2} + F_{r(i,j,k)}^n. \tag{25}
 \end{aligned}$$

2.2. Сеточные уравнения

Запишем сеточные уравнения для задачи (25) в канонической форме [21]:

$$\begin{aligned}
 & A_{(i,j)} c_{r(i,j,k)}^{n+1} - B_{1(i,j)} c_{r(i,j,k+1)}^{n+1} - B_{2(i,j)} c_{r(i,j,k-1)}^{n+1} = F_{r(i,j,k)}^n, \\
 & B_{1(i,j,k)} = q_5(i, j, k) \left(-\frac{w_{(i, j, k+1/2)} + w_{gr}}{4h_z} + \frac{\mu v^{(i, j, k+1/2)}}{2h_z^2} \right), \\
 & B_{2(i,j,k)} = q_5(i, j, k) \left(-\frac{w_{(i, j, k+1/2)} + w_{gr}}{4h_z} + \frac{\mu v^{(i, j, k+1/2)}}{2h_z^2} \right), \\
 & A_{(i,j,k)} = q_0(i, j, k) \frac{\tau + \tau^*/2}{\tau^2} + B_{1(i,j)} + B_{2(i,j)}, \tag{26} \\
 & F_{r(i,j,k)}^n = D_{0(i,j,k)} c_{r(i,j,k)}^n + D_{1(i,j,k)} c_{r(i+1,j,k)}^n + D_{2(i,j,k)} c_{r(i-1,j,k)}^n + \\
 & + D_{3(i,j,k)} c_{r(i,j+1,k)}^n + D_{4(i,j,k)} c_{r(i,j-1,k)}^n + B_{1(i,j,k)} c_{r(i,j+1,k)}^n + \\
 & + B_{2(i,j,k)} c_{r(i,j-1,k)}^n - E_{(i,j,k)} c_{r(i,j,k)}^{n-1} + F_{r(i,j,k)}^n, \\
 & D_{1(i,j,k)} = q_1(i, j, k) \left(-\frac{u^{(i+1/2, j, k)}}{2h_x} + \frac{\mu h}{h_x^2} \right), \quad D_{2(i,j,k)} = q_2(i, j, k) \left(\frac{u^{(i-1/2, j, k)}}{2h_x} + \frac{\mu h}{h_x^2} \right), \\
 & D_{3(i,j,k)} = q_3(i, j, k) \left(-\frac{\mu v^{(i, j+1/2, k)}}{2h_y} + \frac{\mu h}{h_y^2} \right), \quad D_{4(i,j,k)} = q_4(i, j, k) \left(\frac{\mu v^{(i, j-1/2, k)}}{2h_y} + \frac{\mu h}{h_y^2} \right), \\
 & D_{0(i,j,k)} = q_0(i, j, k) \frac{\tau + \tau^*}{\tau^2} - \sum_{p=1}^4 D_{p(i,j,k)}, \quad E_{(i,j,k)} = q_0(i, j, k) \frac{\tau^*}{2\tau^2}.
 \end{aligned}$$

Для расчета правой части необходимо $16N$ арифметических операций. Для решения задачи (26) на первом временном слое необходимо $8N$, а для последующих слоев $5N$ арифметических операций. Таким образом, всего для перехода между слоями необходимо $21N$ операций. Расчет по явной схеме выглядит

$$c_{r(i,j,k)}^{n+1} = (B_{1(i,j)}/A_{(i,j)}) c_{r(i,j,k+1)}^{n+1} + (B_{2(i,j)}/A_{i,j}) c_{r(i,j,k-1)}^{n+1} + (F_{r(i,j,k)}^n/A_{(i,j)}), \quad (27)$$

что занимает $16N$ арифметических операций.

2.3. Построение параллельных алгоритмов для расчета двумерных задач

Рассмотрим построение параллельных алгоритмов для расчета двумерных задач. Расчетная область покрыта равномерной сеткой:

$$\omega_{i,j} = \{x(ih_x) = x_i, y(jh_y) = y_j; i \in \overline{0, N_x - 1}, j \in \overline{0, N_y - 1}; h_x N_x = L_x, h_y N_y = L_y\},$$

где i, j — индексы расчетной области, h_x, h_y — шаги по пространственным направлениям, N_x, N_y — количество шагов по пространственным направлениям, L_x, L_y — размеры расчетной области.

В узлах расчетной сетки вычисляются значения поля $u(x, y)$: $u_{i,j}$ при $i \in \overline{1, N_x - 2}, j \in \overline{1, N_y - 2}$, при этом по периметру ($i \in \overline{0, N_x - 1}, j \in \overline{0, N_y - 1}$) находятся фиктивные узлы. Выполним декомпозицию расчетной области вдоль пространственного направления Oy прямыми, параллельными оси Ox , при этом обозначим w^r — подобласть с номером $r, 0 \leq r \leq p - 1$, где p — количество подобластей, на которые разбита исходная область. Расчетными узлами области w^r являются элементы $u_{i,j}^r$ при $i \in \overline{1, N_x - 2}, j \in \overline{1, N_y^r - 2}$. Разбиение исходной области выполнено таким образом, чтобы смежные области w^r и w^{r+1} пересекались в двух узлах вдоль направления, перпендикулярного линиям разбиения, и имели место равенства $u_{i, N_y^r - 2}^r = u_{i, 0}^{r+1}, u_{i, N_y^r - 1}^r = u_{i, 1}^{r+1}$. На рис. 1 представлена декомпозиция расчетной области, где белые круги обозначают фиктивные узлы расчетной сетки, синие — узлы, в которых осуществляется расчет первым вычислителем, красные — узлы, в которых осуществляется расчет вторым вычислителем.

