

УДК 532.465, 519.63, 004.272.2

Maksym Sorokin¹, Researcher

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3165-6040> **e-mail:** maxim.sorockin@gmail.com

Mark Zheleznyak², Ph.D. (Physics and Mathematics), Professor

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7723-6052> **e-mail:** zheleznyak.m@gmail.com

Sergii Kivva¹, Ph.D. (Physics and Mathematics), Head Researcher

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-8570-6579> **e-mail:** skivva@gmail.com

Oleksandr Pylypenko¹, Researcher

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-6883-5018> **e-mail:** oi.pylypenko@gmail.com

¹Institute of Mathematical Machines and Systems Problems of NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²Institute of Environmental Radioactivity at Fukushima University, Japan

PARALLEL MODELING OF SEDIMENT AND RADIONUCLIDE TRANSPORT IN RIVERS ON MULTIPROCESSOR SYSTEMS AND GRAPHICS PROCESSORS

Abstract. The study aims to develop and implement parallel algorithms for modeling sediment and pollutant transport in rivers within the COASTOX-UN modeling system, utilizing multiprocessor systems and graphics processing units (GPUs). The modeling system includes a hydrodynamic module (COASTOX-HD), a sediment transport module (COASTOX-SED), and a radionuclide transport module (COASTOX-RN), which can also be adapted for other pollutants. The methodology is based on numerical solutions of two-dimensional shallow water equations and advection-diffusion transport equations using the finite volume method on unstructured grids. Parallel computing is implemented through MPI (for distributed-memory systems) and OpenACC (for GPUs). The system was tested for simulating radionuclide transport in the Kyiv Reservoir during the 1999 spring flood and assessing organic pollutant concentrations in the Dnipro River near Kyiv following transboundary contamination of the Desna River in autumn 2024. Results demonstrate high computational efficiency of the developed algorithms. The combination of MPI and OpenACC technologies in the parallelized COASTOX-UN model enables simulations of sediment and pollutant transport on detailed grids for large water bodies, running efficiently on workstations, servers, and even gaming PCs/laptops with powerful GPUs. GPU-based computations outperform professional workstations in efficiency. The study highlights COASTOX-UN's potential for operational pollution forecasting during emergencies. The key innovation lies in adapting parallel computing algorithms for both CPUs and GPUs, significantly reducing computational costs without compromising accuracy. Future research will expand COASTOX-UN's functionality for additional pollutant types and further assess risks of anthropogenic impacts on aquatic ecosystems.

Keywords: river contamination modeling, shallow water equations, finite volume method, parallel computing, GPU computing, MPI, OpenACC.

М.В. Сорокін¹, М.Й. Железняк², С.Л. Ківва¹, О.І. Пилипенко¹

¹Інститут проблем математичних машин і систем НАН України, м. Київ, Україна

²Інститут радіоактивності навколишнього середовища, Університет Фукусіма, Японія

ПАРАЛЕЛЬНЕ ДВОВИМІРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТРАНСПОРТУ НАНОСІВ І ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В РІЧКАХ НА БАГАТОПРОЦЕСОРНИХ СИСТЕМАХ І ГРАФІЧНИХ ПРОЦЕСОРАХ

