

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАТЕМАТИЧНИХ МАШИН І СИСТЕМ**

СОРОКІН МАКСИМ ВІКТОРОВИЧ



УДК 004.272.2:504.45:504.4.054

**ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ПАРАЛЕЛЬНИХ ОБЧИСЛЕНЬ НАСЛІДКІВ
ТЕХНОГЕННИХ ВПЛИВІВ НА СТАН РІЧОК І ПРИБЕРЕЖНОЇ ЗОНИ МОРЯ
НА ОСНОВІ ДВОВИМІРНИХ РІВНЯНЬ**

05.13.06 – інформаційні технології

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук

Київ — 2025

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Інституті проблем математичних машин і систем НАН України

Науковий керівник кандидат фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Железняк Марк Йосипович,
запрошений професор Інституту радіоактивності довкілля,
Університет Фукусіми, Японія

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Калюх Юрій Іванович,
Інститут телекомунікацій і глобального інформаційного
простору Національної академії наук України, головний
науковий співробітник відділу природних ресурсів

кандидат технічних наук
Рагозін Дмитро Васильович,
Інститут програмних систем Національної академії наук
України, старший науковий співробітник науково-
дослідного відділу теорії комп'ютерних обчислень

Захист відбудеться “ 15 ” грудня 2025 року о 13.00 годині на засіданні спеціалізованої
вченої ради Д 26.204.01 в Інституті проблем математичних машин і систем НАН
України за адресою: 03187, Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 42.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту проблем математичних
машин і систем НАН України за адресою: 03187, Київ-187, проспект Академіка
Глушкова, 42.

Автореферат розісланий “ 12 ” листопада 2025 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради



М.Г. Ієвлєв

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Річки та прибережні зони морів відіграють ключову роль у життєдіяльності людини. Важливе значення має оцінка техногенних впливів на такі водні системи. В умовах російського вторгнення актуальним є також аналіз впливу бойових дій на стан поверхневих вод.

Математичні моделі, побудовані на двовимірних рівняннях у частинних похідних, є одним з основних інструментів дослідження та прогнозування стану річок та прибережної зони моря. Вони забезпечують вищу деталізацію та точність порівняно з одновимірними і боксовими підходами, перевершуючи тривимірні моделі за швидкістю прогнозу й не поступаючись їм у точності в межах свого науково обґрунтованого використання. Створення сучасних інформаційних технологій для таких систем потребує вирішення двох важливих науково-практичних задач.

Перша – це прискорення розрахунків, зокрема за рахунок використання паралельних обчислень на сучасних гетерогенних обчислювальних системах, які поєднують розподілені обчислювальні вузли, багатоядерні центральні процесори (CPU) зі спільною пам'яттю та графічні процесори (GPU). Таке прискорення забезпечує не лише підвищення оперативності моделювання, а й збільшення точності завдяки можливості збільшення деталізації. Обидва ефекти мають значення як для економічної ефективності, так і для підвищення безпеки у критичних застосуваннях.

Друга – це створення інформаційно-моделюючих систем, що поєднують математичні моделі різних фізичних процесів у водних середовищах, для розв'язання комплексних завдань хвилювання, течій, перенесення наносів і переформування дна та динаміки забруднюючих речовин у річках і морях, а також забезпечення їх інтеграції у системи підтримки прийняття рішень (СППР) під час надзвичайних ситуацій природного або техногенного характеру.

Значний внесок у розвиток методів паралельних обчислень для моделей, що засновані на рівняннях у частинних похідних зробили такі зарубіжні та українські вчені: Dongarra J., Robey R., Williams S., Kumar, V., Saad Y., Молчанов І.М., Хіміч О.М., Попов О.В., Сергієнко І. В., Головинський А.Л., Дорошенко А.Ю., Рагозін Д.В. та інші. Створенням, розвитком і застосуванням математичних моделей стану річок і морів у світі займалися: Kirby J.T., Dalrymple R.A., Zijlema M., Berkhoff J.C.W., Wu W. та багато інших. В Україні цьому присвятили свої зусилля для моделювання і розробки інформаційних систем річкового стоку: Овчарук В.А., Лобода Н.С., Сніжко С.І., Дідовець Ю.С., Осадчий В.І., Осипов В.В., Мокін В. Б., Крижанівський Є.М.; хвильових полів і динамічних процесів прибережної зони моря – Каліон В.А., Трофимчук О.М., Калюх Ю.І., Лебідь О.Г., Яковлев В.В., Воскобійник В.А., Островерх Б.М., Щипцов О.А., Шундель О.І., Осипов В.В., Тучковенко Ю.С., Кушнір Д.В. та інші. Істотний внесок у розвиток моделей річок і моря зробили, починаючи з 1986 р., дослідники Інституту проблем математичних машин і систем НАН України (ІПММС): Железняк М.Й., Ківва С.Л., Мадерич В.С., Бровченко І.О., Беженар Р.В. та інші. Зокрема в ІПММС, розвивалась система двовимірних моделей прогнозування течій, переформування дна і розповсюдження радіонуклідів COASTOX, доповнена пізніше моделлю трансформації хвиль та інтегрована у систему підтримки прийняття рішень (СППР) для реагування на ядерні аварії RODOS.

Актуальною задачею дисертаційного дослідження стала розробка технології паралельних обчислень для прискорення цих моделей на сучасних гетерогенних комп'ютерах з розподіленими вузлами, багатоядерними CPU та GPU та створення нової інформаційно-моделюючої системи паралельних моделей COASTOX-PRL, а також інтеграція її до СППР.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дослідження виконано у відділі математичного моделювання морських і річкових систем Інституту проблем математичних машин і систем НАН України в рамках таких основних наукових проєктів: Проєкт Національного фонду досліджень України (НФДУ) № 2020.01/0421 “Прогнозування небезпечних впливів радіоактивно забруднених поверхневих вод і затоплення берегів: розвиток моделей та їхнє впровадження для зменшення наслідків надзвичайних ситуацій у м. Києві, спричинених водами р. Дніпро”. 2020.01-0421 (№ держ. реєстрації 0120U104386, 2020–2021 рр.); Проєкт 7-ї Рамкової програми НДР ЄС з розробки європейської системи підтримки прийняття рішень при радіаційних аваріях РОДОС – PREPARE (2013–2016 рр.) “Innovative integrated tools and platforms for radiological emergency preparedness and post-accident response in Europe” (підтверджено публікацією в журналі, індексованому в базі Scopus); Проєкт японсько-українського науково-технічного співробітництва «Покращання радіаційного контролю навколишнього середовища та законодавчої бази в Україні для екологічної реабілітації радіоактивно забруднених територій» японської державної програми SATREPS Японського агентства міжнародного співробітництва (JICA) і Японського науково-технічного агентства (JST) (2017–2023 рр.), реєстраційна картка проєкту в Кабінеті Міністрів України № 3726-02; Держбюджетна тема НАН України “Розробка комплексу математичних моделей для гідрометеорологічних досліджень та інформаційних систем аналізу і прогнозування навколишнього середовища в умовах змін клімату” (шифр “ГІДРОМЕТЕО”, № держ. реєстрації 0119U001433, 2019–2023 рр.); “Кількісні і якісні аспекти управління водними ресурсами України в умовах регіональних кліматичних змін: каскади водосховищ, прибережна зона в гирлах великих річок” (шифр “Середовище”, № держ. реєстрації 0110U004524; 0112U004053; 0113U001720, 2011–2014 рр.).

Мета і завдання дослідження. *Мета роботи* – розробка інформаційних технологій паралельних обчислень двовимірних рівнянь у частинних похідних для підвищення точності і прискорення розрахунків у моделюючих системах стану річок і прибережної зони моря для оцінки наслідків техногенних впливів.

Для досягнення мети дослідження необхідно вирішити такі *завдання*:

- проаналізувати сучасні інформаційні технології паралельних обчислень двовимірних рівнянь стану річок і прибережної зони моря, а також технології створення інформаційно-моделюючих систем;
- розробити інформаційні технології паралельних обчислень двовимірних рівнянь для сучасних гібридних обчислювальних систем;
- розробити технології інтеграції паралельних математичних моделей в нову інформаційно-моделюючу систему COASTOX- PRL для CPU і GPU;
- застосувати розроблені інформаційні технології для розв'язання практичних задач з оцінки наслідків техногенних впливів, у тому числі бойових дій, на стан водних об'єктів;

– зробити кількісну оцінку прискорення розроблених інформаційно-моделюючих систем на сучасних гібридних архітектурах із центральними та графічними процесорами.

Об'єкт дослідження – процес створення і застосування інформаційних технологій моделювання стану поверхневих вод.

Предмет дослідження – інформаційні технології паралельних обчислень двовимірних рівнянь стану річок і прибережної зони моря, технології інтеграції паралельних моделей у інформаційні системи.

Методами дослідження роботи є чисельні методи розв'язання рівнянь математичної фізики, методи та засоби паралельних обчислень і програмування, технології проектування інформаційних систем, геоінформаційні технології.

Наукова новизна отриманих результатів

1. Створено *нову* інформаційно-моделюючу систему COASTOX-PRL на основі програмної інтеграції паралельних двовимірних математичних моделей динаміки вод і забруднень у річках і прибережній зоні моря.

2. Для математичних моделей інформаційної системи COASTOX-PRL створено *нові* інформаційні технології паралельних обчислень для гібридних архітектур із CPU та GPU: моделі лінійної трансформації хвиль H/WAVE (CPU, розподілена пам'ять); моделі двовимірної гідродинаміки мілкої води на прямокутних сітках ShipSim, адаптованої до прогнозу корабельних хвиль та розрахунку навантажень (CPU і GPU, спільна пам'ять); моделі двовимірної гідродинаміки, переносу наносів, переформування дна та динаміки забруднень на неструктурованих сітках COASTOX-HD-SED-RN (CPU і GPU, розподілена і спільна пам'ять).

3. *Удосконалено* чисельну схему розв'язку рівнянь переносу у моделі на неструктурованих сітках COASTOX-HD-SED-RN для підвищення точності моделювання процесів із різкими градієнтами концентрації.

4. *Вперше* створено інформаційну технологію паралельних обчислень для CPU-систем з розподіленою пам'яттю для лагранжевої моделі двовимірної гідродинаміки згладжених частинок SPH2d.

5. *Удосконалено* програмні інтерфейси та специфікації для інтеграції паралельних модулів системи COASTOX-PRL до сучасних Java-СППР JRODOS та HYDROS.

6. Отримано *нові* наукові результати з деталізованого чисельного аналізу на розрахункових сітках великої розмірності техногенних впливів, у тому числі зумовлених військовими діями, у басейні р. Дніпро, зокрема при руйнуванні Каховської ГЕС і Козаровицької дамби біля с. Демидів.

Практичне значення отриманих результатів полягає у створенні ефективних інформаційних технологій паралельних обчислень на CPU і GPU для двовимірних математичних моделей стану річок і прибережної зони моря, інтегрованих у сучасну моделюючу систему COASTOX-PRL. Це забезпечило суттєве прискорення розрахунків і дало можливість у комплексних задачах оцінки наслідків техногенних впливів підвищувати деталізацію моделювання, збільшувати кількість варіантів прогнозу та оперативність отримання результатів.

