

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

## MATHEMATICAL MODELING

Научная статья  
УДК 004.942  
<https://doi.org/10.24143/2072-9502-2023-3-97-104>  
EDN SFBHVG

### Численное моделирование переноса примеси в сплошной среде с использованием суперкомпьютерного моделирования

---

*Евгений Владимирович Баскаков*

*Волгоградский государственный университет,  
Волгоград, Россия, e.v.baskakov@volsu.ru*

---

**Аннотация.** На примере утечки нефти из трубопровода, проложенного по дну водоема, описывается процесс моделирования распространения примесей в сплошной среде на основе программного обеспечения, разработанного с использованием суперкомпьютерных технологий и написанного на языке C. Предложена математическая модель, описывающая процесс переноса примесей в водной среде. Задача сводится к решению системы из двух уравнений: обобщенного дифференциального уравнения переноса примесей и уравнения поля скорости. В обобщенном уравнении переноса примесей переменная от функции может являться различными параметрами, в рамках данной задачи она является концентрацией. В моделируемой ситуации происходит утечка нефтепродуктов из магистрального трубопровода, нефтепродукты непрерывным потоком поступают в водоем. Для исследования сымитирована область с заданными границами и начальными параметрами: размер участка, скорость течения, плотность среды. Представлен процесс разработки и тестирования программного комплекса на основе OpenMP-CUDA. Функционал созданной программы позволяет прогнозировать скорость и дальность распространения различных примесей в различных средах с визуальным представлением. Программный комплекс состоит из двух модулей: расчета и визуализации. Расчетный модуль реализован переносом вычислительной нагрузки на видеокарту. Графический модуль реализован на языке Python с использованием библиотеки matplotlib. Приведены итоги численного моделирования распространения загрязняющей примеси в сплошной среде. Полученный результат совпадает с реальной ситуацией и результатами других исследований. При увеличении количества экспериментальных данных и зависимых переменных (температура среды, соленость воды и т. д.) точность моделирования увеличится. Произведен расчет утечки нефти при разных свищах в случае аварии и сравнение с результатами компьютерного моделирования.

**Ключевые слова:** перенос примесей, программный комплекс, математическая модель, численное моделирование, трубопровод, формула утечки, OpenMP, CUDA, графический ускоритель, истечение нефти

**Для цитирования:** Баскаков Е. В. Численное моделирование переноса примеси в сплошной среде с использованием суперкомпьютерного моделирования // Вестник Астраханского государственного технического университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. 2023. № 3. С. 97–104. <https://doi.org/10.24143/2072-9502-2023-3-97-104>. EDN SFBHVG.

Original article

## Numerical simulation of impurity transport in continuous medium using supercomputer modeling

*Evgeny V. Baskakov*

*Volgograd State University,  
Volgograd, Russia, e.v.baskakov@volsu.ru*

**Abstract.** The article describes modeling the spread of impurities in a continuous medium using the oil leak from a pipeline laid along the bottom of a reservoir as an example, based on the software developed using supercomputer technologies in the C language. A mathematical model is proposed that describes the process of impurity transport in the aquatic environment. The problem is reduced to solving a system of two equations: a generalized differential equation for the transfer of impurities and an equation for the velocity field. In the generalized equation for the transport of impurities, the variable from the function can be expressed by different parameters; within the framework of this problem, the variable is a concentration. In the simulated situation, oil products leak from the main pipeline, the oil products continuously flow into the water source. For the study, there was simulated the area with given boundaries and initial parameters: the size of the area, the flow velocity and the density of the medium. The process of developing and testing a software package based on OpenMP-CUDA is presented. The functionality of the created program allows you to predict the speed and range of propagation of various impurities in various environments with a visual representation. The software package consists of two modules: calculation and visualization. The calculation module is implemented by transferring the computational load to the video card. The graphics module is implemented in Python using the Matplotlib library. The results of numerical simulation of the propagation of a pollutant in a continuous medium are presented. The result obtained coincides with a coincidence with the real situation and the results of other studies. With increasing amount of experimental data and dependent variables (ambient temperature, water salinity, etc.), the accuracy of modeling will increase. The analysis of oil leakage at different fistulas was made in case of an accident and comparison with the results of computer simulation.