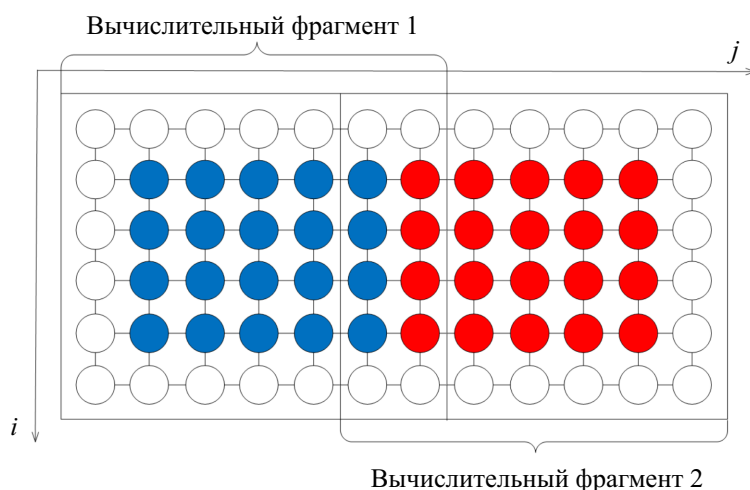


Рис. 1. Декомпозиция расчетной области (цвет онлайн)
 Fig. 1. Decomposition of the computational domain (color online)

Для представления значения поля $u(x, y)$ в векторной форме паре индексов i, j можно поставить в соответствие значение m , описывающее порядковый номер элемента вектора u : $m = i + jN_x, 0 \leq m \leq n - 1, n$ — длина вектора $u = (u_0, u_1, \dots, u_{n-1})^T$. Данное представление



удобно использовать при описании и исследовании алгоритмов решения сеточных уравнений итерационными методами.

Для фрагментов w^r , полученных в результате декомпозиции расчетной области по одному пространственному направлению, необходимо знать два параметра: начальный индекс $j = N_1^r$ в исходной расчетной области и ширину фрагмента N_2^r . Номер индекса N_1^r , с которого начинается соответствующий фрагмент расчетной области, можно рассчитать по формуле

$$N_1^r = \lfloor r \cdot (N_y - 2) / p \rfloor.$$

Здесь и далее $\lfloor x \rfloor$ — функция «пол» определяется как наибольшее целое, меньшее или равное x , $\lceil x \rceil$ — функция «потолок» определяется как наименьшее целое, большее или равное x .

Ширина подобласти w^r вдоль оси Oy рассчитывается по формуле

$$N_2^r = \lfloor (r + 1) \cdot (N_y - 2) / p \rfloor - N_1^r + 2.$$

Для теоретической оценки работы вычислительных систем используют следующие параметры:

- t_a — время выполнения одной арифметической операции;
- t_l — время организации передачи данных (латентность);
- t_x — время передачи одного данного.

На рис. 2 приведен график зависимости времени передачи от объема данных для разного количества обменов между узлами вычислительной системы. На графике видно, что функция зависимость времени передачи имеет скачок при объемах передаваемых данных, равных примерно 512 числам с плавающей точкой. Обозначим данное значение $N_{\max} = 512$.

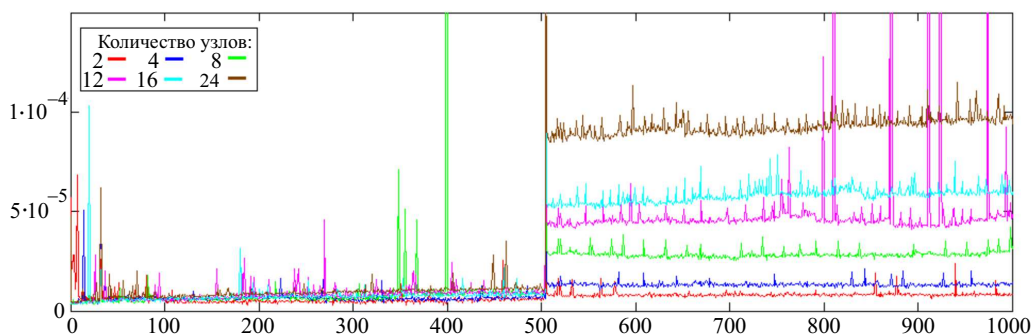


Рис. 2. Зависимость времени передачи данных от объема при работе с разным числом вычислительных узлов (цвет онлайн)

Fig. 2. Dependence of data transfer time on volume when working with different numbers of computing nodes (color online)

Расчет данных на многопроцессорной вычислительной системе позволяет в значительной мере сократить время вычислений. Однако эффективность времени работы вычислительной системы не всегда может быть ожидаемой. В этом случае корректно провести теоретический анализ расчета времени вычислений на основе регрессионного анализа.

Рассмотрим модель множественной регрессии. Вектор t_l — итоговое время работы вычислительной системы (секунды), векторы n, p — объясняющие факторы: объем передаваемых данных и количество используемых вычислительных узлов. Для времени латентности имеет место формула

$$t_l(p, n) = \begin{cases} 5.21 \cdot 10^{-6} + 1.53 \cdot 10^{-7}p, & \text{если } n \leq 512, \\ 6.733 \cdot 10^{-6}p, & \text{если } n > 512. \end{cases} \quad (28)$$

Время передачи одного данного $t_x = 3.3 \times 10^{-9}$.

Временные траты на одну итерацию в случае последовательного варианта алгоритма составят

$$t = 21t_a(N_x - 2)(N_y - 2). \tag{29}$$

При расчете параллельным алгоритмом на многопроцессорной вычислительной системе время расчета составит

$$t = t_a 21 (N_x - 2) \max_r (N_2^r - 2) + 2 (t_l (p, N_x - 2) + (N_x - 2) t_x),$$

$$\left\lfloor \frac{N_y - 2}{p} \right\rfloor \leq \max_r (N_2^r - 2) \leq \left\lceil \frac{N_y - 2}{p} \right\rceil, \quad \max_r N_2^r \approx \frac{N_y - 2}{p}.$$

В случае если объем передаваемых данных больше $N_x - 2 > N_{\max}$, то выполняется $k = \lceil (N_x - 2) / N_{\max} \rceil$ обменов, тогда временные траты параллельного алгоритма равны

$$t = 21t_a \frac{(N_x - 2)(N_y - 2)}{p} + 2 (t_l (p, \lceil (N_x - 2) / k \rceil) k + (N_x - 2) t_x). \tag{30}$$

Ускорение параллельной работы алгоритма равно

$$S_p = \frac{21pt_a (N_x - 2)(N_y - 2)}{21t_a (N_x - 2)(N_y - 2) + 2p (t_{lat} (p, \lceil \frac{N_x - 2}{k} \rceil) k + (N_x - 2) t_x)}. \tag{31}$$

На рис. 3 представлены результаты работы параллельного варианта алгоритма для различного числа процессоров при варьируемой декомпозиции расчетной области. Здесь изображены графики ускорения параллельной версии алгоритма схемы расщепления на двумерную явную и одномерную неявную на основе технологии MPI и линейного ускорения в зависимости от числа задействованных вычислителей (с учетом различных вариантов декомпозиции расчетной области). Максимальное число использованных вычислителей — 24, размер расчетной сетки составил $1000 \times 1000 \times 60$ узлов.