Анотація. Метою дослідження є розробка та впровадження в інформаційно-моделюючу систему COASTOX-UN паралельних алгоритмів для моделювання транспорту наносів і забруднюючих речовин у річках з використанням багатопроцесорних систем і графічних процесорів (GPU). Система моделювання включає гідродинамічний модуль (COASTOX-HD), модуль транспорту наносів (COASTOX-SED) та модуль переносу радіонуклідів (COASTOX-RN), що може адаптуватися для розрахунків також інших забруднюючих речовин. Методологія дослідження базується на чисельному розв'язанні двовимірних рівнянь мілкої води і адвективно-дифузійних рівнянь переносу методом скінченних об'ємів на неструктурованих сітках. Для паралелізації обчислень використовуються технології MPI (для систем з розподіленою пам'яттю) та OpenACC (для GPU). Представлено приклади тестування системи для розрахунків розповсюдження радіонуклідів у Київському водосховищі під час весняного водопілля 1999 року, а також для оцінки концентрацій органічного забруднення на р. Дніпро біля м. Києва під час транскордонного забруднення р. Десна восени 2024 року. Результати дослідження демонструють високу обчислювальну ефективність розроблених алгоритмів. Показано, що поєднання технологій MPI та OpenACC у паралельній версії моделі COASTOX-UN дозволяє моделювати транспорт наносів та забруднюючих речовин на деталізованих сітках для великих водних об'єктів і на робочих станціях, серверах і на «ігрових» ПК/ноутбуках з потужними GPU. Обчислювальна ефективність технології на графічних процесорах перевищує показники професійних робочих станцій. Продемонстровано можливість використання моделі COASTOX-UN для оперативного прогнозування забруднення водойм, зокрема під час надзвичайних ситуацій. Оригінальність дослідження в поєднанні технологій адаптації алгоритмів паралельних обчислень для CPU і GPU, що надає користувачам можливість зниження витрат часу на обчислювальні ресурси без втрати точності. Подальші дослідження будуть спрямовані на розширення функціоналу COASTOX-UN для інших типів забруднювачів і подальші оцінки ризиків антропогенних впливів на водні екосистеми.

Ключові слова: моделювання річкових систем, рівняння мілкої води, метод скінченних об'ємів, паралельні обчислення, обчислення на GPU, MPI, OpenACC.

<https://doi.org/10.32347/2411-4049.2025.3.61-75>

Вступ

Наша публікація є продовженням статті [1], в якій представлені паралельні алгоритми гідродинамічного модуля системи моделей COASTOX-UN, що базується на чисельному розв'язанні двовимірних рівнянь мілкої води (PMB) методом скінченних об'ємів. Модель COASTOX почала розроблятися після аварії на Чорнобильській АЕС для прогнозування транспорту радіонуклідів у розчині на завислих наносах у водоймах басейну р. Дніпро [2]. На основі цього досвіду наступні версії моделі були включені в Модуль Гідрологічної Дисперсії радіонуклідів системи підтримки прийняття рішень

RODOS/JRODOS, яка розробляється з початку 90-х років в проєктах рамкових науково-дослідних програм ЄС [3]. Модель COASTOX також успішно використовувалась для розрахунку розповсюдження цезію-137 в японських водосховищах, забруднених після аварії на АЕС Фукусіма Дайїчі [4], а також для оцінки впливів військових дій на стан дніпровських водосховищ [5].

Новим етапом розвитку стало впровадження в COASTOX паралельних алгоритмів, які дозволили значно прискорити розрахунки на відносно недорогих комп'ютерах, але з потужними графічними процесорами (GPU). Огляд сучасних інформаційних технологій паралельних обчислень стану водних систем на GPU представлено, наприклад, в [1, 6]. Алгоритми розпаралелювання чисельних схем розв'язку рівнянь гідродинамічного модуля COASTOX-HD системи COASTOX-UN використовують програмне середовище MPI+OpenACC для багатопроцесорних робочих станцій і серверів, а також GPU [1]. Для задач транспорту наносів і радіонуклідів, чи інших забруднень в COASTOX використовується чисельне розв'язання двовимірних рівнянь адвективно-дифузійного переносу з додатковими членами типу «джерело-стік» для опису міжфазних обмінів. Радіонукліди у воді існують у розчиненій формі та адсорбованими на наносах. Огляд сучасних методів параметризації обмінів між радіонуклідами в розчині, на наносах і в дні представлений в [4].

В даній статті викладаються методи розпаралелювання моделі транспорту наносів і переформування берегів – COASTOX-SED і моделі переносу радіонуклідів і радіоактивного забруднення дна – COASTOX-RN, яка з відповідними параметрами може використовуватися і для інших хімічних забруднень. Модель тестується на прикладі задачі розрахунку розповсюдження стронцію-90 в Київському водосховищі, під час весняної повені 1999 року. Наведені результати моделювання оцінки впливу скидів з Київської ГЕС на можливість розбавлення органічного забруднення, яке поступало з р. Десна в р. Дніпро біля м. Києва.