**Keywords:** impurity transport, software package, mathematical model, numerical simulation, pipeline, leak formula, OpenMP, CUDA, graphics accelerator, oil outflow

**For citation:** Baskakov E. V. Numerical simulation of impurity transport in continuous medium using supercomputer modeling. *Vestnik of Astrakhan State Technical University. Series: Management, computer science and informatics.* 2023;3:97-104. (In Russ.). <https://doi.org/10.24143/2072-9502-2023-3-97-104>. EDN SFBHVG.

### Введение

В настоящее время случаи загрязнения окружающей среды нефтепродуктами приводят к негативным последствиям для экологии, разрушающий масштаб которых невозможно предугадать. Со-

гласно исследованиям [1, 2], за последние 20 лет наибольшая доля в загрязнении среды продуктами нефти приходится на транспортировку. На рис. 1 представлена диаграмма источников загрязнения нефтью окружающей среды.

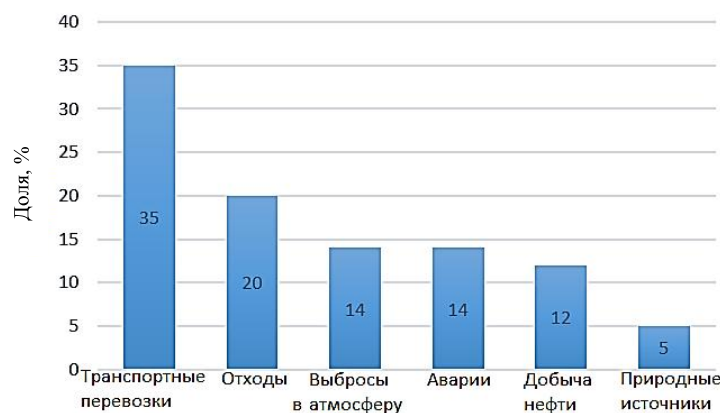


Рис. 1. Доля различных источников в загрязнении окружающей среды нефтью

Fig. 1. Share of different sources in oil pollution

В данной ситуации особенно важную роль играют получение объективной информации о критических показателях антропогенного воздействия, о фактическом состоянии гидросферы и составление прогнозов ее будущего состояния при различных авариях. В решении этих задач может помочь разработанный программный комплекс для моделирования распространения примесей в сплошной среде. За его основу взят разработанный ранее программный комплекс для моделирования распространения переноса примесей в приземленном слое атмосферы [3], который реализуется с помощью слияния технологий параллельного программирования OpenMP и CUDA. Разработанное программное обеспечение (ПО) может служить для прогнозирования распространения различных примесей в сплошной среде, а распараллеливание и перенос расчетов на графический ускоритель значительно сокращает время моделирования.

#### Постановка цели и задачи исследования

Целью исследования является моделирование процесса переноса примеси в сплошной среде, которое реализовано разработанным ПО с использованием суперкомпьютерных технологий CUDA и OpenMP.

Для достижения поставленной цели требуется решить следующие основные задачи:

1. Построить математическую модель процесса переноса примесей, протекающих в сплошной среде.
2. Реализовать численное решение для программного комплекса.
3. Реализовать ПО для компьютерного моделирования с использованием программно-аппаратных архитектур параллельных вычислений OpenMP и CUDA.
4. Провести тестирование ПО и верификацию компьютерной модели, основываясь на известных исследованиях.

Конечным результатом исследования является новый программный комплекс для численного моделирования переноса загрязняющей примеси в сплошной среде. Разработанное ПО предназначено для моделирования и прогнозирования распространения примеси в заданной области.

#### Математическая модель для программного комплекса

В работе моделируется заданное пространство водной среды с заданной скоростью течения. В моделируемой ситуации поврежденный трубопровод проложен по дну рассматриваемой области [4].

За основу математической модели взято обобщенное дифференциальное уравнение переноса примесей, которое имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho u_i \Phi - D_{ii} \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) = S,$$

где  $t$  – время моделирования;  $\rho$  – плотность среды;  $\Phi$  – обобщенная переменная;  $x_i$  – пространственная координата;  $u_i$  – компонент скорости в направлении  $x_i$ ;  $D_{ii}$  – коэффициент переноса массы;  $S$  – источник загрязнения.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений [5, 6]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \text{div}(\rho u\Phi) = \text{div}(D \text{grad}\Phi) + S; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho u) = 0, \quad (2)$$

где  $\Phi$  – концентрация примеси;  $u$  – скорость течения;  $D$  – коэффициент диффузии.