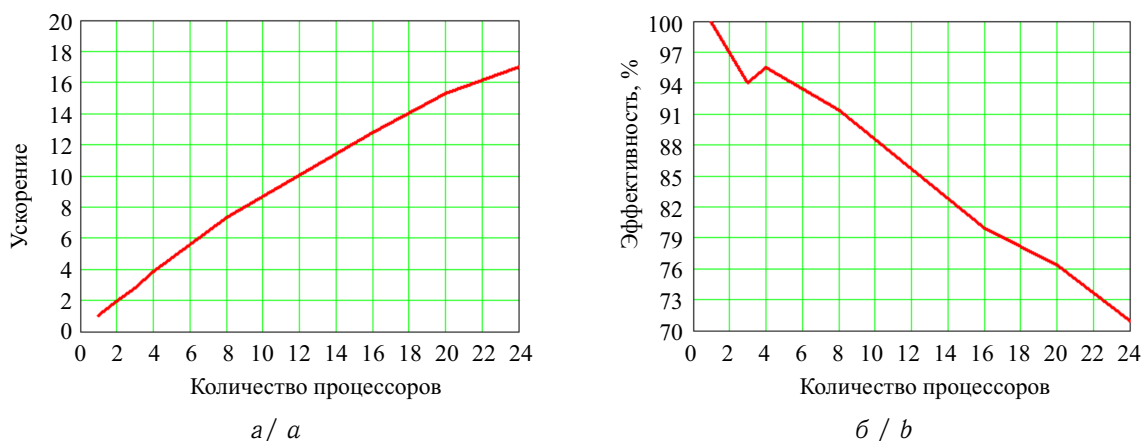


Рис. 3. Результаты работы параллельного варианта алгоритма для различного числа процессоров при варьируемой декомпозиции расчетной области: а — концентрация взвеси в воде; б — поле плотности водной среды

Fig. 3. Results of the parallel version of the algorithm for different numbers of processors with varying decomposition of the computational domain: a — concentration of suspended matter in water; b — density field of the aquatic environment

3. Численные эксперименты моделирования переноса загрязняющих веществ

Описанный выше подход к оценке качества вод является частью разрабатываемого в коллективе прогнозного комплекса «Azov3d». Данный комплекс использовался 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 расчет гидростатического давления и трехмерного поля скорости. С помощью внедрения новых расчетных функций были встроены параллельные программные блоки, предназначенные для моделирования переноса загрязняющих веществ. Разработанный программный комплекс может применяться для расчета переноса как для тяжелых примесей так и для примесей, которые легче воды, таких как микропластик. Численная реализация предложенных математических моделей осуществлена на основе параллельных алгоритмов, ориентированных на многопроцессорную вычислительную систему.

3.1. Моделирование транспорта взвеси при дампинге грунта

В качестве модельного примера рассмотрим моделирование процесса осаждения взвеси при проведении дноуглубительных работ [22] на основе модели (11)–(15).

Входные данные по акватории и взвеси: длина водоема — 3 км; ширина водоема — 1.4 км; глубина водоема — 10 м; скорость течения — 0.2 м/с; объем загрузки — 741 м³; скорость осаждения взвеси (по Стоксу) — 2.042 мм/с; плотность грунта — 1600 кг/м³; процентное содержание пылеватых частиц ($d < 0.05$ мм) в песчаных грунтах — 26.83%.

Параметры расчетной области: шаг по горизонтальным пространственным координатам — 20 м; шаг по вертикальной пространственной координате — 1 м; расчетный интервал — 2 ч; шаг по времени — 1 мин.

На рис. 4 приведена динамика изменения концентрации взвешенных частиц (мг/л) с течением времени.