Основні рівняння моделей

Нелінійні двовимірні рівняння мілкої води (ПМВ) і використані в COASTOX-HD алгоритми їх чисельного паралельного розв'язання представлено в [1]. Течії призводять до розмиву донних відкладів, перенесення наносів потоком і перевідкладення з переформуванням донного рельєфу. Ці процеси в COASTOX-UN описуються на основі збереження маси донних відкладів за допомогою двовимірного адвективно-дифузійного рівняння переносу частинок потоком рідини:

$$\frac{\partial(hS)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(q_i S) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(h D_{ij} \frac{\partial S}{\partial x_j} \right) + (Q_e - Q_d), \quad (1)$$

разом з рівнянням ерозії/осадження (аналог рівняння Екснера):

$$(1 - \phi) \rho_b \frac{\partial \eta}{\partial t} = -(Q_e - Q_d), \quad (2)$$

де S – осереднена по глибині концентрація наносів у воді (кг/м³); D_{ij} – компоненти коефіцієнта горизонтальної дифузії; ρ_b – густина донних відкладень; ϕ – пористість верхнього донного шару; Q_e і Q_d – швидкості ерозії і осадження (маса наносів з одиниці площі в одиницю часу); h – глибина води,

яка визначається відмітками дна η і вільної поверхні води ξ відносно незбуреного рівня води ($h = \xi - \eta$); u , v означимо x та y компоненти осередненої по глибині швидкості потоку; $q_x = uh$, $q_y = vh$.

Q_e і Q_d в формулах (1), (2) мають сенс повних швидкостей ерозії і осадження, що виражаються через рівноважну осереднену по глибині концентрацію наносів S^* і фактичну концентрацію S [2]:

$$Q_e - Q_d = \beta w_0 (S^* - S), \quad (3)$$

де w_0 – швидкість осадження частинок (гідравлічна крупність); β – коефіцієнт розмиву, який є калібрувальним параметром, так як включає і відношення придонної концентрації наносів до осередненої по глибині концентрації і екрануючі властивості розмиву поверхні дна річкових потоків.

В COASTOX-UN рівноважна концентрація виражається через повну транспортувальну ємність потоку наносів (завислих та донних разом) і може розраховуватись за декількома відомими формулами: Van Rijn, Soulsby, Camenen & Larsen [7].

На перенос радіонуклідів у водному середовищі впливає багато факторів, таких як адвекція-дифузія розчинених радіонуклідів, адвекція-дифузія радіонуклідів, що адсорбовані завислими частинками, осадження та підйом з дна забруднених частинок, дифузія між поровою водою верхнього донного шару та водною товщею, сорбція-десорбція радіонуклідів між водою та завислими частками та між водою та донними відкладами, поглинання радіонуклідів живими організмами [4].

В моделі COASTOX-UN транспорт радіонуклідів у розчинній формі розраховується двовимірним адвективно-дифузійним рівнянням:

$$\frac{\partial(hC)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(h D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \lambda h C - a_s h S (k_a^s \rho_b^{-1} C - C_s) - (1 - \phi) Z_* a_b (k_a^b C - C_b), \quad (4)$$

де C – об'ємна осереднена по глибині концентрація радіонуклідів у розчинній формі (Бк/м³); C_s – концентрація радіонуклідів на завислих наносах (Бк/кг); C_b – об'ємна концентрація радіонуклідів у верхньому донному шарі (Бк/м³); Z_* – товщина верхнього активного донного шару; λ – константа радіоактивного напіврозпаду; k_a^s і k_a^b – безрозмірні коефіцієнти розподілу в системі «вода – завислі частинки» і «вода – верхній донний шар»; a_s і a_b – відповідно швидкості обміну для цих систем.