Найбільшу практичну цінність мають такі одержані завдяки цьому результати:

1. Розроблено та верифіковано інформаційні системи двовимірного

прогнозування зон і глибин затоплення: для басейнів річок Прут і Сірет під час раптових дощових паводків, а також для берегів м. Києва під час високих водопіль на Дніпрі. Системи інтегровано в програмну оболонку HYDROS.

2. Розроблено інформаційні системи паралельних високодеталізованих обчислень наслідків руйнування гідровузлів Дніпровського каскаду ГЕС. Прогнозовано зони затоплення для різних сценаріїв прориву, у тому числі внаслідок бойових дій, Козаровицької дамби, Київської, Каховської та Дніпровської ГЕС. Для Каховської ГЕС підтверджено швидке формування початкового прорану з подальшим його збільшенням у ширину та глибину внаслідок розмиву ґрунтів.

3. Розроблено інформаційну систему GPU-обчислень гідрологічного режиму Кілійської дельти Дунаю. Розрахунки показали, що проєктована реконструкція ГСХ Дунай–Чорне море з двома огорожувальними дамбами матиме незначний вплив на рівень води та розподіл витрат у рукавах дельти.

4. Розроблено інформаційну систему паралельних обчислень нахату цунамі на узбережжя префектур Міягі та Фукусіма під час землетрусу 2011 року в Японії.

5. Розроблено систему паралельного моделювання проникнення нерегулярних хвиль у портові акваторії із дослідженням резонансів.

6. Розроблено систему паралельних обчислень нахату хвиль та розрахунку хвильових навантажень на берегові споруди.

7. Розроблено систему GPU-обчислень двовимірної гідродинаміки корабельних хвиль та розрахунку навантажень на пришвартовані судна, яку використано для поєднаних водойм – річці San Jacinto та акваторії терміналу Barbours Cut Terminal (США).

8. Розроблено інформаційну систему паралельних обчислень переформування дна у прибережній зоні Чорного моря для оцінки впливу кліматичних змін на розмив узбережжя м. Євпаторія. Показано, що у XXI столітті розподіл зон ерозії та акумуляції істотно не зміниться, а прогнозоване посилення інтенсивності процесів перебуває в межах невизначеності сценарного моделювання кліматичних змін.

9. Розроблено інформаційну систему прогнозування розповсюдження радіонуклідів ^{90}Sr у Київському водосховищі. Результати моделювання сценарію весняної повені 1999 р. добре збіглися з даними спостережень та продемонстрували значну буферну здатність водосховища, що послаблює пікові концентрації радіонуклідів і зменшує ризики для здоров'я населення нижче за течією.

10. Розроблено інформаційну систему паралельних обчислень розповсюдження органічного забруднення у Дніпрі в районі м. Києва при надходженні його з р. Десна. Оцінено ефективність попусків води з Київської ГЕС як засобу зниження концентрації забруднювача та прискорення його виносу за межі міста.

Особистий внесок здобувача. Основні результати дисертації, зокрема інформаційні технології створення системи паралельних обчислень COASTOX-PRL, отримані автором самостійно. Наукові праці [4, 9, 14, 26, 27] виконані одноосібно. У роботах, підготовлених у співавторстві, автору належать такі результати: [1–3, 5–8, 10–13, 15–25, 28–31] – аналіз існуючих підходів і розробка власних інформаційних технологій паралельних обчислень двовимірних рівнянь стану річок і прибережної зони моря, розробка інформаційно-моделюючих систем; [1–3, 5–7, 11, 13, 15–19, 23–25, 28, 30] – збір і підготовка даних, побудова моделей водних об'єктів, налаштування

та верифікація, проведення сценарних розрахунків, обробка й аналіз результатів, у тому числі із застосуванням геоінформаційних технологій; [4, 7, 8, 11, 13, 15, 16, 18–20, 22] – розробка інформаційних технологій для інтеграції паралельних модулів моделюючої системи до Java-СППР.

Апробація результатів дисертації. Основні результати роботи представлялися і обговорювалися на міжнародних та українських наукових асамблеях, конференціях та конгресах: Генеральних асамблеях Європейського союзу геологічних наук EGU (Відень, Австрія, 2014, 2015, 2018 pp., Online – 2020, 2021 pp.); Осінній конференції Американського геофізичного союзу AGU (Сан-Франциско, США, 2019 p.); Міжнародному конгресі з екологічного моделювання та програмного забезпечення iEMSs 2018 (Форт-Коллінс, США, 2018 p.); Міжнародної науково-практичної конференції «ВОДА ДЛЯ МИРУ» (Київ, 2024 p.); Міжнародній науково-практичній конференції “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС” (Київ, Чернігів, Жукин, 2009, 2010, 2011, 2013, 2016, 2018, 2020 pp.); Міжнародній науковій конференції “Моделирование-2012” (Київ, 2012 p.).

Публікації. Основні результати дисертаційної роботи опубліковано у 31 праці. Серед них 8 статей у наукових журналах, які включені до наукометричних баз даних. 6 статей у профільних наукових журналах, які входять до переліку ДАК України як фахові (у тому числі 1 одноосібна). 2 статті у закордонних профільних виданнях, проіндексовані у базі Scopus. 21 публікація у збірниках матеріалів наукових конференцій. 2 публікації у “Повідомленнях НАН України” на сайті НАН України.

Структура й обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, 5 розділів, висновків, списку використаних джерел з 252 найменувань та 7 додатків. Загальний обсяг дисертації складає 238 сторінок, із яких 167 сторінок основного тексту та 44 сторінки додатків. Дисертація містить 87 рисунків та 22 таблиці.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність, сформульовано мету і завдання, а також методи дисертаційного дослідження. Викладено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів. Наведено особистий внесок здобувача, публікації та апробація результатів дисертації, а також зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами ППММС НАН України. Подано структуру й обсяг дисертації.

У **першому розділі** проведено аналіз області дослідження динаміки річкових і морських систем на основі двовимірних рівнянь математичної фізики, зокрема рівнянь у частинних похідних. Розглянуто основні підходи та програмні технології паралелізації алгоритмів розв'язання таких рівнянь. Для систем з центральними процесорами (CPU) і розподіленою пам'яттю це паралелізація на основі процесів із декомпозицією області задачі за процесами, введенням halo-структур уздовж границь підобластей та оновленням значень у halo на основі технології передачі повідомлень MPI. Відмічено, що хоча MPI підтримує CPU-системи зі спільною пам'яттю (обмінами через пам'ять), основна технологія паралелізації таких систем, а також графічних процесорів (GPU) – це потокова обробка. Описані ефективні засоби її швидкої імплементації у програмний код – директиви OpenMP, OpenACC. Для паралелізації фрагменти коду, зокрема цикли по елементах розрахункових сіток,

оформлюються відповідними директивами. Відмічено, що для сучасних гетерогенних архітектур, що містять розподілені обчислювальні вузли зі спільною пам'яттю, CPU та GPU, актуальним є гібридний підхід, що поєднує MPI-процеси і директиви.

Проаналізовано сучасний стан досліджень гідродинаміки річкових і морських систем на основі двовимірних рівнянь, зокрема рівняння пологих схилів (РПС) для опису трансформації хвиль в прибережній зоні моря та рівнянь мілкої води (РМВ) для моделювання течій різної природи в річках і морях. Описано використання моделей на основі РМВ для прогнозування динаміки корабельних хвиль. Зроблено огляд розробки й використання у світовій практиці та в Україні інформаційно-моделюючих систем для розв'язання комплексних задач хвилювання, течій, транспорту наносів, переформування дна і динаміки забруднень. Обґрунтовано актуальність перетворення розробленої в ІПММС системи моделей COASTOX, що поєднує хвильові моделі, моделі течій, транспорту наносів і забруднень (радіонуклідів), на паралельну систему COASTOX-PRL із застосуванням гібридного підходу для обчислювальних систем із CPU та GPU.

У **другому розділі** розроблено таку технологію для паралелізації чисельних алгоритмів моделей, що входять до складу COASTOX-PRL. Для CPU розпаралелення здійснено через декомпозицію області між MPI-процесами, введення halo-структур та організацію MPI-обмінів з урахуванням топології сіток та шаблонів чисельних схем. Для CPU зі спільною пам'яттю та GPU паралелізацію реалізовано шляхом оформлення циклів програмного Fortran-коду моделей директивами OpenACC відповідно до уніфікованого стилю.

Хвильова модель системи – HWAVE заснована на розв'язку РПС у гіперболічній, часово-залежній формі для хвильового потенціалу $\varphi(x, y, t)$. Вона описує розповсюдження, відбиття від перешкод, дифракцію та рефракцію монохроматичних хвиль на течіях та неоднорідностях дна прибережної зони моря.

Використовуючи підхід Copeland з введенням вектора потоків $\vec{Q} = (Q_x, Q_y)$, РПС зводиться в моделі до системи рівнянь першого порядку з додатковим урахуванням дисипації енергії, обумовленої донним тертям та обваленням хвиль. За розрахованими величинами φ і \vec{Q} модель обчислює висоту хвиль H , напрямок θ , компоненти хвильового дотичного напруження на поверхні води: τ_x^s, τ_y^s .

Рівняння моделі дискретизуються на прямокутних розрахункових сітках. Після задання рельєфу на початковій сітці, для реалізації граничних умов у моделі автоматично створюється друга сітка, повернена так, щоб вісь y була паралельна вхідному хвильовому фронту. Значення рельєфу у вузлах повернутої сітки визначаються інтерполяцією та екстраполяцією з початкової.

Для зручності апроксимації система рівнянь моделі подається у матричному вигляді для вектора стану $\mathbf{W} = [Q_x, Q_y, \varphi]^T$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{W} + \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{W} + \mathbf{B} \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{W} = \mathbf{S}, \quad (1)$$

де \mathbf{A} і \mathbf{B} матриці коефіцієнтів, що виражаються через глибину води h , частоту ω і напрямок хвилі θ , фазову c і групову c_g швидкості, хвильовий вектор \vec{k} , горизонтальні

компоненти швидкості течії u, v ; \mathbf{S} – вектор вільних членів дисипації енергії.