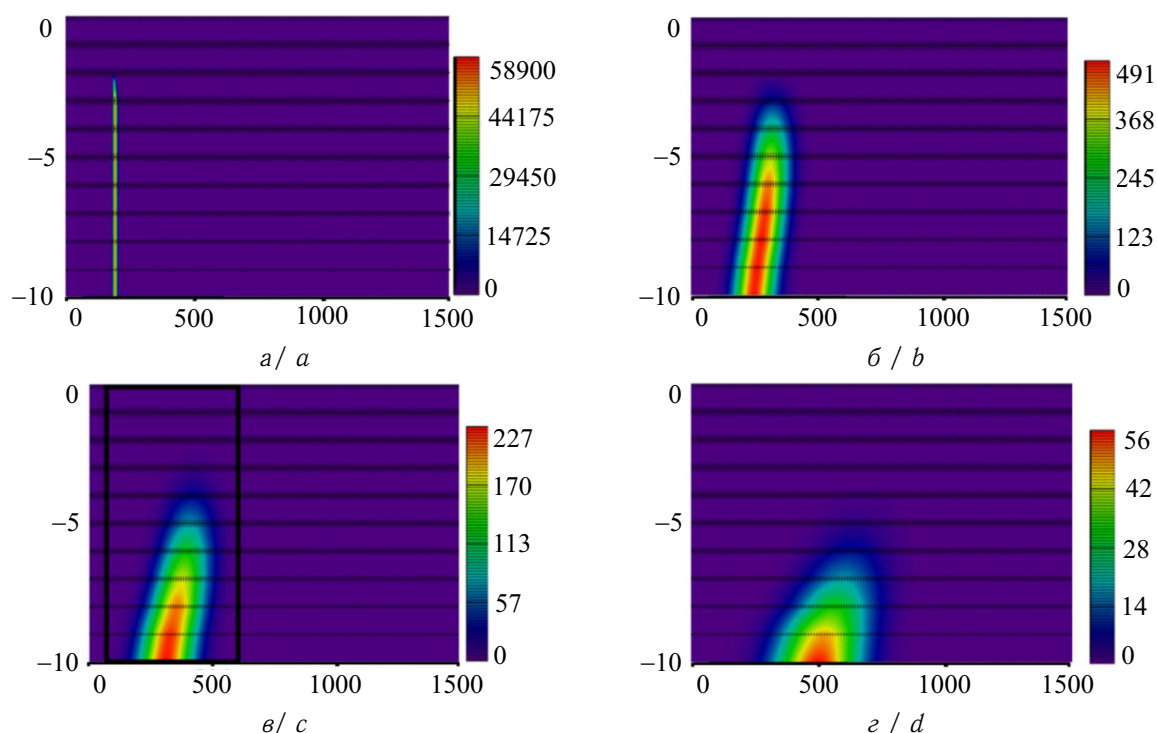


Рис. 4. Поле концентрации взвешенных частиц в разные моменты времени: *a* — начальный момент; *b* — через 15 мин.; *c* — через 30 мин.; *d* — через 45 мин. после момента выгрузки (цвет онлайн)

Fig. 4. Concentration field of suspended particles at different times: *a* — initial moment; *b* — after 15 min; *c* — 30 min; *d* — 45 min after the moment of unloading (color online)

Приведены значения поля концентрации взвеси в сечении расчетной области плоскостью, проходящей через точку выгрузки и образованной векторами, направленными вертикально



и вдоль течения. Течения направлены слева направо. Исходя из полученных материалов, рассчитываем общее количество загрязненной воды при отвалах грунта (таблица).

Объемы загрязненной воды при сбросе грунта
Table. Volumes of contaminated water during soil discharge

№ участка	Общий объем загрязненной воды при разовом сбросе, млн м ³	В том числе воды с концентрациями ЗВ, млн м ³			Кол-во сбросов	Общий объем воды с концентрациями ЗВ, млн м ³		
		>0.25 мг/л	>20 мг/л	>100 мг/л		>0.25 мг/л	>20 мг/л	>100 мг/л
1	1.285	0.890	0.245	0.150	124	110.360	30.38	18.6
2	1.120	0.813	0.202	0.105	50	4.650	10.10	5.25
3	1.279	0.889	0.240	0.150	45	40.005	10.80	6.75

На основе разработанного программного комплекса, включающего в себя модули расчета гидродинамических процессов, транспорта взвешенных частиц и биологической продуктивности фито- и зоопланктона, определен объем вод, загрязненных при отвалах грунта; рассчитаны площади областей, в которых наблюдается гибель донной растительности на отвалах и в районах дноуглубительных работ. Данный программный комплекс позволяет спрогнозировать как распространение шлейфов взвеси в водной среде, так и изменение рельефа дна в связи с выпадением взвешенных частиц грунта в осадок. На основе разработанного программного комплекса установлено, что уменьшение размеров областей отвалов грунта позволяет минимизировать ущерб, наносимый биотопам.

3.2. Моделирование транспорта взвешенных частиц в устьевом районе

Рассмотрим результаты работы программного комплекса на примере водного участка, расположенного в устьевом районе. Входные данные по акватории и взвеси: длина водоема — 50 м; ширина водоема — 50 м; глубина водоема — 2 м; скорость течения — 0.2 м/с; скорость осаждения взвеси (по Стоксу) — 2.042 мм/с; плотность пресной воды при нормальных условиях — 1000 кг/м³; плотность взвеси — 2700 кг/м³; объемная доля взвеси — 1/17. Параметры расчетной области: шаг по горизонтальным пространственным координатам — 0.5 м; шаг по вертикальной пространственной координате — 0.1 м; расчетный интервал — 5 мин, шаг по времени — 0.25 с. На рис. 5 представлена геометрия расчетной области в виде карты глубин.

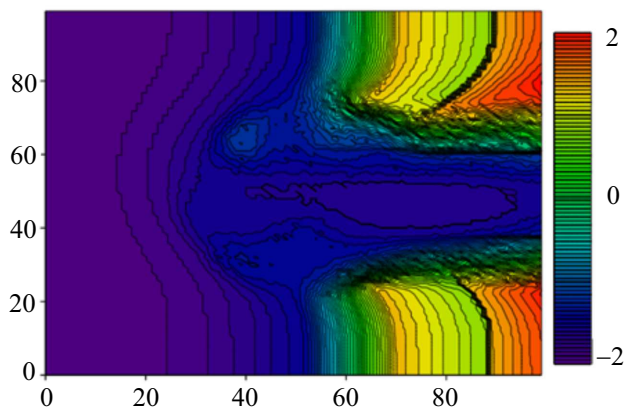


Рис. 5. Карта глубин расчетной области (цвет онлайн)
Fig. 5. Depth map of the computational domain (color online)

существенного градиента плотности водной среды (слева показана средняя концентрация по глубине, справа — плотность в сечении плоскостью Oxz , проходящей по центру расчетной области (при $y = 25$ м)). На вертикальных срезах справа можно наблюдать изменение концентрации взвеси в стратифицированных слоях водной среды при меняющейся плотности с течением времени.