Компоненты вектора скорости распространения примеси определяются уравнением состояния и зависят от нескольких параметров: температуры среды, концентрации примеси, уравнения неразрывности, закона сохранения массы [5].

В декартовой системе координат уравнение (1) и уравнение поля скорости (2) запишутся следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( D \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) + S;$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0,$$

где индекс  $j$  соответствует пространственным координатам  $x, y, z$ . В настоящей работе рассматривается только двумерный случай, поэтому координата  $z$  не учитывалась. Уравнения ниже представлены в общем виде:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = \frac{\partial}{\partial x_x}(\rho u_x) + \frac{\partial}{\partial x_y}(\rho u_y);$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( D \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left( D \frac{\partial \Phi}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( D \frac{\partial \Phi}{\partial x_2} \right).$$

#### Реализация численного моделирования

Для численного моделирования использовался разработанный программный комплекс, написанный на языке C, за основу которого взята программа, созданная для численного моделирования переноса примесей в атмосфере и описанная в предыдущей работе [3]. Алгоритм ПО строится на основе программно-аппаратной архитектуры CUDA и распараллеливания программы с помощью OpenMP [3]. На рис. 2 представлена диаграмма, отражающая потоки данных и передачу управления между функциональными частями разработанной программы, распараллеленная на 2 графических ускорителя.

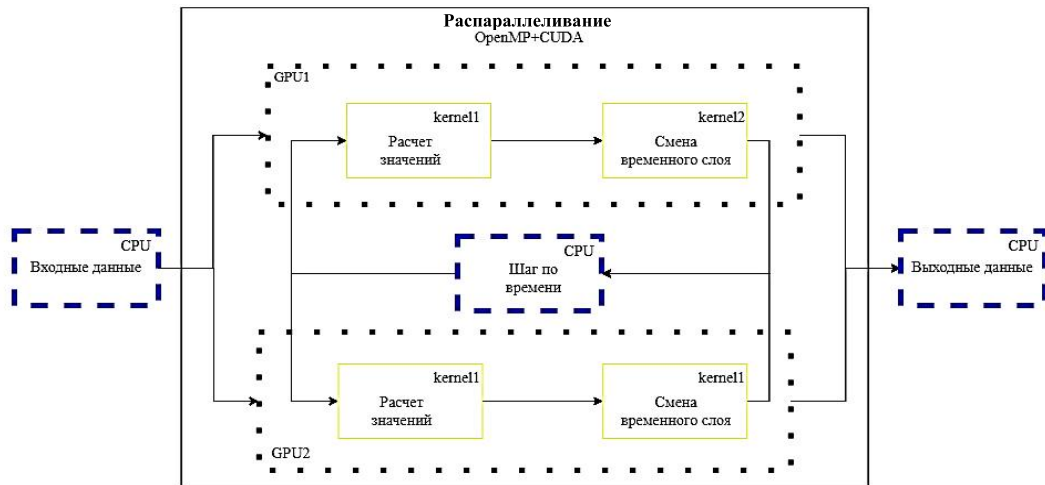


Рис. 2. Диаграмма потоков для двух графических ускорителей

Fig. 2. Graph of flows for two graphics accelerators

Расчетная часть программы выполняется параллельно на нескольких OpenMP потоках. В каждом из них обрабатывается собственная часть расчетной области на отдельном графическом ускорителе.

Такая архитектура удобна и легко масштабируема для большого числа сопроцессоров, что позволяет проводить численное моделирование больших расчетных областей с высокой разрешающей способностью. Для синхронизации работы потоков использована технология объединенной памяти (UnifiedMemory), которая образует общее адресное пространство для переменных как на центральном процессоре, так и на всех графических картах. Однако следует отметить недостаток такого подхода, выраженный в невысокой переносимости, т. к. технология объединенной памяти поддерживается не всеми GPU.

Основная вычислительная нагрузка алгоритма выполняется на графических ускорителях. Первым этапом запускается cuda-ядро для основных вычис-

лений. Значение этих величин для каждого расчетного узла вычисляется на отдельном cuda-потоке.

Вторым этапом происходит переход на следующий временной слой. Процедура интегрирования выполняется схемой предиктор-корректор.