Система (1) розв’язується методом розбиття за напрямками: спочатку розв’язується X -частина системи – 1-й та 2-й доданки у (1). Далі, використовуючи отримані значення – Y -частина – 1-й та 3-й доданки у (1). Наприкінці додається вклад вільного члена. На кроках за напрямком системи рівнянь зводяться до канонічного виду, відповідно до якого матриці рівнянь є діагональними, а рівняння для канонічних змінних незалежними. Рівняння дискретизуються методом скінчених різниць. Для просторових похідних застосовується протипотоково-зміщена (upwind-biased) схема 4-го порядку. Для похідної за часом – метод Ейлера з різницею вперед із додаванням антидифузійного члена 4-го порядку, що підвищує порядок апроксимації за часом до 2-го. У чисельній формі для окремого вузла i розрахункової сітки це записується так:

$$\frac{\hat{\phi}_i - \phi_i}{\Delta t} + \left[v \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_i - \frac{v_i^2 \Delta t}{2} \cdot \frac{-\phi_{i-2} + 16\phi_{i-1} - 30\phi_i + 16\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{12\Delta x^2} = 0, \quad (2)$$

$$\left[v \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_i = \frac{v_i}{\Delta x} \sum_{m=-3}^2 a_m^{(\epsilon)} \phi_{i+\sigma \cdot m}, \quad \epsilon = \text{sign}(v_i), \quad a_m^{(-)} = -a_m^{(+)},$$

$$a_m^{(+)} = (-0.055453, 0.360600, -1.221201, 0.554534, 0.389400, -0.027880).$$

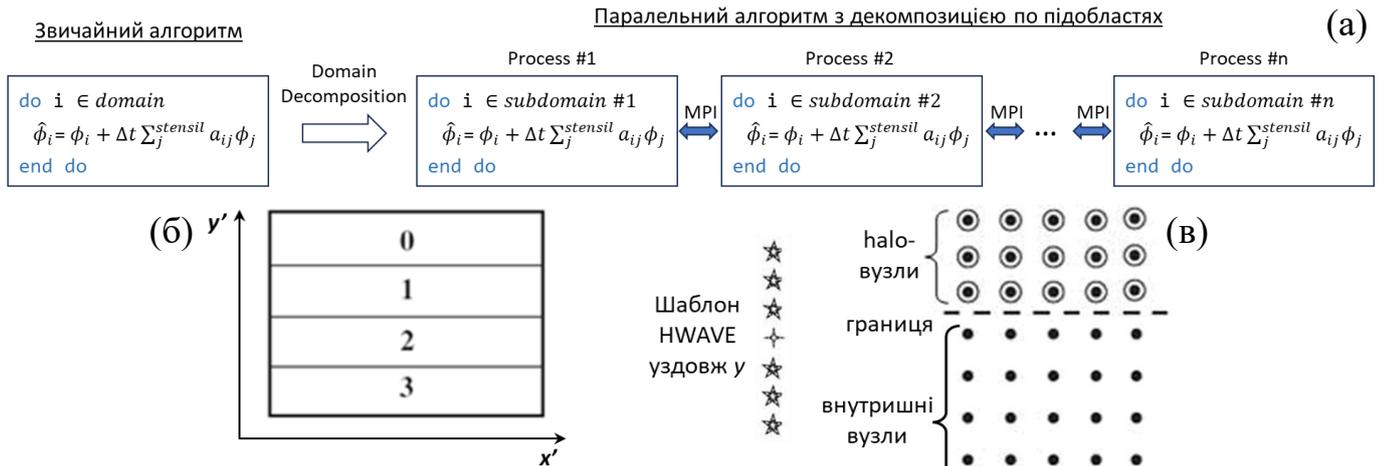


Рисунок 1 – а) схема паралелізації алгоритму на основі декомпозиції і процесів; б) декомпозиція області HWAVE; в) структура halo-вузлів

Для всіх моделей системи після просторової і часової дискретизації обчислення значень змінних у структурних елементах розрахункових сіток набуває вигляду близького до (2). Нові значення змінних на поточному кроці $\hat{\phi}_i$ виражаються через значення у вузлах на попередньому кроці: в тому самому вузлі ϕ_i і в сусідніх вузлах $\phi_{i \neq j}$, що визначаються шаблоном алгоритму. Алгоритм проходить цикл на поточному кроці (do ... end do) обчислюючи змінні ($\hat{\phi}_i$) у всіх вузлах сітки. Потім переходить до наступного і крокує часовими ітераціями до завершення інтегрування за часом. Відповідно до паралелізації на основі декомпозиції області кожен процес обчислює змінні у циклах на своїй підобласті (subdomain) (рис. 1а).

Для HWAVE повернута область ділиться уздовж напрямку Y на підобласті у вигляді стрічок однакової ширини (рис. 1б). Для забезпечення обчислень уздовж границь відповідно до 7-точкового шаблону просторової похідної (2) вводяться 3 ряди додаткових halo-вузлів (рис. 1б). Оновлення значень змінних у halo-вузлах

виконується один раз на поточному часовому кроці після виконання півкроків за обома напрямками. Для відправки-прийому даних використовуються буферні масиви. Дані пересилаються викликом неблокованих функцій відправки та отримання повідомлень MPI_Isend(...), MPI_Irecv(...) спільно із функцією завершення операцій – MPI_Waitall(...). Часові кроки спочатку розраховуються по підобластях за умовою Куранта після чого обирається мінімальне значення за допомогою глобальної редукованої функції MPI_Allreduce(...). Вивід даних здійснюється master-процесом із рангом «0». Для цього інші процеси відправляють йому значення у вузлах своєї підобласті. Це також реалізовано функціями MPI_Isend(...), MPI_Irecv(...).

Моделі динаміки корабельних хвиль ShipSim і модель пов'язаних процесів гідродинаміки, транспорту наносів і забруднень (радіонуклідів) COASTOX-HD-SED-RN використовують для опису гідродинаміки РМВ:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \vec{\mathbf{F}} = \mathbf{S} + \nabla \vec{\mathbf{F}}^d, \quad (3)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} h \\ q_x \\ q_y \end{bmatrix}, \mathbf{E} = \begin{bmatrix} uh \\ uq_x \\ uq_y \end{bmatrix}, \mathbf{G} = \begin{bmatrix} vh \\ vq_x \\ vq_y \end{bmatrix}, \mathbf{E}^d = \begin{bmatrix} 0 \\ D_x \frac{\partial q_x}{\partial x} \\ D_x \frac{\partial q_y}{\partial x} \end{bmatrix}, \mathbf{G}^d = \begin{bmatrix} 0 \\ D_y \frac{\partial q_x}{\partial y} \\ D_y \frac{\partial q_y}{\partial y} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ -gh \frac{\partial}{\partial x} (h + \eta) + gh \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{\rho} (\tau_x^\xi + \tau_x^S - \tau_x^\eta) + fq_y - \frac{h}{\rho} \frac{\partial P_a}{\partial x} \\ -gh \frac{\partial}{\partial y} (h + \eta) + gh \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{1}{\rho} (\tau_y^\xi + \tau_y^S - \tau_y^\eta) - fq_x - \frac{h}{\rho} \frac{\partial P_a}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

η, ξ – рівні дна і вільної поверхні води; $q_x = uh, q_y = vh$ – компоненти витрати води через одиничну ширину; $\partial \eta / \partial x, \partial \eta / \partial y$ – похили дна в x та y напрямках; ψ – припливоутворюючий потенціал; τ_x^η, τ_y^η – дотичні напруження на дні; τ_x^ξ, τ_y^ξ – вітрові дотичні напруження на поверхні води; f – параметр Коріоліса; P_a – атмосферний тиск на вільній поверхні, D_x, D_y – компоненти коефіцієнту турбулентної в'язкості.

Модель корабельних хвиль також додатково вводить у рівняння вільний член неоднорідності тиску $P = \rho g d$, викликаній осадкою судна $d = d(x, y, t)$, та розраховує навантаження на пришвартовані судна або берегові споруди інтегруванням елементарних сил гідростатичного тиску по поверхні корпусу судна. Так обчислюються поздовжня та поперечна складові сили, що діє на судно F_l, F_t , та z -компоненти моменту сил M відносно вертикальної осі, що проходить через центр:

$$F_{l|t} = \left[\iint_S P d\vec{s} \right]_{l|t}, M = \left[\iint_S P \vec{r} \times d\vec{s} \right]_z. \quad (4)$$

Тут S – поверхня корпусу судна; $d\vec{s} = \vec{n} ds$ – вектор площі, \vec{n} – нормаль, \vec{r} – радіус-вектор елементарної площадки, P – гідростатичний тиск на елементарну площадку.

Модель пов'язаних процесів для опису динаміки домішок, переформування і забруднення дна використовує систему рівнянь – законів збереження кількості речовини для шару води і верхнього шару дна. Для шару води це рівняння переносу,

які описують адвекцію-дифузію домішок, із вільним членом, що описує перехідні процеси між різними фракціями. Для шару дна – це кінетичні рівняння переходу домішок з шару води до дна та назад. Наприклад для переформування дна – це рівняння переносу наносів течією та рівняння ерозії-седиментації:

$$\frac{\partial(hS)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(q_i S) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(hD_{ij}\frac{\partial S}{\partial x_j}\right) + (Q_e - Q_d), \quad (5)$$

$$(1 - \phi)\rho_b \frac{\partial \eta}{\partial t} = -(Q_e - Q_d) = -\beta w_0(S^* - S),$$

де S і S^* – фактична і рівноважна осереднені по глибині концентрація наносів у воді ($\text{кг}/\text{м}^3$); ρ_b – густина донних відкладень, ϕ – пористість верхнього донного шару; Q_e і Q_d – швидкості ерозії і осадження, w_0 – швидкість осадження частинок (гідралічна крупність); β – коефіцієнт розмиву.

Забруднення-радіонукліди представляються трьома фракціями: розчином у воді із концентрацією C ($\text{Бк}/\text{м}^3$); внеском адсорбованим на завислих наносах – C_s ($\text{Бк}/\text{кг}$); та радіонуклідами у верхньому донному шарі – C_b ($\text{Бк}/\text{м}^3$). Їхня динаміка описується рівняннями переносу схожими на (5) та рівнянням забруднення верхнього шару дна. Особливістю моделі є використання різних коефіцієнтів адсорбції й десорбції для систем «вода – завислі частинки» та «вода – донний шар».

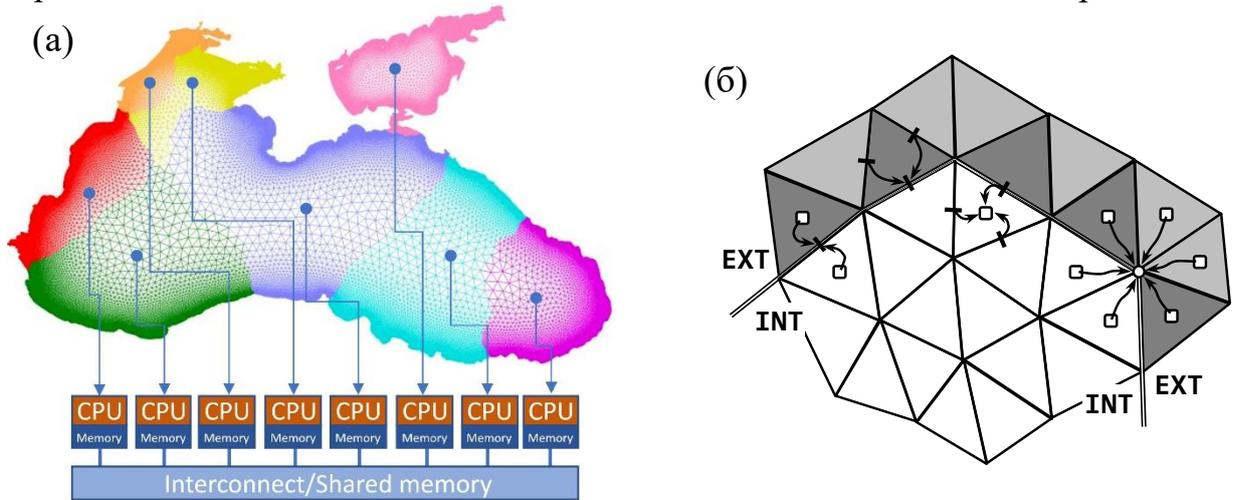


Рисунок 2 – а) приклад розділення за допомогою бібліотеки METIS розрахункової сітки моделі; б) розрахункова сітка на границі між підобластями

Рівняння моделей апроксимуються методом скінчених об'ємів: ShipSim – на регулярних прямокутних сітках, COASTOX-HD-SED-RN – на неструктурованих сітках з трикутними комірками (рис. 2а). Після інтегрування по контрольних об'ємах і апроксимації у часі утворюються системи алгебраїчних рівнянь для РМВ і рівнянь переносу:

$$\Delta A_p \frac{\Delta U_p}{\Delta t} = -\sum_k \vec{F}_k \cdot \vec{n}_k \Delta l_k + \sum_k \vec{F}_k^d \cdot \vec{n}_k \Delta l_k + \Delta A_p S, \quad (6)$$

$$\Delta A_p \frac{\Delta(hX)_p}{\Delta t} = -\sum_k X \vec{q} \cdot \vec{n}_k \Delta l_k + \sum_k \vec{F}_k^d \cdot \vec{n}_k \Delta l_k + \Delta A_p R. \quad (7)$$

де Δt – часовий крок; ΔA_p – площа контрольного об'єму p ; індекс k позначає сторони

контрольного об'єму; \vec{n}_k – одинична нормаль; ΔL_k – довжина сторони k . У (7) X – одна з концентрацій: S, C, SC_S ; R – відповідний вільний член.