На рис. 6, 7 представлены результаты моделирования процесса транспорта взвеси в результате смешения и движения вод в устьевом районе при наличии

результаты моделирования процесса транспорта взвеси в результате смешения и движения вод в устьевом районе при наличии

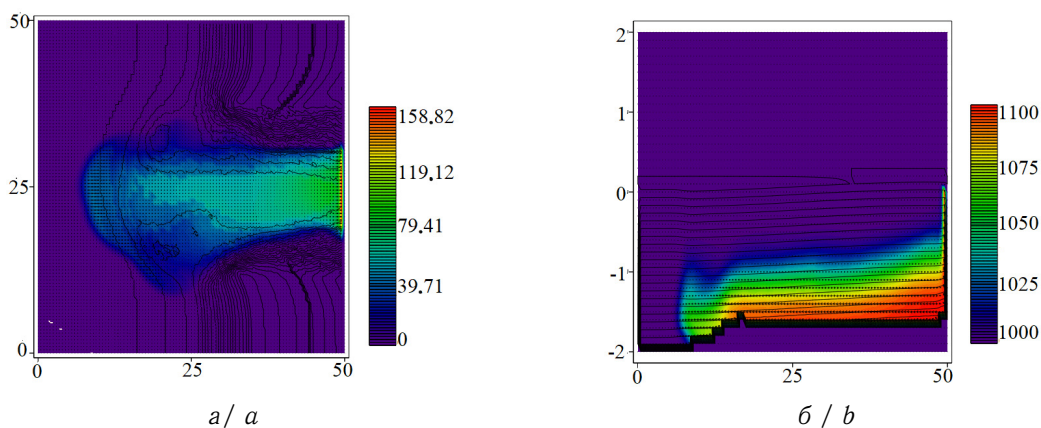


Рис. 6. Движение вод в устьевом районе при наличии существенного градиента плотности водной среды через 1 мин: *a* — концентрация взвеси в воде; *б* — поле плотности водной среды (цвет онлайн)

Fig. 6. Movement of water in the mouth area in the presence of a significant density gradient of the aquatic environment after 1 min: *a* — concentration of suspended matter in water; *b* — density field of the aquatic environment (color online)

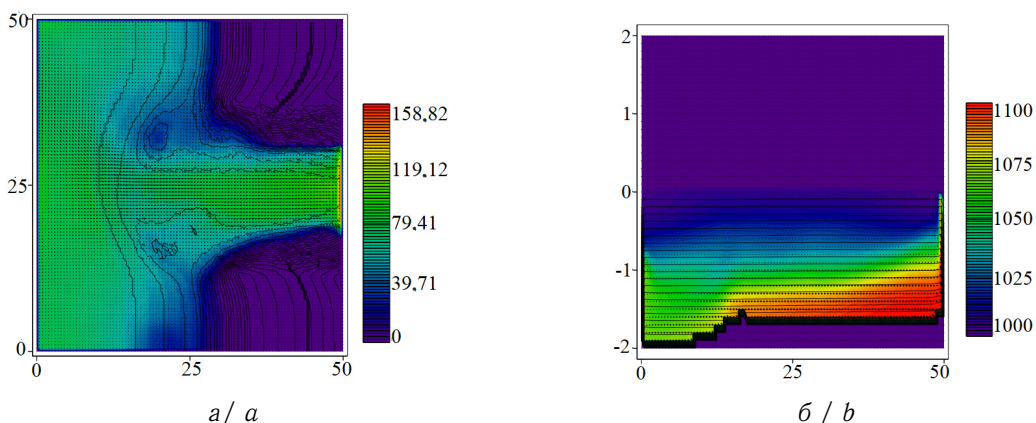


Рис. 7. Движение вод в устьевом районе при наличии существенного градиента плотности водной среды через 5 мин: *a* — концентрация взвеси в воде; *б* — поле плотности водной среды (цвет онлайн)

Fig. 7. Movement of water in the mouth area in the presence of a significant density gradient of the aquatic environment after 5 min: *a* — concentration of suspended matter in water; *b* — density field of the aquatic environment (color online)

Разработанный программный комплекс может применяться для расчета переноса как для тяжелых примесей, так и для примесей, которые легче воды. При выявлении зон экологического бедствия и риска использовались «Критерии оценки экологической обстановки территорий для выявления зон чрезвычайной экологической ситуации и зон экологического бедствия»¹, а также работы Г. Г. Винберга [23, 24]. Оценка экологического состояния проводилась по уровню антропогенной нагрузки в соответствии с Р 52.24.661-2004², оценивались доля и степень антропогенного воздействия по формулам

$$D = (N_1/N) \cdot 100\%, \quad C = (N_2/N_1) \cdot 100\%,$$

¹Руководящий документ РД 52.24.643-2002. Метод комплексной оценки степени загрязненности поверхностных вод по гидрохимическим показателям. Приложение Г. URL: <https://meganorm.ru/Data2/1/4293831/4293831806.htm#i238828> (дата обращения: 05.04.2023).

²Руководящий документ РД 52.24.661-2004. Оценка риска антропогенного воздействия приоритетных загрязняющих веществ на поверхностные воды суши. URL: <https://meganorm.ru/Data2/1/4293834/4293834036.pdf> (дата обращения: 05.04.2023).



где D , C — доля и степень антропогенного воздействия соответственно; N — общее число нормируемых приоритетных загрязняющих веществ; N_1 — число ингредиентов, превышающих предельно допустимую концентрацию; N_2 — число ингредиентов, превышающих 10 предельно допустимых концентраций. Оценка экологического состояния Азовского моря может проводиться также по системообразующим показателям на основе статистических характеристик вариационного ряда значений концентраций легкоокисляемых органических веществ (по биологическому потреблению кислорода БПК₅), соединений азота аммонийного и значений содержания растворенного в воде кислорода.

Для оценки качества морской воды использовались наиболее информативные комплексные показатели качества воды [25], включая удельный комбинаторный индекс загрязненности воды (УКИЗВ) и класс качества воды (ККВ).