Далее управление передается на CPU, где выполняется шаг по времени. Также при необходимости происходит выгрузка промежуточных данных.

В рамках работы принято решение об использовании только одного графического ускорителя в расчетной части программы. Это объясняется тем, что моделируемая область была небольшой, поэтому отсутствует необходимость разделять ее на части, как в предыдущих работах. Основные расчеты происходят на одной видеокарте, смена итерации на центральном процессоре, демонстрируя распараллеливание OpenMP. На рис. 3 представлена диаграмма потоков для разработанной программы с одной видеокартой.

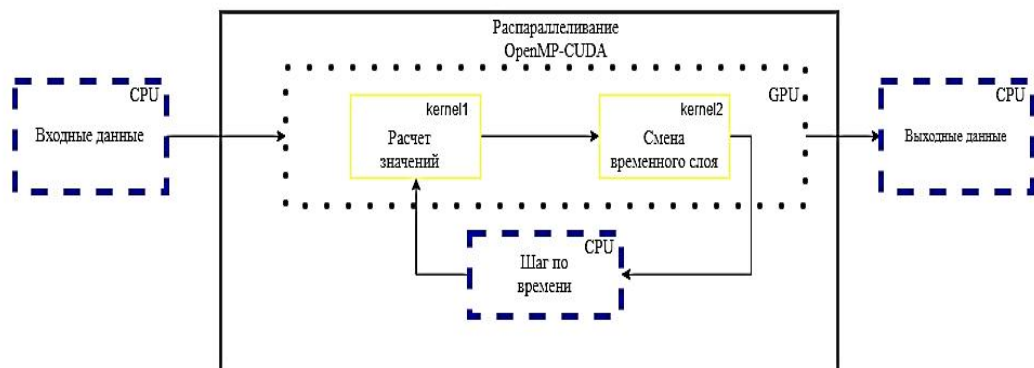


Рис. 3. Диаграмма потоков для одного графического ускорителя

Fig. 3. Graph of flows for one graphics accelerator

Для задачи выбраны следующие параметры области моделирования:  
 – размер расчетной области –  $5 \times 5$  м;  
 – пространственное разрешение – 0,05 м;

– плотность среды –  $1\,000 \text{ кг/м}^3$ ;  
 – скорость течения – 1 м/с.

На рис. 4 представлена область моделируемого водоема.



Рис. 4. Моделируемая область загрязнения нефтью

Fig. 4. Modeled area of oil pollution

У заданного источника загрязнения следующие параметры: плотность нефти составляет  $800 \text{ кг/м}^3$ , концентрация задана единицей. Это означает, что значения концентрации в ячейках расчетной области распределяются от 0 до 1.

Визуализация распределения концентрации примеси реализована графическим модулем, написанным на языке Python. По завершении работы расчетного модуля программы формируется файл, отражающий значения концентрации примеси в ячейках,

который передается в модуль визуализации и реализуется с помощью библиотеки matplotlib.

Общее время моделирования составляло 5 с. Результаты моделирования в разные моменты времени распространения нефти при аварии трубопровода представлены на рис. 5, 6, на которых демонстрируются пространственные распределения нефтяной примеси (по горизонтальной и вертикальной осям откладываются соответствующие пространственные координаты, м)).