Для розв'язання рівнянь (6), (7) в моделях використовуються явні монотонні схеми.

В моделі на прямокутних сітках розв'язання (6) здійснюється з розщепленням по напрямках. Спочатку виконується крок по x для x - та y -рівнянь імпульсу, потім – крок по y . Після обчислення компонент витрат за ними розраховуються нові значення компонент швидкості, які використовуються для розв'язання рівняння неперервності, яке теж розв'язується розщепленням за напрямками. Для адвективних членів застосовується схема з FCT-корекцією потоків, для дифузії – центральні різниці, а компоненти градієнта тиску усереднюються по об'єму за допомогою формули трапецій для збереження другого порядку точності.

В моделі на неструктурованих сітках для розрахунку дифузійних потоків використовуються центральні різниці. Адвективні члени обчислюються за схемою, що є адаптацією алгоритму SEA (Simple Efficient Algorithm) для неструктурованих сіток. На етапі предиктора застосовується схема обчислення потоку годуновського типу з наближеними методами розв'язання задачі Рімана (HLLC чи Roe). На етапі коректора потоки обчислюються за методом downwind, а загальний адвективний потік обмежується з використанням TVD-обмежувача (minmod, superbee, Van-Leer, MC). Для транспортних рівнянь здобувачем реалізовано нову чисельну схему для моделювання процесів із різкими градієнтами концентрації, яка також є адаптацією схеми SEA, з використанням upwind-апроксимації адвективних потоків на етапі предиктора.

При розрахунку динаміки корабельних хвиль в ShipSim використовується фільтрація рівня вільної поверхні для згладжування високочастотних коливань. Для розрахунку навантажень інтегрування в (4) апроксимується підсумовуванням по гранях, якими представлено форму корпусу судна.

Вільні члени у рівнянні транспорту наносів враховуються окремо від адвекції-дифузії, одночасно з розв'язанням рівняння динаміки дна (5). Воно не містить просторових похідних, часова апроксимація є неявною із першим порядком точності. Вільні члени в рівняннях для концентрацій фракцій забруднення C, C_s, C_b теж апроксимуються неявно та утворюють системи трьох зв'язаних рівнянь, які розв'язуються методом Крамера, незалежно для кожної комірки розрахункової сітки.

Часові кроки схем розраховуються з умови Куранта.

Описані чисельні алгоритми реалізовано в програмних кодах моделей у вигляді циклів по вузлах та комірках розрахункових сіток, границях контрольних об'ємів, комірках корабельних сіток тощо. Оскільки схеми явні та просторово локальні, ітерації циклів є незалежними. Відповідно паралелізація алгоритмів моделей для CPU-систем зі спільною пам'яттю і GPU без глибокої архітектурної оптимізації будується на оформленні циклів директивами OpenACC у такому стилі:

```
!$ACC DATA PRESENT(імена глобальних масивів)
```

```
!$ACC KERNELS
```

```
!$ACC LOOP INDEPENDENT PRIVATE(імена локальних змінних)
```

```
Тіло циклу
```

```
!$ACC END KERNELS
```

```
!$ACC END DATA
```

Глобальні масиви попередньо завантажуються з хоста (CPU) в пам'ять пристрою (GPU) директивами типу `!$ACC DATA COPYIN(...)`. Показаний стиль є загальним та може дещо змінюватися для конкретних циклів. `DATA PRESENT` показує наявність змінних в пам'яті GPU. `KERNELS` - визначає початок паралельної частини коду. `LOOP INDEPENDENT PRIVATE(...)` – вказує цикл, який оброблятиметься багатопотоково, `PRIVATE` описує локальні змінні для кожного потоку. Якщо в ітерації є короткий вкладений цикл, він виконується окремим потоком. Це вказується директивою `!$ACC LOOP SEQ`. Також, якщо в ітерації викликається процедура або функція, вона оголошується як така, що виконується окремим потоком – через `!$ACC ROUTINE SEQ`. Для редукованих операцій, типу розрахунку часового кроку, використовується директива з редукцією `!$ACC LOOP REDUCTION(min:...)`. Перед виведенням змінних, у зовнішні файли вони пересилаються на CPU за допомогою директиви `!$ACC UPDATE HOST(...)`.

Модель на неструктурованих сітках також розпаралелено для розподілених CPU-систем із використанням MPI-процесів і декомпозиції області, подібно до моделі `HWAVE`. Адаптація для неструктурованих сіток ґрунтується на декомпозиції на основі поділу графів із застосуванням бібліотеки `METIS` (рис. 2а). `halo`-структури вводяться відповідно до шаблонів чисельних схем (рис. 2б). Для їх оновлення використовуються не буферні масиви, а похідні типи даних MPI, що вводяться відповідно до структур за допомогою функцій `MPI_Type_create_indexed_block(...)` і `MPI_Type_commit(...)`. Оновлення `halo`, збір даних для виводу і розрахунок часового кроку і здійснюються аналогічно як у `HWAVE`.

У розділі також розроблено паралельний алгоритм розв'язку двовимірних рівнянь Нав'є–Стокса лагранжевої моделі `SPH2d` на основі декомпозиції розрахункової області, поділеної на комірки, що містять лагранжеві частинки, на стрічки комірок, уведенні `halo`-комірок уздовж їхніх границь і MPI-обмінах значеннями `halo`-частинок. Лагранжевий характер дискретизації враховано шляхом введення процедури міграції частинок між підобластями.

У третьому розділі подано схеми роботи розроблених програмних модулів, описаних паралельних моделей, та їх інтеграцію у єдину інформаційно-моделюючу систему `COASTOX-PRL`. Модулі реалізовано мовою `Fortran` із застосуванням MPI (розподілені CPU-системи) та `OpenACC` (GPU), обидві технології також підтримують CPU-системи зі спільною пам'яттю. Створено такі модулі: `HWAVE` для трансформації хвиль (CPU з розподіленою та спільною пам'яттю), `ShipSim` для динаміки корабельних хвиль і навантажень (CPU зі спільною пам'яттю та GPU), `COASTOX-HD-SED-RN` для гідродинаміки, транспорту наносів і забруднень (гібридні архітектури CPU+GPU) (рис. 3а).

Взаємодію хвильового модуля (це може бути `HWAVE` або вільна спектральна хвильова модель `SWAN`) і модуля гідродинаміки і транспорту реалізовано на основі розроблених файлових інтерфейсів і `bash`/`batch`-скриптів для операційних систем `Linux`/`Windows`. Скрипти організовують почергову роботу модулів. Як тільки `COASTOX-HD-SED-RN` на основі розрахованих хвильових полів і згенерованих ними течій обчислить достатню за критерієм зміну дна, він зупиняє розрахунок і передає дані течій і рельєфу через зовнішні файли до хвильової моделі (рис. 3б). Вона

обчислює за ними усталену хвильову картину. Такі кроки повторюються до проходження всього періоду моделювання.

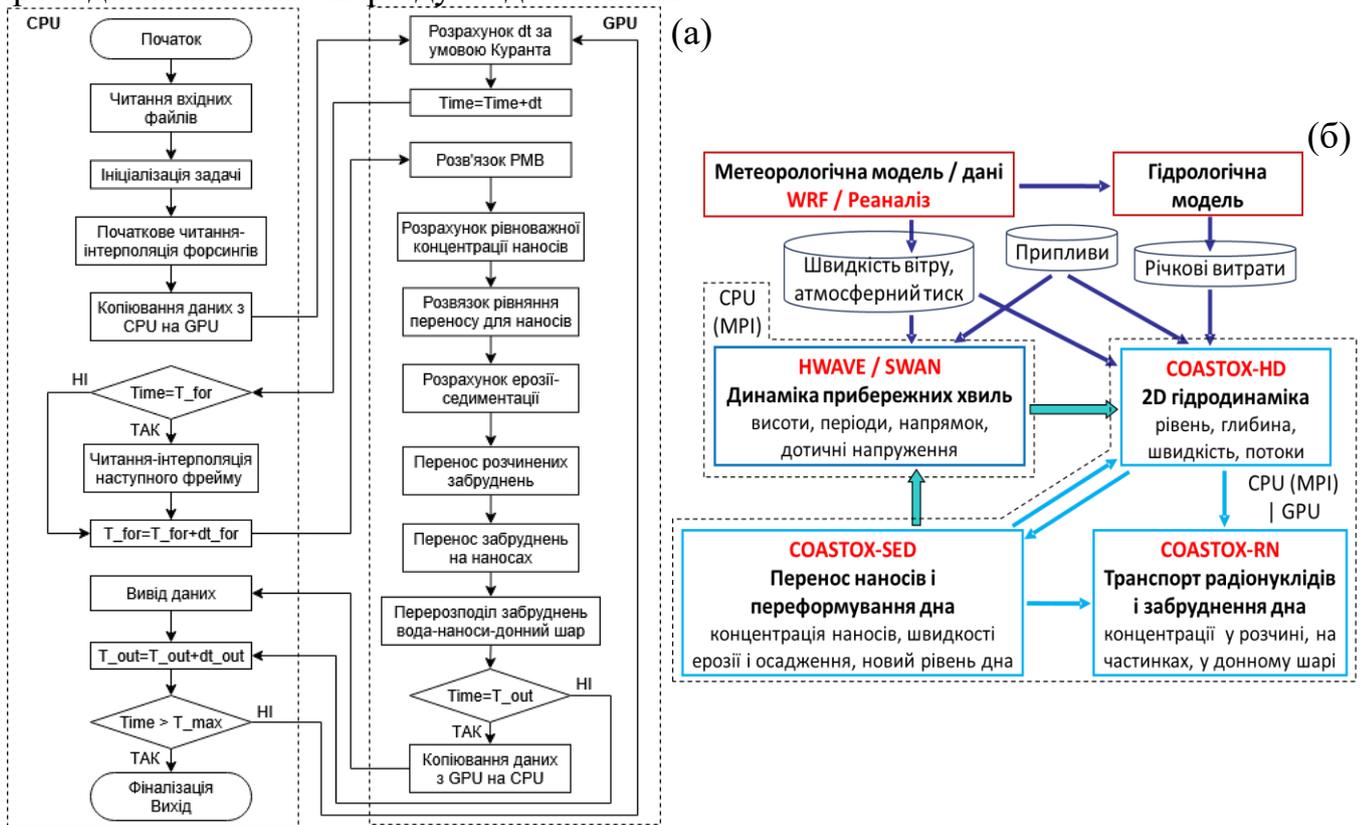


Рисунок 3 – а) схема роботи модуля COASTOX-HD-SED-RN (GPU); б) схема взаємодії модулів інформаційної системи COASTOX-PRL