Учет основных внешних факторов в моделях гидродинамики и биологической кинетики позволил воспроизвести положительный тренд солености в бассейне Азовского моря [26]. Выявлено, что на всей акватории отмечено формирование стратификации водных масс по содержанию кислорода во все сезоны года. В период роста солености и снижения среднегодового стока реки Дон в Таганрогском заливе отмечено снижение концентрации биогенных элементов, хотя при этом сохраняется высокая интенсивность продуктивности фитопланктона. Концентрации биогенных элементов в современный период осолонения в собственно море остаются на уровне среднегодовых значений, однако увеличение солености, приводящее к смене таксономических групп фитопланктона, снижает уровень первичного продуцирования органического вещества. Увеличение доли органической формы азота и фосфора в период осолонения в Таганрогском заливе связано с развитием первичной продукции фитопланктона, а в собственно море — с поступлением аллохтонного органического вещества с материковым стоком. В целом экологическое состояние Азовского моря улучшается, но улучшается по индексу ИЗВ, морская вода в последние годы относится к классу умеренно загрязненной.

Заключение

Для мониторинга и оценки рисков антропогенного воздействия на водные объекты необходима оценка качественного и количественного состава сбрасываемых загрязняющих веществ, а также прогнозирование неблагоприятных явлений, вызванных антропогенным воздействием [27]. Известно, что вдали от стока рек в водоем из атмосферы поступает более 60% загрязняющих веществ, оказывающих существенное влияние на процессы развития и гибели биоты. Вследствие увеличения антропогенной нагрузки на прибрежные системы возникает острая необходимость анализа и прогноза распространения загрязняющих веществ в акватории водоема [28].

Разработанный программный комплекс учитывает такие немаловажные для моделирования ситуации в водоеме параметры, как характеристики загрязнения вод по доле и степени антропогенного воздействия, фактор риска и др. Разработанный алгоритм позволяет моделировать динамику процессов распространения загрязняющих веществ, поступающих в Азовское море со стоками рек и из приземного слоя атмосферы, с учетом метеорологических условий, процессов взаимодействия и оседания загрязняющих примесей.

Программный комплекс позволяет моделировать условия развития экологической обстановки мелководного водоема в ускоренном масштабе времени для дальнейшего предотвращения негативных последствий, связанных с материальным ущербом и угрозой здоровью и жизни людей.

Список литературы

1. *Moriasi D. N., Wilson B. N., Douglas-Mankin K. R., Arnold J. G., Gowda P. H.* Hydrologic and water quality models: Use, calibration, and validation // Transactions of the ASABE. 2012. Vol. 55, iss. 4. P. 1241–1247. <http://dx.doi.org/10.13031/2013.42265>
2. *Bristeau M. O., Perthame B.* Transport of pollutant in shallow water using kinetic schemes // ESAIM Proceedings. 2001. Vol. 10. P. 9–21. <http://dx.doi.org/10.1051/proc:2001002>



3. *Hang Z.* Commentary on study of surface water quality model // *Journal of Water Resources and Architectural Engineering*. 2006. Vol. 4, iss. 4. P. 18–21.
4. *Burn D. H., McBean E. A.* Optimization modeling of water quality in an uncertain environment // *Water Resources Research*. 1985. Vol. 21, iss. 7. P. 934–940. <https://doi.org/10.1029/WR021i007p00934>
5. *Rinaldi S., Soncini-Sessa R.* Sensitivity analysis of generalized Streeter – Phelps models // *Advances in Water Resources*. 1978. Vol. 1, iss. 3. P. 141–146. [https://doi.org/10.1016/0309-1708\(78\)90024-6](https://doi.org/10.1016/0309-1708(78)90024-6)
6. *Dobbins W. E.* BOD and oxygen relationships in streams // *Journal of Sanitary Engineering Division*. 1964. Vol. 90, iss. 3. P. 53–78. <https://doi.org/10.1061/JSEDAI.0000495>
7. *Camp T. R.* *Water and Its Impurities*. New York : Van Nostrand Reinhold Inc., 1963. 368 p.
8. *Mujumdar P. P., Subbarao Vemula V. R.* Fuzzy waste load allocation model: Simulation-optimization approach // *Journal of Computing in Civil Engineering*. 2004. Vol. 18, iss. 2. P. 120–131. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0887-3801\(2004\)18:2\(120\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0887-3801(2004)18:2(120))
9. *Yih S.-M., Davidson B.* Identification in nonlinear, distributed parameter water quality models // *Water Resources Research*. 1975. Vol. 11, iss. 5. P. 693–704. <https://doi.org/10.1029/WR011i005p00693>
10. *Jirka G. H.* Large scale flow structures and mixing processes in shallow flows // *Journal of Hydraulic Research*. 2001. Vol. 39, iss. 6. P. 567–573. <https://doi.org/10.1080/00221686.2001.9628285>
11. *Murillo J., Burguete J., Bruñau P., Garcia-Navarro P.* Coupling between shallow water and solute flow equations: Analysis and management of source terms in 2D // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2005. Vol. 49, iss. 3. P. 267–299. <https://doi.org/10.1002/fld.992>
12. *Vasilachi I. C., Asimnicesei D. M., Fertu D. I., Gavrilescu M.* Occurrence and fate of emerging pollutants in water environment and options for their removal // *Water*. 2021. Vol. 13. Art. 181. <https://doi.org/10.3390/w13020181>
13. *Wang Q., Li S., Jia P., Qi C., Ding F.* A review of surface water quality models // *The Scientific World Journal*. 2013. Vol. 2013. Art. 231768. <https://doi.org/10.1155/2013/231768>
14. *Сидорякина В. В., Сухинов А. И.* Исследование корректности и численная реализация линеаризованной двумерной задачи транспорта наносов // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2017. Т. 57, № 6. С. 985–1002. <http://doi.org/10.7868/S0044466917060138>, EDN: YRWNQH
15. *Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Проценко Е. А., Сидорякина В. В., Проценко С. В.* Комплекс объединенных моделей транспорта наносов и взвесей с учетом трехмерных гидродинамических процессов в прибрежной зоне // *Математическое моделирование*. 2020. Т. 32, № 2. С. 3–23. <https://doi.org/10.20948/mm-2020-02-01>
16. *Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Проценко Е. А., Сидорякина В. В., Проценко С. В.* Параллельные алгоритмы решения задачи динамики изменения рельефа дна в прибрежных системах // *Вычислительные методы и программирование*. 2020. Т. 21, вып. 3. С. 196–206. <https://doi.org/10.26089/NumMet.v21r318>, EDN: UHVOOQ
17. *Четверушкин Б. Н.* Пределы детализации и формулировка моделей уравнений сплошных сред // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24, № 11. С. 33–52. EDN: RXPNZB
18. *Д’Асцензо Н., Савельев В. И., Четверушкин Б. Н.* Об одном алгоритме решения параболических и эллиптических уравнений // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2015. Т. 55, № 8. С. 1320–1328. <https://doi.org/10.7868/S0044466915080037>, EDN: UDEXPJ
19. *Четверушкин Б. Н., Д’Асцензо Н., Савельев А. В., Савельев В. И.* Кинетическая модель для магнитной газовой динамики // *Математическое моделирование*. 2017. Т. 29, № 3, С. 3–15. EDN: YIXTTB
20. *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*. 2015. Т. 16, вып. 3. С. 328–338. <https://doi.org/10.26089/NumMet.v16r332>, EDN: YTTYNN
21. *Sukhinov A., Chistyakov A., Sidoryakina V.* Investigation of nonlinear 2D bottom transportation dynamics in coastal zone on optimal curvilinear boundary adaptive grids // XIII International Scientific-Technical Conference “Dynamic of Technical Systems” (DTS-2017) (September 13–15, 2017). Rostov-on-Don : EDP Sciences, 2017. Art. 4003. <https://doi.org/10.1051/mateconf/201713204003>, EDN: ZWFGPV
22. *Ковтун И. И., Проценко Е. А., Сухинов А. И., Чистяков А. Е.* Расчет воздействия на водные биоресурсы дноуглубительных работ в Белом море // *Фундаментальная и прикладная гидрофизика*. 2016. Т. 9, № 2. С. 27–38. EDN: XENHWZ