Великий обсяг експериментальних даних, накопичених за останні роки після аварії на Чорнобильській АЕС, свідчить про те, що характерні часи десорбції довші за характерні часи адсорбції. Щоб врахувати цю різницю в характерних часах, швидкості обміну у рівнянні (4) та далі формулюються у вигляді [8]:

$$a_s = \begin{cases} a_{12}, k_a^s \rho_b^{-1} C > C_s \\ a_{21}, k_a^s \rho_b^{-1} C < C_s \end{cases}, a_b = \begin{cases} a_{13}, k_a^b C > C_b \\ a_{31}, k_a^b C < C_b \end{cases}, \quad (5)$$

де a_{12} , a_{13} – коефіцієнти швидкості адсорбції відповідно для систем «вода – завислі частинки» та «вода – верхній донний шар»; a_{21} , a_{31} – коефіцієнти швидкості десорбції для тих самих систем.

До адвективно-дифузійного рівняння транспорту радіонуклідів на завислих частинках додається член типу джерело-стік, що описує процеси обміну з дном за рахунок розмиву дна і осадження забруднених частинок:

$$\frac{\partial(hSC_s)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(q_i SC_s) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(hD_{ij}\frac{\partial SC_s}{\partial x_j}\right) - \lambda h SC_s + a_s h S(k_d^s \rho_b^{-1} C - C_s) + Q_e \rho_b^{-1} C_b - Q_d C_s. \quad (6)$$

Забруднення верхнього донного шару описується рівнянням:

$$(1 - \phi) \frac{\partial}{\partial t}(Z_* C_b) = -\lambda(1 - \phi) Z_* C_b + (1 - \phi) a_b Z_* (k_d^b C - C_b) - (Q_e \rho_b^{-1} C_b - Q_d C_s). \quad (7)$$

Розроблені чисельні алгоритми розв'язання рівнянь моделі

Для чисельного розв'язання рівнянь в часткових похідних моделі COASTOX-UN використовується метод скінченних об'ємів. Для гідродинамічного модуля чисельну схему його реалізації для PMB – TVD-схему Годуновського типу для неструктурованих сіток – представлено в [1].

Моделі системи COASTOX-UN використовують єдину розрахункову сітку – неструктуровану сітку з трикутними комірками [1]. Гідродинамічні змінні, концентрації наносів і радіонуклідів визначаються у центрах комірок, рівень дна задається у вузлах сітки, потоки через границі між комірками – у серединях сторін трикутників.

В даній роботі чисельну схему для PMB адаптовано для розв'язку транспортних рівнянь (1), (4), (6). Після інтегрування рівнянь переносу (1), (4), (6) по трикутних комірках розрахункової сітки утворюється система алгебраїчних рівнянь, у яких наближені значення часових похідних від концентрацій виражаються через суми потоків через сторони та осереднене по комірці значення вектора вільних членів:

$$\Delta A \frac{\Delta h X}{\Delta t} = -\sum_{k=1}^3 X \cdot \mathbf{n}_k \Delta l_k + \sum_{k=1}^3 \mathbf{F}_k^d \cdot \mathbf{n}_k \Delta l_k + \Delta AR, \quad (8)$$

де Δt – часовий крок, ΔA – площа контрольного об'єму, $\mathbf{n}_k$ – одинична нормаль до сторони k ($\mathbf{n} = (n_x, n_y)$), Δl_k – довжина сторони k . Тут X – одна з концентрацій: S, C, SC_s ; R – вільний член, що відповідає рівнянням (1), (4), (6).

Для обчислення дифузійних потоків через границі контрольного об'єму в (8) використовується центральна різницева апроксимація. Для адвекції застосовано варіант схеми SEA (Simple Efficient Algorithm) для неструктурованих сіток, яка використовується в [1] для PMB. Її адаптовано до транспортних рівнянь. Згідно з цією схемою, на етапі предиктора використовується upwind-апроксимація адвективного потоку, а на етапі коректора – downwind-апроксимація. Комбінація потоків низького та високого порядків здійснюється з використанням TVD-обмежувача: minmod, superbee, van Leer, MC.

Отримана в результаті чисельна схема для адвекції-дифузії у рівняннях переносу є монотонною, що підтримує початковий розподіл концентрації домішки при розповсюдженні її у воді за відсутності дифузії.