Додатково розроблені файлові формати, програми та скрипти bash/batch і Python, що забезпечують попередню обробку вхідних даних системи та постобробку результатів із використанням вільного програмного забезпечення для геопросторових даних і генерації розрахункових сіток (Aquaveo SMS, Blue Kenue, QGIS), а також представлення інтерактивних вебкарт на основі ГІС-сервісів ArcGIS. Файлові інтерфейси та їхні специфікації використовуються для інтеграції модулів COASTOX-PRL у Java-системи підтримки прийняття рішень: систему реагування на радіаційні аварії JRODOS і систему попередження та пом'якшення наслідків повеней HYDROS.

У четвертому розділі на основі COASTOX-PRL створено інформаційні системи паралельних обчислень для дослідження задач динаміки хвиль і течій, та оцінки наслідків техногенних впливів, зокрема бойових дій під час російського вторгнення, у річкових і морських системах.

Для 12 ділянок басейнів річок Прут і Сірет розроблено систему двовимірного прогнозування зон і глибин затоплення під час раптових дощових паводків. Систему верифіковано за даними спостережень паводку, спричиненого екстремальними опадами на заході України влітку 2008 р. Для цих ділянок побудовано карти затоплення для повеней забезпеченістю 10%, 5%, 1%, 0.1%. Моделі ділянок інтегровано в графічну оболонку HYDROS для оперативного прогнозування.

Для ділянки басейну Дніпра в районі м. Києва (Київське-Канівське водосховища – рис. 4а) створено систему прогнозування повеней у періоди високих водопіль. Систему верифіковано за даними вимірювань на гідрологічних постах під

час водопілля 1979 р. (рис. 4б). Вона використана для побудови карт повеней різної забезпеченості та інтегрована в оболонку HYDROS для прогнозування різних сценаріїв формування водопілля. Система також адаптована для картування повеней, спричинених руйнуванням гідровузлів: гіпотетичного прориву греблі Київської ГЕС (рис. 4в), реального прориву (підрив) Козаровицької дамби (рис. 4г).

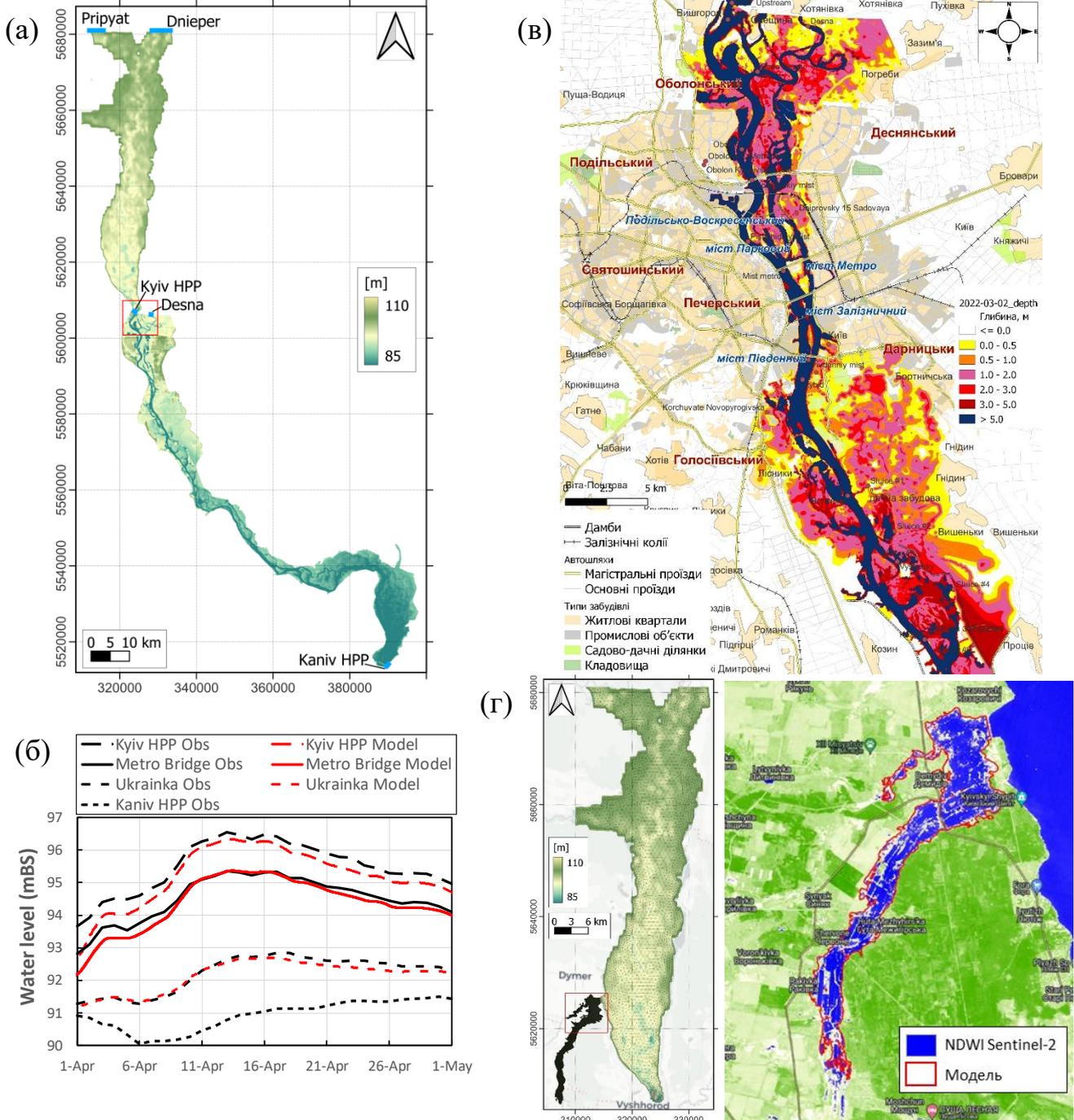


Рисунок 4 – а) область Київської моделі повеней; б) рівні води в контрольних точках під час водопілля 1979 р.; в) приклад карти затоплення при прориві греблі ГЕС шириною 100 м; г) область та зона затоплення при прориві Козаровицької дамби

Роботи з прогнозування впливу бойових дій на гідровузли Дніпровського каскаду були продовжені створенням систем прогнозування проривів Дніпрогесу та Каховської ГЕС. Для Дніпрогесу змодельовано зону затоплення для сценарію гіпотетичного прориву, близького за параметрами до історичного руйнування в

серпні 1941 р. Для Каховської ГЕС виконувалося як сценарне моделювання так і оперативні розрахунки з дати руйнування 06.06.2023. Прогноз було верифіковано за даними супутникових знімків (рис. 5б). Налаштування моделі за вимірюваннями на постах Нікополь і Херсон (рис. 5в, г) показало, що руйнування відбувалося через швидке утворення початкового прорану з подальшим його збільшенням унаслідок розмиву ґрунтів. За результатами моделювання повеней створено ГІС-матеріали для вебкарт, призначених для використання державними установами.

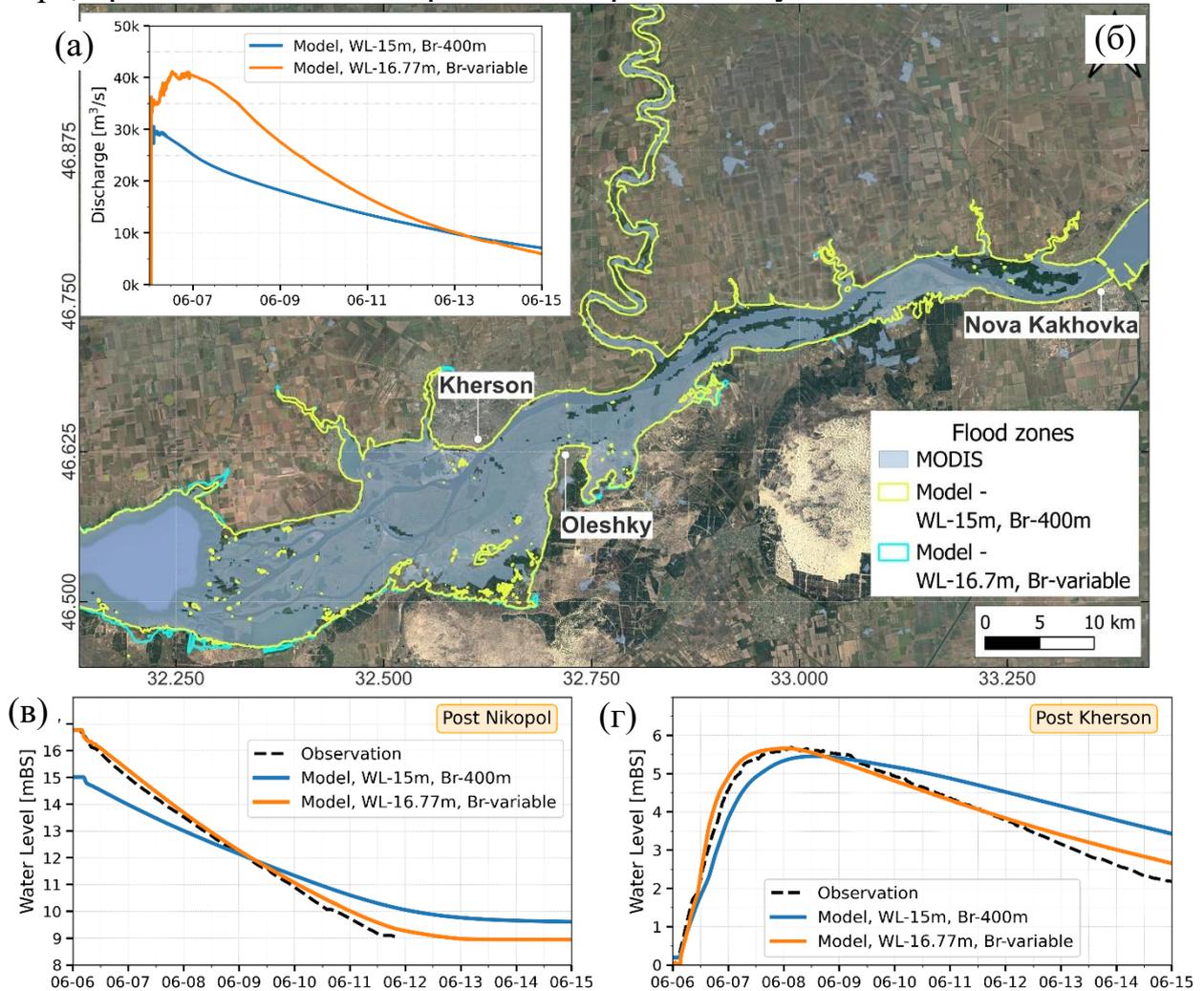


Рисунок 5 – а) витрата води через греблю Каховської ГЕС для сценаріїв зі сталим прораном (400 м) та з прораном змінної геометрії; б) порівняння зон затоплення – модель-супутник; в, г) порівняння рівнів води на постах Нікополь (в) і Херсон (г)

GPU-обчислення верифікованої інформаційної системи гідрологічного режиму Кілійської дельти Дунаю показали, що проєктована реконструкція глибоководного суднового ходу Дунай–Чорне море з двома огорожувальними дамбами матиме незначний вплив на рівні води та розподіл витрат.