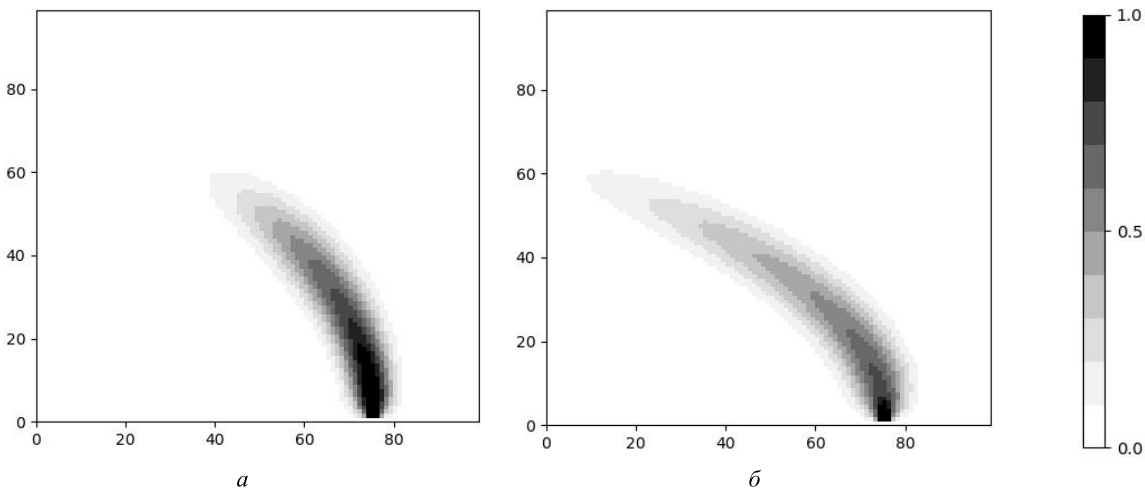


Рис. 5. Распределение концентрации примеси в начальный период времени:  $t = 2$  с (а);  $t = 3$  с (б)

Fig. 5. Distribution of impurity concentration in the initial period of time:  $t = 2$  s (a);  $t = 3$  s (b)

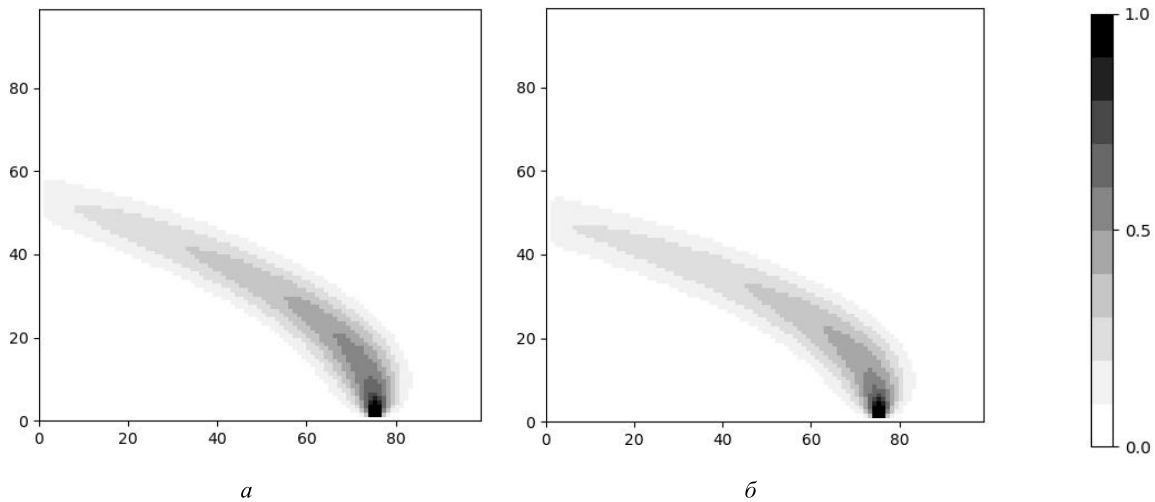


Рис. 6. Распределение концентрации примеси в конечный момент времени:  $t = 4$  с (а);  $t = 5$  с (б)

Fig. 6. Distribution of impurity concentration at the final moment of time:  $t = 4$  s (a);  $t = 5$  s (b)

Наибольшая концентрация нефти сосредоточена в начальный момент времени в месте разрыва трубы. Сначала нефть из-за разницы плотностей стремится наружу (вверх), но ее «сносит» по направлению течения с уменьшением концентрации у очага [4].

На рис. 6 концентрация у очага минимальна в связи с тем, что примесь «размывается» и нефть перестает транспортироваться после аварии.

На основе моделирования можно сделать вывод о качественном совпадении результатов численного эксперимента с данными, представленными другими исследователями. Однако для подтверждения адекватности реализации численной схемы необходимо в дальнейшем провести количественный анализ результатов увеличения моделируемой области [7, 8].

Также для будущих работ проведен эксперимент с различным диаметром отверстия для истечения [4]. Для расчета количества нефти, которая утекла, использовалась классическая формула утечки

$$Q = C_0 A \sqrt{2\rho(P_l - P_s)}, \quad (3)$$

где  $Q$  – массовый расход нефти;  $C_0$  – коэффициент истечения (рекомендуется 0,61);  $A$  – площадь скважины;  $\rho$  – плотность среды;  $P_l$  – фактическое давление в трубопроводе;  $P_s$  – давление среды.