Врахування членів типу джерело-стік у рівняннях транспорту наносів відбувається одночасно з розв'язанням рівняння динаміки дна, а в рівняннях переносу радіонуклідів – одночасно з рівнянням забруднення верхнього шару дна. Рівняння змін відміток дна (2) і рівняння забруднення верхнього шару дна (7) не містять просторових похідних, часові похідні в них апроксимуються із першим порядком точності, праві частини цих рівнянь і члени джерело-стік у рівняннях переносу трактуються неявно.

Рівняння забруднення верхнього шару дна разом із рівнянням переносу розчинених радіонуклідів та рівнянням переносу радіонуклідів на завислих частинках утворюють зв'язану систему трьох рівнянь. Для її розв'язання використовується метод Крамера, незалежно для кожної комірки розрахункової сітки.

Чисельні схеми рівнянь динаміки наносів і радіонуклідів сформульовані на мові програмування FORTRAN, так само, як і решта коду системи COASTOX-UN.

Впроваджені технології паралельних обчислень

Для паралельного розв'язку рівнянь моделей COASTOX-SED і COASTOX-RN використовується підхід, розроблений у [1] для PMB. Рівняння моделей -SED і -RN представляють собою рівняння типу адвекції-дифузії і кінетичні рівняння, які є звичайними диференційними рівняннями відносно часу. Чисельні схеми розв'язку цих рівнянь реалізовано в програмному коді у вигляді циклів по елементах розрахункової сітки. Представлений у [1] алгоритм використовує незалежність ітерацій цих циклів по елементах сітки при обчисленні гідродинамічних змінних і потоків, а також локальність шаблонів чисельних схем. Він є гібридним і поєднує технології MPI та OpenACC, що дозволяє застосовувати його як на комп'ютерах з розподіленою пам'яттю (наприклад, кластерах), так і на комп'ютерах із загальною пам'яттю – багатоядерних робочих станціях та графічних процесорах.

Для систем із розподіленою пам'яттю розпаралелення будується на розділенні розрахункової області на підобласті за допомогою бібліотеки розбиття графів METIS. Кожен процесор або обчислювальний вузол паралельної системи виконує обчислення у межах своєї підобласті, а обмін даними між ними реалізовано на основі бібліотеки MPI.

Шаблони чисельних схем для моделей -SED і -RN не створюють нових інформаційних залежностей порівняно зі схемами для PMB. Тому структури halo-елементів, типи даних MPI та функції обміну, розроблені для PMB [1], використовуються і для нових моделей. Таким чином, розпаралелювання моделей -SED і -RN зводиться до додавання функцій обміну даними у відповідних halo-елементах після оновлення значень змінних у вузлах, комірках або на сторонах комірок.

Так, наприклад, при розв'язанні трьох рівнянь переносу (наносів, розчинених радіонуклідів, радіонуклідів на частинках) за адаптованою схемою SEA обміни даними додаються у такому порядку:

- Етап предиктора:
 - Розраховуються граничні потоки наносів/радіонуклідів.
 - Розраховуються дифузійні потоки.
 - Розраховуються адвективні потоки (upwind).

- Виконується корекція потоків, щоб не було перевитрати маси.
- Розраховується зміна концентрації за рахунок адвекції і дифузії.
- **Оновлюються концентрації в halo-комірках.**
- Етап коректора:
 - Розраховуються граничні потоки наносів/радіонуклідів.
 - Розраховуються адвективні потоки (downwind).
 - **Оновлюються адвективні потоки у halo-ребрах.**
 - Виконується TVD корекція потоків.
 - Виконується корекція потоків, щоб не було перевитрати маси.
 - Розраховується зміна концентрації за рахунок адвекції.
 - **Оновлюються концентрації в halo-комірках.**

Паралелізація алгоритмів COASTOX-UN для багатоядерних комп'ютерів і GPU також використовує незалежність ітерацій поелементних циклів. Для цього в [1] було запроваджено багатопотоковий підхід на основі OpenACC. Директиви OpenACC вказують компілятору, що підтримує цю технологію, які ділянки коду (зокрема ітерації циклів) слід розподіляти між потоками, що обчислюються паралельно ядрами процесора.