Досліджено ряд задач динаміки хвиль. Створено систему паралельних обчислень нахату цунамі на узбережжя префектур Міягі та Фукусіма, верифіковану за даними цунамі під час землетрусу 2011 р. Розроблено спектральну версію паралельного хвильового модуля H-WAVE, яку разом з відкритою моделлю SWASH застосовано для дослідження проникнення хвиль у портові акваторії та визначення

резонансів з метою оптимізації конфігурацій портових споруд. Модель SWASH разом із розробленою моделлю гідродинаміки згладжених частинок SPH2d використано для прогнозування нахату хвиль на берег та оцінки хвильових навантажень на берегові споруди. На основі модуля двовимірної гідродинаміки корабельних хвиль ShipSim створено інформаційну систему GPU-обчислень для дослідження генерації та поширення корабельних хвиль у поєднаних водоймах – річці San Jacinto та акваторії терміналу Barbour's Cut Terminal (США), яку також використано для оцінки навантажень на судна, пришвартовані біля причалів терміналу.

Тестування інформаційних систем під час розрахунків задач показало ефективність розроблених паралельних алгоритмів. Так, GPU-обчислення моделей ділянок у басейнах річок Прут і Сірет дають змогу виконувати моделювання в оперативному режимі у десятки разів швидше за реальний час (48 разів для найбільшої розрахункової сітки). Системи моделювання проривів гідровузлів також значно прискорюються внаслідок розпаралелення. Для відносно невеликих моделей прориву Козаровицької дамби і Київської ГЕС оперативне моделювання можливе на CPU-системах зі спільною пам'яттю – робочих станціях. Для великих моделей Каховської і Дніпровської ГЕС із більше ніж 7 млн комірок більшу ефективність показують GPU-обчислення. GPU-обчислення також прискорили розрахунки моделей: Кілійської дельти – приблизно у 110 разів (порівняно з непаралельною версією на CPU), нахату цунамі на берег – у 90 разів, динаміки корабельних хвиль – до 124 разів. Для системи прогнозування повеней у Києві дослідження показало, що прискорення на GPU зростає зі збільшенням розміру розрахункової сітки, досягаючи 180 разів для сіток з мільйонами комірок на найпотужнішій використаній відеокарті (рис. 6а). Ефективність паралелізації на розподілених CPU-системах підтверджується результатами тестування хвильового модуля H-WAVE (задача з мілиною на дні) на кластері Інституту кібернетики в режимі по 1 ядру з обчислювального вузла. Спостерігається типова залежність від кількості CPU (рис. 6б) з максимальним прискоренням 27.5 разів для 38 вузлів (ефективність розпаралелювання – 72.4%).

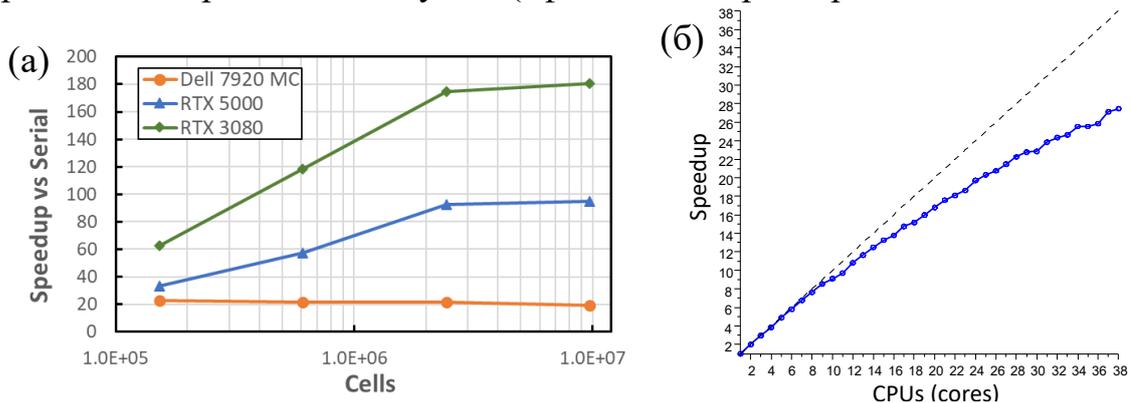


Рисунок 6 – а) прискорення MPI- та GPU-версій київської моделі повеней (1 день паводку 1979 р.); б) прискорення H-WAVE у залежності від кількості процесорів

У п'ятому розділі розглядається створення інформаційних систем прогнозу стану водних об'єктів та дослідження задач морфодинаміки і розповсюдження забруднень із використанням моделюючої системи COASTOX-PRL.

Інформаційну систему паралельних обчислень переформування дна в прибережній зоні Чорного моря використано для аналізу впливу кліматичних змін на розмив узбережжя м. Євпаторія. Розрахунки вітрових хвиль для сучасного клімату та сценаріїв його майбутніх змін (модель SWAN), а також зумовлених ними уздовжберегових течій та транспорту наносів (COASTOX-HD-SED) показали, що у XXI столітті просторовий розподіл зон ерозії та акумуляції на узбережжі міста суттєво не зміниться. Прогнозоване посилення інтенсивності седиментаційних процесів у наявних зонах залишається в межах невизначеності сценарного моделювання кліматичних змін.

Для Київського водосховища розроблено моделюючу систему розповсюдження радіонуклідів при надходженні їх з річок Прип'ять або Дніпро, чи внаслідок атмосферного випадіння на поверхню водойми. Система прогнозує динаміку концентрації радіонуклідів у воді (рис. 7а) з урахуванням обміну між водою та донними відкладами. Її налаштовано за даними вимірювань концентрації ^{90}Sr у річках і у водосховищі біля греблі Київської ГЕС під час весняної повені 1999 р. (рис. 7в). Розрахунки (рис. 7б) показали здатність водосховища знижувати пікові концентрації завдяки розведенню і осадженню, зменшуючи ризики для населення нижче за течією.

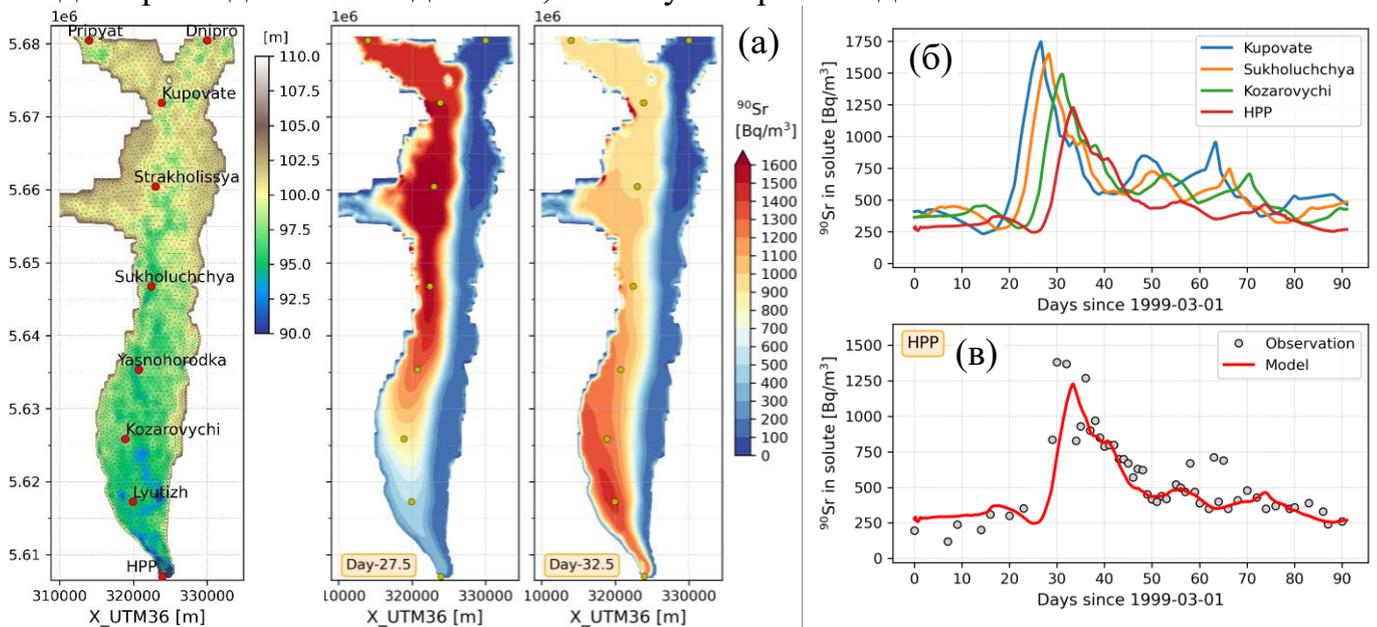


Рисунок 7 – а) концентрація ^{90}Sr на 27.5, і 32.5 день від 1.03.1999 р.; б, в) часова динаміка ^{90}Sr : б) у точках вздовж старого фарватеру Дніпра ; в) біля греблі ГЕС

На основі київської моделі повеней розроблено систему прогнозування розповсюдження забруднення в р. Дніпро в межах м. Києва при надходженні його з р. Десна. Систему застосовано для дослідження ефективності водоскидів з Київської ГЕС як засобу впливу на забруднення під час перенесення органічної речовини з території РФ річками Сейм та Десна у середині серпня 2024 р. Дослідження показало, що водоскиди ефективно знижують концентрацію забруднювальної речовини та прискорюють її винос за межі міста.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі поставлено і розв'язано актуальну науково-прикладну задачу розробки інформаційної технології паралельних обчислень двовимірних рівнянь поверхневих вод для створення інформаційної системи прогнозування наслідків техногенних впливів на стан річок і прибережної зони моря. Основні наукові та практичні результати роботи такі:

1. Проведено аналіз методів розпаралелення розв'язків рівнянь у частинних похідних, що лежать в основі математичних моделей стану поверхневих вод. Виконано огляд світових та українських досліджень з використання таких моделей, а також інформаційних систем, створених на їх основі. Обґрунтовано доцільність створення нової паралельної моделюючої системи COASTOX-PRL, що є розвитком непаралельної системи COASTOX, розробленої в ПІММС НАН України, із застосуванням гібридного підходу для сучасних гетерогенних систем з CPU та GPU.