На рис. 7 приведен график изменения скорости истечения нефти в зависимости от диаметра отверстия, вычисленного по формуле и путем компьютерного моделирования.

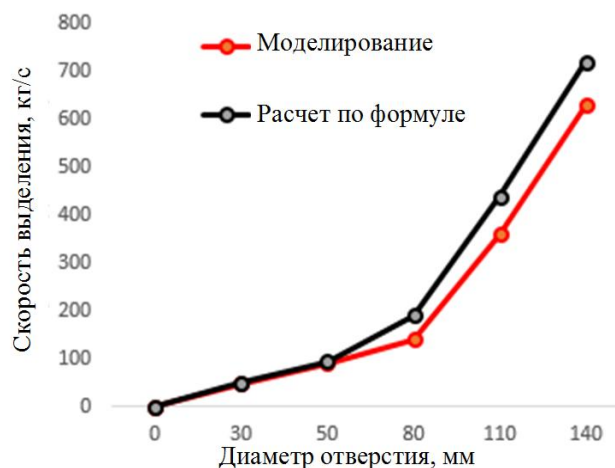


Рис. 7. Скорость выделения нефти при разном диаметре отверстий

Fig. 7. Oil release rate at different hole diameters

Скорость истечения, рассчитанная по формуле (3), выше, чем при моделировании, и разница в значении увеличивается с увеличением диаметра отверстия.

Полученные выводы совпадают с результатами других исследователей [4] и прошлыми работами [3, 7]. Погрешность может быть вызвана недостаточным количеством учитываемых параметров в модели. Полученные первичные результаты моделирования можно использовать для прогнозирования аварий и, соответственно, для их предотвращения.

### Заключение

Представлены результаты работы программного комплекса, разработанного на основе скрепления технологии распараллеливания потоков OpenMP и программно-аппаратной архитектуры CUDA для

численного моделирования динамики переноса примесей в сплошной среде. Использование графического процессора существенно увеличивает вычислительную производительность. Разработанное программное обеспечение может быть расширено на заданное количество графических ускорителей, что отражено в диаграммах потоков, а увеличение видеокарт, в свою очередь, позволит моделировать большие расчетные области. Получены результаты моделирования, которые указывают на хорошее пространственно-временное согласие и качественное совпадение с выводами других исследований. Также проведен сравнительный анализ скорости выделения нефти в зависимости от диаметра отверстия: через классическую формулу утечки и путем моделирования.

### Список источников

1. Соколовский Е. В., Кривко В. В., Торбенко А. Б. Выделение границ природных территорий, подлежащих специальной охране, средствами искусственных нейронных сетей // *Современные технологии в деятельности особо охраняемых природных территорий: геоинформационные системы, дистанционное зондирование земли: сб. тр. V Междунар. науч.-практ. семинара (Нарочь, 20–24 мая 2019 г.)*. Минск: ООО «Бинера», 2019. С. 127–129.
2. Федоткин И. М. Математическое моделирование технологических процессов. М.: Ленанд, 2015. 416 с.
3. Баскаков Е. В., Савин Е. С. Программный комплекс для численного моделирования динамики переноса примесей в атмосфере // XXVI Регион. конф. молодых ученых и исследователей Волгоград. обл. (Волгоград, 17–24 ноября 2021 г.): тез. докл. Волгоград: Изд-во Волгоград. гос. ун-та, 2022. С. 351–358.
4. Li X., Chen G., Zhu H. Modelling and assessment of accidental oil release from damaged subsea pipelines // *Marine Pollution Bulletin*. 2007. V. 123. P. 133–141.

5. Патанкар С. В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.
6. Сухинов А. И., Сидорякина В. В., Проценко Е. А., Проценко С. В. Численное моделирование воздействия ветровых течений на прибрежную зону крупных водохранилищ // *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2022. Т. 25, № 3. С. 15–30.
7. Храпов С. С., Агафонникова Е. О., Кликунова А. Ю., Радченко В. П., Баскаков Е. В., Савин Е. С., Маковеев И. С., Храпов Н. С. Численное моделирование самосогласованной динамики поверхностных вод, влекомых и взвешенных наносов: I. Влияние промышленной добычи песка на безопасность судоходства в русле р. Волга // *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2022. Т. 25, № 3. С. 31–57.
8. Храпов С. С. Численное моделирование самосогласованной динамики поверхностных и грунтовых вод // *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2021. Т. 24, № 3. С. 45–62.