Принцип розпаралелювання рівнянь переносу і кінетики залишається тим самим, як і для РМВ. Поелементні цикли чисельних схем цих рівнянь оформлюються директивами OpenACC відповідно до стилю, описаного в [1]:

!\$ACC DATA PRESENT(імена глобальних масивів)

!\$ACC KERNELS

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

Тіло циклу

!\$ACC END KERNELS

!\$ACC END DATA

Перед стартом ітераційного процесу за часом масиви змінних, що використовуються у цих рівняннях, додатково копіюються на GPU за допомогою директив **!\$ACC DATA COPY(...)** або **COPYIN(...)**. Перед виводом змінних у зовнішні файли ці масиви змінних, разом з гідродинамічними змінними, копіюються з GPU до центрального процесора за допомогою директив **!\$ ACC UPDATE HOST(...)**.

Результати тестування обчислювальної ефективності паралелізації модуля транспорту радіонуклідів та інших забруднювальних речовин

Тестування проводилось на наступному обладнанні:

- Двохпроцесорна робоча станція Dell Precision Workstation 7920 з 20-ядерними процесорами Intel Xeon Gold 6230, із тактовою частотою 2.1 ГГц і оперативною пам'яттю 96 ГБ (ціна близько \$15 000 доларів). Операційна система станції – Windows 10 Pro for Workstations. Для компіляції та збірки виконуваного файлу COASTOX-HD використовувався компілятор Intel Fortran Compiler 19.0.4.245 разом із бібліотекою Intel MPI Library 4.0.

- Графічна карта NVIDIA GeForce RTX 3080, архітектури Ampere, із 8704 ядрами частотою 1.71 GHz та 10 GB оперативної пам'яті. Пікова продуктивність – 29.77 TFLOPS на одинарній точності і 465.1 GFLOPS на подвійній точності, пропускна здатність пам'яті – 760.3 GB/s. Карта встановлена на ПК із операційною системою Linux Ubuntu 20.04 LTS. Для збірки виконуваного файлу для GPU під Linux використовувався компілятор, що підтримує технологію OpenACC – NVIDIA Fortran 22.1-0.

Валідація моделі на прикладі розповсюдження стронцію-90 у Київському водосховищі під час весняного водопілля 1999 р.

Для тестування паралельного модуля переносу радіонуклідів COASTOX-UN були використані дані вимірів динаміки ^{90}Sr у р. Прип'ять біля м. Чорнобиль, в р. Дніпро біля впадіння в Київське водосховище та у Київському водосховищі біля греблі Київської ГЕС [9-11]. Карта забруднення дна ^{90}Sr для моделювання перераховувалась з карти забруднення дна ^{137}Cs , розробленої Українським гідрометеорологічним інститутом ДСНС і НАНУ та опублікованої на рис. 4.32 у [9]. Моделювання 91 дня динаміки радіонуклідів, починаючи з 01.03.1999 р., проводилось при заданому наборі параметрів для ^{90}Sr , рекомендованих у Звіті проєкту RODOS [8].

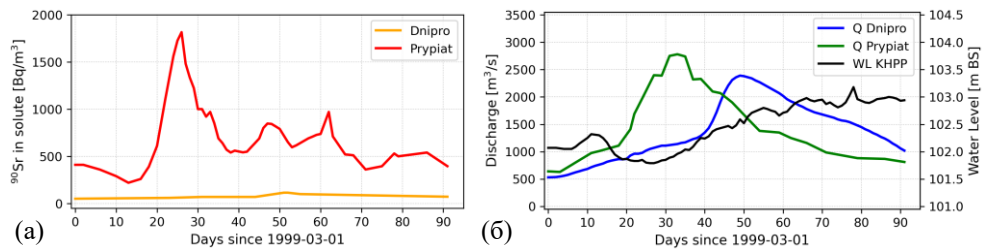


Рис. 1. Концентрація ^{90}Sr у р. Прип'ять та р. Дніпро біля впадіння в Київське водосховище (а), а також витрати води в річках і рівень води на Київській ГЕС (б) з 01.03.1999 р., які використовувались як граничні умови моделі COASTOX-UN