23. Биологические процессы и самоочищение на загрязненном участке реки: (на примере верх. Днепра) / под ред. Г. Г. Винберга. Минск : Изд-во БГУ им. В. И. Ленина, 1973. 192 с.
24. Винберг Г. Г., Алимов А. Ф., Балушкина Е. В., Никулина В. Н., Финогенова Н. П., Цалолыхин С. Я. Опыт применения разных систем биологической индикации загрязнения вод // Научные основы контроля качества поверхностных вод по гидробиологическим показателям. Ленинград : Гидрометеиздат, 1977. С. 124–132.
25. Данилов-Данильян В. И., Готовцев А. В., Никаноров А. М. Проблемы мониторинга БПК // Водные ресурсы. 2012. Т. 39, № 5. С. 510–520. EDN: [PBWDDP](#)
26. Джамалов Р. Г., Мяжкова К. Г., Никаноров А. М., Решетняк О. С., Сафронова Т. И., Трофимчук М. М. Гидрохимический сток рек бассейна Оки // Вода и экология: проблемы и решения. 2017. № 4 (72). С. 26–39. <https://doi.org/10.23968/2305-3488.2017.22.4.26-39>, EDN: [YPORLZ](#)
27. Никаноров А. М., Брызгалов В. А., Решетняк О. С. Изменчивость экологического состояния речных зон устьевых экосистем крупных рек России // Вода: химия и экология. 2013. № 12. С. 15–21. EDN: [RPYDUF](#)
28. Матишов Г. Г., Степаньян О. В., Григоренко К. С., Харьковский В. М., Поважный В. В., Сойер В. Г. Особенности гидролого-гидрохимического режима Азовского и Черного морей в 2013 г. // Вестник Южного научного центра. 2015. Т. 11, № 2. С. 36–44. EDN: [UCBKRJ](#)

References

1. Moriasi D. N., Wilson B. N., Douglas-Mankin K. R., Arnold J. G., Gowda P. H. Hydrologic and water quality models: Use, calibration, and validation. *Transactions of the ASABE*, 2012, vol. 55, iss. 4, pp. 1241–1247. <http://dx.doi.org/10.13031/2013.42265>
2. Bristeau M. O., Perthame B. Transport of pollutant in shallow water using kinetic schemes. *ESAIM Proceedings*, 2001, vol. 10, pp. 9–21. <http://dx.doi.org/10.1051/proc:2001002>
3. Hang Z. Commentary on study of surface water quality model. *Journal of Water Resources and Architectural Engineering*, 2006, vol. 4, iss. 4, pp. 18–21.
4. Burn D. H., McBean E. A. Optimization modeling of water quality in an uncertain environment. *Water Resources Research*, 1985, vol. 21, iss. 7, pp. 934–940. <https://doi.org/10.1029/WR021i007p00934>
5. Rinaldi S., Soncini-Sessa R. Sensitivity analysis of generalized Streeter – Phelps models. *Advances in Water Resources*, 1978, vol. 1, iss. 3, pp. 141–146. [https://doi.org/10.1016/0309-1708\(78\)90024-6](https://doi.org/10.1016/0309-1708(78)90024-6)
6. Dobbins W. E. BOD and oxygen relationships in streams. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, 1964, vol. 90, iss. 3, pp. 53–78. <https://doi.org/10.1061/JSEDAI.0000495>
7. Camp T. R. *Water and Its Impurities*. New York, Van Nostrand Reinhold Inc., 1963. 368 p.
8. Mujumdar P. P., Subbarao Vemula V. R. Fuzzy waste load allocation model: Simulation-optimization approach. *Journal of Computing in Civil Engineering*, 2004, vol. 18, iss. 2, pp. 120–131. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0887-3801\(2004\)18:2\(120\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0887-3801(2004)18:2(120))
9. Yih S.-M., Davidson B. Identification in nonlinear, distributed parameter water quality models. *Water Resources Research*, 1975, vol. 11, iss. 5, pp. 693–704. <https://doi.org/10.1029/WR011i005p00693>
10. Jirka G. H. Large scale flow structures and mixing processes in shallow flows. *Journal of Hydraulic Research*, 2001, vol. 39, iss. 6, pp. 567–573. <https://doi.org/10.1080/00221686.2001.9628285>
11. Murillo J., Burguete J., Brufau P., Garcia-Navarro P. Coupling between shallow water and solute flow equations: Analysis and management of source terms in 2D. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2005, vol. 49, iss. 3, pp. 267–299. <https://doi.org/10.1002/fld.992>
12. Vasilachi I. C., Asiminicesei D. M., Fertu D. I., Gavrilesco M. Occurrence and fate of emerging pollutants in water environment and options for their removal. *Water*, 2021, vol. 13, art. 181. <https://doi.org/10.3390/w13020181>
13. Wang Q., Li S., Jia P., Qi C., Ding F. A review of surface water quality models. *The Scientific World Journal*, 2013, vol. 2013, art. 231768. <https://doi.org/10.1155/2013/231768>
14. 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, iss. 6, pp. 978–994. <https://doi.org/10.1134/S0965542517060124>, EDN: [ZBVIXB](#)
15. Sukhinov A. I., Chistyakov A. E., Protsenko E. A., Sidoryakina V. V., Protsenko S. V. Set of coupled transport models of suspended matter, taking into account three-dimensional hydrodynamic processes in the coastal zone. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2020, vol. 12, iss. 5, pp. 757–769. <https://doi.org/10.1134/S207004822005018X>