### References

1. Sokolovskii E. V., Krivko V. V., Torbenko A. B. Vydelenie granits prirodnykh territorii, podlezhashchikh spetsial'noi okhrane, sredstvami iskusstvennykh neironnykh setei [Identification of boundaries of natural areas subject to special protection by means of artificial neural networks]. *Sovremennye tekhnologii v deiatel'nosti osobo okhraniaemykh prirodnykh territorii: geoinformatsionnye sistemy, distantsionnoe zondirovanie zemli: sbornik trudov V Mezhdunarodnogo nauchno-prakticheskogo seminar (Naroch', 20–24 maia 2019 g.)*. Minsk, OOO "Binera" Publ., 2019. Pp. 127-129.
2. Fedotkin I. M. *Matematicheskoe modelirovanie tekhnologicheskikh protsessov* [Mathematical modeling of technological processes]. Moscow, Lenand Publ., 2015. 416 p.
3. Baskakov E. V., Savin E. S. Programmnyi kompleks dlia chislennogo modelirovaniia dinamiki perenosa primesei v atmosfere [Software package for numerical simulation of dynamics of impurity transfer in atmosphere]. *XXVI Regional'naiia konferentsiia molodykh uchenykh i issledovatelei Volgogradskoi oblasti (Volgograd, 17–24 noiabria 2021 g.)*:

2022. Pp. 351-358.
4. Li X., Chen G., Zhu H. Modelling and assessment of accidental oil release from damaged subsea pipelines. *Marine Pollution Bulletin*, 2007, vol. 123, pp. 133-141.
5. Patankar S. V. *Chislennyye metody resheniia zadach teploobmena i dinamiki zhidkosti* [Numerical methods for solving problems of heat transfer and fluid dynamics]. Moscow, Energoatomizdat, 1984. 152 p.
6. Sukhinov A. I., Sidoriakina V. V., Protsenko E. A., Protsenko S. V. Chislennoe modelirovanie vozdeistviia vetrovykh techenii na pribrezhnuiu zonu krupnykh vodokhranilishch [Numerical modeling of impact of wind currents on coastal zone of large reservoirs]. *Matematicheskaiia fizika i komp'uternoe modelirovanie*, 2022, vol. 25, no. 3, pp. 15-30.
7. Khrapov S. S., Agafonnikova E. O., Klikunova A. Iu., Radchenko V. P., Baskakov E. V., Savin E. S., Makoveev I. S., Khrapov N. S. Chislennoe modelirovanie samosoglasovanoi dinamiki poverkhnostnykh vod, vlekomykh i vzveshen-



nykh nanosov: I. Vliianie promyshlennoi dobychi peska na bezopasnost' sudokhodstva v rusle r. Volga [Numerical modeling of self-consistent dynamics of surface waters, traction and suspended sediments: I. Influence of industrial sand mining on safety of navigation in Volga riverbed]. *Matematicheskaja fizika i komp'iuternoe modelirovanie*, 2022, vol. 25, no. 3, pp. 31-57.

8. Khrapov S. S. Chislennoe modelirovanie samosoglasovannoi dinamiki poverkhnostnykh i gruntovykh vod [Numerical modeling of self-consistent dynamics of surface and ground waters]. *Matematicheskaja fizika i komp'iuternoe modelirovanie*, 2021, vol. 24, no. 3, pp. 45-62.

Статья поступила в редакцию 04.03.2023; одобрена после рецензирования 06.06.2023; принята к публикации 10.07.2023  
The article was submitted 04.03.2023; approved after reviewing 06.06.2023; accepted for publication 10.07.2023

### **Информация об авторе / Information about the author**

**Евгений Владимирович Баскаков** – аспирант кафедры информационных систем и компьютерного моделирования; Волгоградский государственный университет; e.v.baskakov@volsu.ru

**Evgeny V. Baskakov** – Postgraduate Student of the Department of Information Systems and Computer Modeling; Volgograd State University; e.v.baskakov@volsu.ru