2. Розроблено гібридну технологію, що поєднує директиви OpenACC, оформлені відповідно до введеного стилю, та паралелізацію на основі MPI-процесів із декомпозицією розрахункових сіток, введенням halo-структур підобластей та обміном даними через MPI. Технологію адаптовано для прямокутних сіток, а також для неструктурованої сітки із використанням декомпозиції на основі поділу графів і похідних MPI-типів даних для halo-структур.

3. Запропоновано нову схему підвищеного порядку типу Годунова на неструктурованих сітках для розв'язання рівнянь переносу у моделі динаміки наносів і забруднень.

4. Розроблено паралельні CPU- та GPU-модулі інформаційної системи COASTOX-PRL: модуль трансформації хвиль у прибережній зоні HWAVE/HWAVE-S (спектральна версія), модуль динаміки корабельних хвиль і розрахунку навантажень ShipSim, модуль двовимірної гідродинаміки, транспорту наносів і забруднень на неструктурованих сітках COASTOX-HD-SED-RN.

5. Розроблено файлові інтерфейси та відповідні специфікації для інтеграції модулів у систему COASTOX-PRL із використанням bash/batch скриптів, інтеграції у сучасні Java-СППР JRODOS та HYDROS, а також для пре- та постпроцесінгу геопросторових вхідних і вихідних даних із залученням стороннього програмного забезпечення, зокрема для представлення інтерактивних вебкарт на основі ГІС-сервісів ArcGIS.

6. Розроблено технологію паралелізації лагранжевої моделі, що включає декомпозицію області, розділеної на комірки з лагранжевими частинками, введення halo-комірок, MPI-обміни даними та міграцію частинок між підобластями. На її основі розпаралелено двовимірну модель гідродинаміки згладжених частинок SPH2d.

7. За результатами тестування розроблених паралельних модулів на прикладних задачах показано, що реалізована паралелізація забезпечує значне прискорення обчислень (у десятки разів на CPU-системах і понад 100 разів на GPU) та дозволяє застосовувати систему COASTOX-PRL для високодеталізованих розрахунків і оперативного прогнозування.

8. Розроблено інформаційну систему двовимірного прогнозування зон і

глибин затоплення на ділянках басейнів річок Прут і Сірет під час раптових дощових паводків, а також систему прогнозування затоплення берегів м. Києва під час високих водопіль на Дніпрі. Системи базуються на розпаралеленому модулі двовимірної гідродинаміки COASTOX-PRL, інтегрованому в оболонку HYDROS.

9. Розроблено інформаційні системи паралельних високодеталізованих обчислень наслідків руйнування гідровузлів Дніпровського каскаду ГЕС. Для Козаровицької дамби, Київської, Каховської та Дніпровської ГЕС прогнозовано зони затоплення різних сценаріїв прориву. Для Каховської ГЕС підтверджено припущення про швидке утворення початкового прорану з подальшим його збільшенням за рахунок розмиву ґрунтів в ширину та глибину.

10. Розроблено інформаційну систему GPU-обчислень гідрологічного режиму Кілійської дельти Дунаю, розрахунки якою показали незначний вплив проєктованої реконструкції ГСХ Дунай–Чорне море з двома огорожувальними дамбами на рівні води та розподіл витрат в рукавах дельти.

11. Розроблено інформаційну систему паралельних обчислень нахату цунамі на узбережжя префектур Міягі і Фукусіма під час землетрусу у Японії 2011 р.

12. Досліджено проникнення хвиль та резонанси у портових акваторіях із використанням спектральної версії паралельного хвильового модуля HWAWE та відкритої хвильової моделі SWASH.

13. Досліджено хвильові навантаження на берегові споруди внаслідок нахату хвиль із використанням моделі SWASH та паралельної моделі SPH2d.

14. Із використанням модуля корабельних хвиль ShipSim створено інформаційну систему GPU-обчислень динаміки корабельних хвиль у поєднаних водоймах тестовану для річки San Jacinto та акваторії терміналу Barbour's Cut Terminal (США), включаючи розрахунок навантажень на пришвартовані судна.

15. Розроблено інформаційну систему паралельних обчислень переформування дна в прибережній зоні Чорного моря, яку застосовано для дослідження впливу змін клімату на розмив узбережжя м. Євпаторія. Показано, що у ХХІ сторіччі розподіл зон ерозії і акумуляції на узбережжі міста принципово не зміниться. Прогнозоване підсилення інтенсивності процесів в існуючих зонах намівів знаходиться в діапазоні невизначеності сценарного моделювання кліматичних змін.

16. Розроблено інформаційну систему прогнозування розповсюдження радіонуклідів ^{90}Sr в Київському водосховищі. Результати моделювання сценарію весняної повені 1999 р. добре збіглися з даними спостережень та показали значну буферну здатність Київського водосховища, що послаблює пікові концентрації радіонуклідів, зменшуючи ризики для здоров'я населення нижче за течією.

17. Розроблено інформаційну систему паралельних обчислень розповсюдження органічного забруднення у Дніпрі в районі м. Києва при надходженні його з р. Десна. Оцінено ефективність попусків води з Київської ГЕС, як засобу для зниження концентрації і прискорення виносу забруднювальної речовини за межі міста.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Сорокін, М. В., Железняк, М. Й., Ківва С. Л., & Пилипенко О.І. (2025). Паралельне двовимірне моделювання транспорту наносів і забруднюючих речовин в річкових системах на багатопроцесорних системах і графічних процесорах. *Екологічна безпека та природокористування*, 54(3), 61-75. Бази: *Index Copernicus International, ResearchBib, Google Scholar, Ulrich's Periodicals Directory, CrossRef*.
2. Сорокін, М. В., Железняк, М. Й., Аніщенко, Л. Я., & Сverdlov, Б. С. (2025). Паралельні обчислення гідрологічного режиму Кілійської дельти Дунаю на графічних процесорах. *Електронне моделювання*, 47(4), 90–112. Бази: *Index Copernicus International, CrossRef, Ulrich's Periodicals Directory, Google Scholar, Cambridge Scientific Abstracts (CSA), Computer and Information Systems Abstracts, INIS Collection*.
3. Коцюрuba, В., Прошин, І., Сорокін, М., & Пилипенко, О. (2024). Удосконалена методика прогнозування наслідків надзвичайних ситуацій терористичного характеру на гідротехнічних спорудах. *Сучасні інформаційні технології у сфері безпеки та оборони*, 51(3), 5–14. Бази: *CiteFactor, Google Scholar, Index Copernicus International, The Journals Impact Factor (JIF), Bielefeld Academic Search Engine (BASE), Research Bible, WorldCat, Asian Science Citation Index (ASCI)*.
4. Сорокін, М. (2023). Розпаралелювання чисельних розв'язків рівнянь мілкої води методом скінченних об'ємів для реалізації на багатопроцесорних системах і графічних процесорах. *Екологічна безпека та природокористування*, 46(2), 163–193. Бази: *Index Copernicus International, ResearchBib, Google Scholar, Ulrich's Periodicals Directory, CrossRef*.
5. Железняк, М. І., Демченко, Р. І., Дикий, П. В., & Сорокін, М. В. (2014). Численное моделирование резонансных свойств гаваней с помощью нелинейной негидростатической модели SWASH. *Математичні машини і системи*, (3), 78–87. Бази: *CrossRef, Google Scholar, WorldCat, Open Ukrainian Citation Index (OUCI), Ulrich's Periodicals Directory*.
6. Каліон, В. А., Семенович, К. О., & Сорокін, М. В. (2011). Метод гідродинаміки згладжених частинок в задачах про рух в'язкої рідини. *Вісник Київського університету. Серія фізико-математичні науки*, (4), 71–74. Бази: *Scopus, Directory of Open Access Journals (DOAJ), Zentralblatt MATH (zbMATH), Index Copernicus International, CrossRef, Google Scholar, WorldCat, Bielefeld Academic Search Engine (BASE), JournalTOCs*.
7. Zheleznyak, M., Kivva, S., Pylypenko, O., & Sorokin, M. (2022). Modeling of behavior of Fukushima-derived radionuclides in freshwater systems. In K. Nanba, A. Konoplev, & T. Wada (Eds.), *Behavior of radionuclides in the environment III* (pp. 199-252). Бази: *Scopus, Springer Nature Link, Google Scholar, WorldCat, CrossRef, KAKEN*.
8. Zheleznyak, M., Kivva, S., Ievdin, I., Boyko, O., Kolomiets, P., Sorokin, M., Mikhalskyi, O., & Gheorghiu, D. (2016). Hydrological dispersion module of JRODOS: Renewed chain of the emergency response models of radionuclide dispersion through watersheds and rivers. *Radioprotection*, 51(HS2), S129–S131. Бази: *Scopus, PASCAL, Web*

of Science, INIS Atomindex, IET INSPEC, Chemical abstracts and Cambridge Scientific Abstracts.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

9. Сорокін, М. В. (2024). Алгоритми чисельного розв'язку рівнянь двовимірної моделі динаміки поверхневих вод для графічних процесорів: розвиток і впровадження для прогнозування наслідків руйнування греблі Каховської ГЕС. *Збірник тез XII Міжнародної науково-практичної конференції «ВОДА ДЛЯ МИРУ»*, 22–27. Київ.

10. Laptev, G., Voitsekhovych, O., Protsak, V., Zheleznyak, M., Nanba, K., Konoplev, A., Igarashi, Y., Wakiyama, Y., Bezhenar, R., Kivva, S., Pylypenko, O., Sorokin, M., Kireev, S., & Veremenko, D. (2021). Temporal changes of mobile forms of ^{90}Sr on Pripyat River floodplain in vicinity of Chernobyl NPP: Measurements and risk assessments for river water contamination. *EGU General Assembly 2021*, EGU21-10934.

11. Kivva, S., Zheleznyak, M., Bezhenar, R., Pylypenko, O., Sorokin, M., Demydenko, A., Kanivets, V., Laptev, G., Voitsekhovych, O., Boyko, V., & Gudkov, D. (2021). Modeling of major environmental risks for the Kyiv city, Ukraine from the Dnieper river waters – inundation of coastal areas and contamination by the radionuclides deposited in bottom sediments after the Chernobyl accident. *EGU General Assembly 2021*, EGU21-13038.

12. Pylypenko, O., Zheleznyak, M., Demchenko, R., Kivva, S., Sorokin, M., & Dykyi, P. (2020). Modelling of tsunami inundation in 2011 at the sites of three nuclear power plants – Onagawa, Fukushima Daiichi and Fukushima Daini. *EGU General Assembly 2020*, EGU2020-13940.

13. Sorokin, M., Zheleznyak, M., Kivva, S., Kolomiets, P., & Pylypenko, O. (2020). High performance computing of waves, currents and contaminants in rivers and coastal areas of seas on multi-processors systems and GPUs. *EGU General Assembly 2020*, EGU2020-11372.