16. Sukhinov A. I., Chistyakov A. E., Protsenko E. A., Sidoryakina V. V., Protsenko S. V. Parallel algorithms for solving the problem of coastal bottom relief dynamics. *Numerical Methods and Programming*, 2020, vol. 21, iss. 3, pp. 196–206 (in Russian). <https://doi.org/10.26089/NumMet.v21r318>, EDN: UHVOOQ
17. Chetverushkin B. N. Resolution limits of continuous media models and their mathematical formulations. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2013, vol. 5, iss. 3, pp. 266–279. <https://doi.org/10.1134/S2070048213030034>
18. D’Ascenzo N., Saveliev V. I., Chetverushkin B. N. On an algorithm for solving parabolic and elliptic equations. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2015, vol. 55, iss. 8, pp. 1290–1297. <https://doi.org/10.1134/S0965542515080035>
19. Chetverushkin B. N., D’Ascenzo N., Saveliev A. V., Saveliev V. I. A kinetic model for magnetogas-dynamics. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2017, vol. 9, iss. 5, pp. 544–553. <https://doi.org/10.1134/S2070048217050039>
20. Sukhinov A. I., Protsenko E. A., Chistyakov A. E., Shreter S. A. Comparison of computational efficiency of explicit and implicit schemes for the sediment transport problem in coastal zones. *Vychislitel’nye metody i programmirovaniye* [Numerical Methods and Programming], 2015, vol. 16, iss. 3, pp. 328–338 (in Russian). <https://doi.org/10.26089/NumMet.v16r332>, EDN: YTTYNN
21. Sukhinov A., Chistyakov A., Sidoryakina V. Investigation of nonlinear 2D bottom transportation dynamics in coastal zone on optimal curvilinear boundary adaptive grids. *XIII International Scientific-Technical Conference “Dynamic of Technical Systems” (DTS-2017) (September 13–15, 2017)*. Rostov-on-Don, EDP Sciences, 2017, art. 4003. <https://doi.org/10.1051/mateconf/201713204003>, EDN: ZWFGPV
22. Kovtun I. I., Protsenko E. A., Sukhinov A. I., Chistyakov A. E. Calculating the impact on aquatic resources dredging in the White Sea. *Fundamentalnaya i prikladnaya gidrofizika* [Fundamental and Applied Hydrophysics], 2016, vol. 9, iss. 2, pp. 27–38 (in Russian). EDN: XENHWZ
23. *Biologicheskkiye protsessy i samoochishcheniye na zagryaznennom uchastke reki: (na primere verkh. Dnepra)* [Vinberg G. G. (ed.) Biological Processes and Self-purification in a Polluted River Section: The Example of the Upper Dnieper]. Minsk, Belarusian University Publ., 1973. 192 p. (in Russian).
24. Vinberg G. G., Alimov A. F., Balushkina E. V., Nikulina V. N., Finogenova N. P., Tsalolikhin S. Ya. Experience in using different systems for biological indication of water pollution. In: *Nauchnyye osnovy kontrolya kachestva poverkhnostnykh vod po gidrobiologicheskim pokazatelyam* [Scientific Basis for Monitoring the Quality of Surface Waters Based on Hydrobiological Indicators]. Leningrad, Gidrometeoizdat, 1977, pp. 124–132 (in Russian).
25. Danilov-Danilyan V. I., Gotovtsev A. V., Nikanorov A. M. BOD monitoring problems. *Water Resources*, 2012, vol. 39, iss. 5, pp. 546–555. <https://doi.org/10.1134/S0097807812040069>, EDN: RGHYKF
26. Dzhamaalov R. G., Myagkova K. G., Nikanorov A. M., Reshetnyak O. S., Safronova T. I., Trofimchuk M. M. Hydrochemical runoff of rivers in the Oka basin. *Voda i ekologiya: problemy i resheniya* [Water and Ecology: Problems and Solutions], 2017, iss. 4 (72), pp. 26–39 (in Russian). <https://doi.org/10.23968/2305-3488.2017.22.4.26-39>, EDN: YPORLZ
27. Nikanorov A. M., Bryzgalo V. A., Reshetnyak O. S. Variability of the ecological state of river zones of estuarine ecosystems of large Russian rivers. *Voda: khimiya i ekologiya* [Water: Chemistry and Ecology], 2013, iss. 12, pp. 15–21 (in Russian). EDN: RPYDUF
28. Matishov G. G., Stepanyan O. V., Grigorenko K. S., Kharkovsky V. M., Povazhny V. V., Soyer V. G. Specific features of hydrological and hydrochemical conditions of the Sea of Azov and the Black Sea in 2013. *Bulletin of the Southern Scientific Center*, 2015, vol. 11, iss. 2. P. 36–44 (in Russian). EDN: UCBKRJ

Поступила в редакцию / Received 11.05.2023

Принята к публикации / Accepted 11.07.2023

Опубликована / Published 31.05.2024