14. Сорокін, М. В. (2020). Моделирование корабельных волн с использованием уравнений мелкой воды на GPU. *Тези доповідей XV міжнародної науково-практичної конференції “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2020”*, 137–140.

15. Zheleznyak, M., Kivva, S., Sorokin, M., Pylypenko, O., Konoplev, A., Aoyama, M., Tsumune, D., Igarashi, Y., & Dykyi, P. (2019, December). Parallel shallow water modeling of radionuclide transport in solute and suspended sediments in Chernobyl and Fukushima waters. *American Geophysical Union Fall Meeting 2019*, H13L-1884. San Francisco, CA, USA.

16. Zheleznyak, M., Kivva, S., Boyko, S., Igarashi, Y., Konoplev, A., Pylypenko, O., Sorokin, M., & Wakiyama, Y. (2018, June). Numerical model chain of radionuclide transport in “watershed – river – reservoir” systems: Development and implementation at Chernobyl and Fukushima-Daiichi nuclear power plants. *9th International Congress on Environmental Modelling and Software*, Fort Collins, USA.

17. Zheleznyak, M., Dykyi, P., Kivva, S., Pylypenko, O., Sorokin, M., Aoyama, M., & Tsumune, D. (2018). Modelling of Cs-137 transport in the nearshore zone of

Fukushima–Daiichi NPP under the combined action of waves, currents and fluxes of sediments. *EGU General Assembly 2018, Geophysical Research Abstracts*, 20, EGU2018-19294.

18. Pylypenko, O., Zheleznyak, M., Boyko, O., Kovalets, I., Kivva, S., Khalchenkov, A., Mikhalsky, O., & Sorokin, M. (2018). Flood forecasting system developed for Ukrainian parts of Prut and Siret river basins. *Тези доповідей XIII міжнародної науково-практичної конференції “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2018”*, 39–41.

19. Pylypenko, O., Zheleznyak, M., Boyko, O., Kovalets, I., Kivva, S., Khalchenkov, A., Mikhalsky, O., & Sorokin, M. (2018). Flood forecasting and flood inundation mapping system developed for Ukrainian parts of Prut and Siret river basins within EAST AVERT project. *EGU General Assembly 2018, Geophysical Research Abstracts*, 20, EGU2018-10652-2.

20. Kivva, S., Zheleznyak, M., Boyko, O., Ievdin, I., Pylypenko, O., Mikhalsky, O., Raskob, W., & Sorokin, M. (2018). Updated module of radionuclide hydrological dispersion of the Decision Support System RODOS. *EGU General Assembly 2018, Geophysical Research Abstracts*, 20, EGU2018-19264.

21. Zheleznyak, M. I., Demchenko, R. I., Kolomiets, P. S., Sorokin, M. V., & Dikiy, P. V. (2016). Numerical simulation of tsunami propagation by COASTOX-UN model. *Тези доповідей XI міжнародної науково-практичної конференції “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2016”*, 83–86.

22. Zheleznyak, M., Kolomiets, P., Dzijuba, N., Ievgen, I., Sorokin, M., Denisov, N., Ischuk, O., & Koepfel, S. (2015). Numerical modeling for flood mapping under climate change impacts: Transboundary Dniester River study. *EGU General Assembly 2015, Geophysical Research Abstracts*, 17, EGU2015-9361.

23. Kantardgi, I., Zheleznyak, M., Demchenko, R., Dykyi, P., Kivva, S., Kolomiets, P., & Sorokin, M. (2014). Modeling of nonlinear hydrodynamics of the coastal areas of the Black Sea by the chain of the proprietary and open source models. *EGU General Assembly 2014, Geophysical Research Abstracts*, 16, EGU2014-11319-1.

24. Дикий, П. В., Железняк, М. Й., Коломієць, П. С., Ківва, С. Л., & Сорокін, М. В. (2013). Моделювання впливу регіональних змін клімату на ерозію берегів західного Криму. *Тези доповідей VIII міжнародної науково-практичної конференції “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2013”*, 56–59.

25. Демченко, Р. І., & Сорокін, М. В. (2013). Моделирование распространения волн в зоне природных и искусственных берегозащитных сооружений с помощью модели SWASH. *Тези доповідей VIII міжнародної науково-практичної конференції “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2013”*, 49-52.

26. Сорокін, М. В. (2011). Паралельний явний кінцево-різницевий алгоритм розв'язку рівнянь моделі двовимірної гідроморфодинаміки прибережної зони на неструктурованих сітках. *Тези доповідей VI міжнародної науково-практичної конференції “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2011”*, 103–105.

27. Сорокін, М. В. (2012). Параллельный алгоритм численного решения уравнений мелкой воды на неструктурированной сетке. *Тезисы IV Международной*

научной конференции «Моделирование 2012», 412-415.

28. Демченко, Р. І., Коломієць, П. С., & Сорокін, М. В. (2010). Моделирование трансформации волн в прибрежной зоне шельфа с помощью полу-спектральной модели H/WAVE-S. *Тези доповідей V науково-практичної конференції з міжнародною участю “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2010”*, 28-30.

29. Дикий, П. В., Демченко, Р.І., Железняк, М. Й., Ківва, С.Л., Коломієць, П. С., & Сорокін М. В., (2009). Розрахунок літодинамічних процесів прибережної зони дельти Дунаю на основі комплексу моделей паралельних обчислень. *Тези доповідей IV науково-практичної конференції з міжнародною участю “Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2009”*, 37-40.

Наукові праці, які додатково відображають наукові результати дисертації:

30. Національна академія наук України. (2023, 9 червня). *Аналіз перебігу затоплення територій Херсонської області внаслідок руйнації гідроспоруд Каховської ГЕС* [Повідомлення НАН України]. <https://www.nas.gov.ua/UA/Messages/Pages/View.aspx?MessageID=10209>

31. Національна академія наук України. (2022, 28 квітня). *Науковці Академії спрогнозували характер затоплення територій Київщини, спричиненого російським вторгненням* [Повідомлення НАН України]. <https://www.nas.gov.ua/UA/Messages/Pages/View.aspx?MessageID=9011>

АНОТАЦІЯ

Сорокін М.В. Інформаційні технології паралельних обчислень наслідків техногенних впливів на стан річок і прибережної зони моря на основі двовимірних рівнянь. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.13.06 – інформаційні технології. – Інститут проблем математичних машин і систем Національної академії наук України, Київ, 2025.

У роботі розроблено інформаційну технологію паралельних обчислень для комп'ютерів із CPU та GPU, що поєднує декомпозицію області з MPI-процесами та потокову обробку на основі директив OpenACC. Створено систему COASTOX-PRL паралельних моделей лінійної трансформації хвиль, динаміки корабельних хвиль, гідродинаміки мілкої води, транспорту наносів і забруднень, а також лагранжеву модель гідродинаміки згладжених частинок. Розроблено низку інформаційних систем для задач динаміки річок і прибережної зони моря та оцінки техногенних впливів. Паралелізація прискорила розрахунки у десятки разів і дозволила підвищити деталізацію та оперативність прогнозування.

Ключові слова: інформаційні технології, паралельні обчислення, гібридні архітектури, CPU, GPU, техногенні впливи, річкові системи, прибережна зона моря, двовимірне моделювання, інформаційно-моделююча система.

ABSTRACT

Sorokin M.V. Information technologies of parallel computations of the consequences of technogenic impacts on the state of rivers and coastal sea zones based on two-dimensional equations. – Qualification scientific work in manuscript form.

Dissertation for the degree of a candidate of technical sciences (doctor of philosophy) in specialty 05.13.06 – Information Technology. – Institute of Mathematical Machines and Systems Problems of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2025.

The work focuses on developing parallel computing technologies and modeling systems to assess the consequences of technogenic impacts, including military actions, on rivers and coastal zones.

A hybrid parallel computing technology for CPU- and GPU-based systems was developed, combining process-level parallelization, domain decomposition, halo structures, MPI data exchanges, and thread-level parallelization using OpenACC directives.

Using this technology, the COASTOX-PRL system of parallel mathematical models was created. HWAVE simulates linear wave transformation on rectangular grids (decomposition, halo structures, MPI processes). ShipSim models 2D shallow-water hydrodynamics on rectangular grids, adapted for ship-wave prediction and load calculation (OpenACC). COASTOX-HD-SED-RN models 2D hydrodynamics, sediment transport, and contaminant dynamics on unstructured grids (graph-based decomposition, MPI-types for halo, OpenACC). The transport scheme was improved to handle sharp concentration gradients. MPI-based procedures were also adapted for the Lagrangian SPH2d model with particle migration between subdomains.

Functional schemes for CPU and GPU systems were developed, and program modules were implemented in Fortran. Using file interfaces and bash/batch scripts, the modules were integrated into a single system. Additional programs handled input preprocessing, result postprocessing, and interactive GIS web maps. Specifications were developed to integrate the COASTOX-PRL modules into Java decision-support systems: JRODOS for radiological emergencies and HYDROS for flood prevention and mitigation.

Parallel computing systems were applied to study river and coastal hydrodynamics and assess technogenic and military impacts. Floods were predicted in the Prut and Siret basins and high water levels on the Dnipro River in Kyiv; flood maps of various probabilities were generated. Scenarios of dam failures, including Kozarovychi Dam, Kyiv, Kakhovka, and Dnipro HPPs, were simulated. For actual failures of the Kozarovychi dam and the Kakhovka HPP, the results were confirmed by satellite imagery. Model calibration for the Kakhovka HPP using hydropost data indicated the breach resulted from rapid initial failure, later enlarged by soil erosion. GIS materials for web maps were created for governmental use. Modeling of the Kiliya Delta (Danube) showed planned reconstruction of the Danube – Black Sea Deep Water Navigation Route would have a negligible impact on water levels and flow distribution.

A verified tsunami modeling system was developed for the 2011 event in the Miyagi and Fukushima prefectures. A spectral version of HWAVE-S, together with the open-source SWASH model, was used to study wave penetration in ports and identify resonances. SWASH and SPH2d predicted wave run-up and coastal structure loads. Using ShipSim, a

GPU system modeled ship waves in the San Jacinto River and the Barbours Cut Terminal (USA) and assessed moored vessel loads.

The impact of climate change on the Black Sea coast erosion (Yevpatoria) was studied, showing that the erosion and accumulation zones remain stable, with sedimentation intensity changes within climate uncertainty. A system for radionuclide dynamics in the Kyiv Reservoir was developed, considering contamination from the Pripjat and Dnipro rivers, sediment interaction, and surface deposition. Calibration using ^{90}Sr data during the 1999 spring flood showed the reservoir's buffering capacity reduced peak concentrations and risk to downstream populations. Forecasts of organic pollution in the Dnipro River within Kyiv (from Seym and Desna, August 2024) demonstrated the effectiveness of Kyiv HPP water releases in reducing concentrations and accelerating pollutant removal.

The parallelization accelerated calculations by tens of times (over 100 on GPU), enabling higher detail and operational forecasting even on personal computers with high-performance graphics cards.

Keywords: information technologies, parallel computing, hybrid architectures, CPU, GPU, technogenic impacts, river systems, coastal zone, 2D modeling, modeling system.