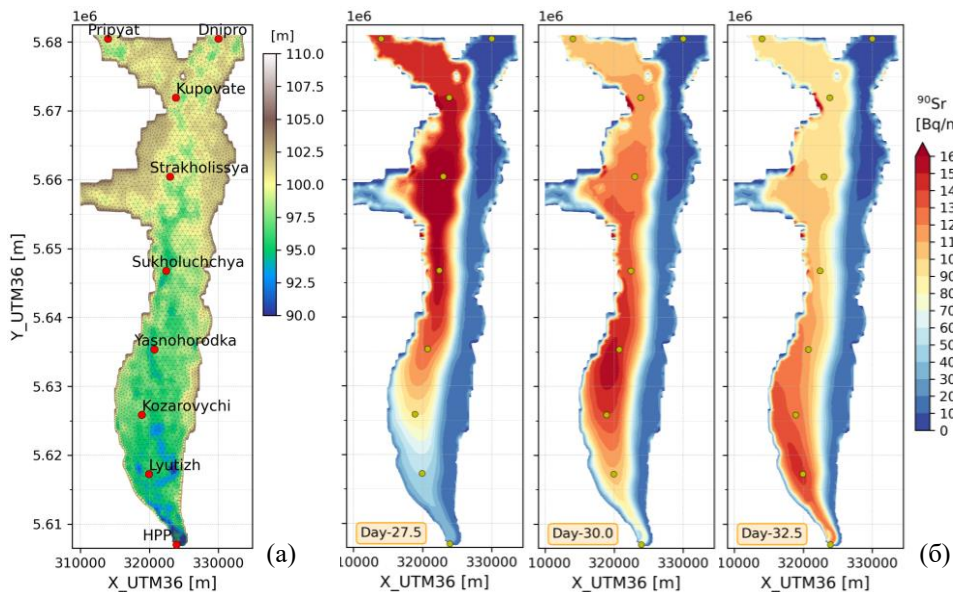


Рис. 2. Карта відміток дна в Київському водосховищі на розрахунковій сітці моделі (а) і розподіл обчислених концентрацій ^{90}Sr на 27.5, 30 і 32.5 день від 1.03.1999 р. (б).

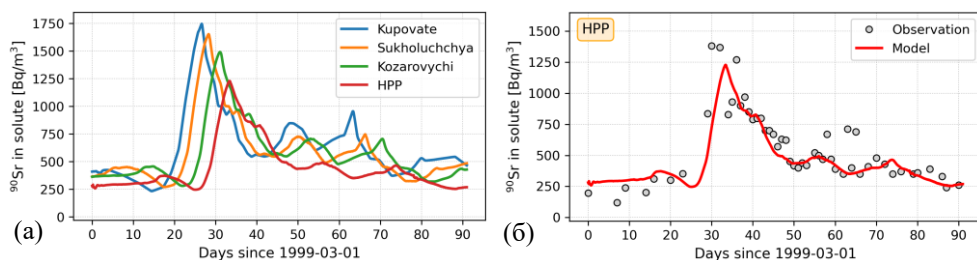


Рис. 3. (а) Розрахована часова динаміка концентрації ^{90}Sr вздовж старого фарватеру Дніпра (Рис. 2 а). (б) Динаміка концентрації біля греблі ГЕС в порівнянні з даними вимірів, представленими в [10]

Порівняння результатів моделювання розповсюдження ^{90}Sr в Київському водосховищі з даними вимірів (Рис. 3) демонструє, що розрахована динаміка часових змін концентрацій ^{90}Sr і максимальні значення концентрацій є близькими до експериментальних даних.

У Табл. 1 наведено час моделювання 1 дня для обраного 91-денного сценарію на графічній карті NVIDIA RTX 3080 та 2-процесорній 40-ядерній робочій станції Dell 7920 у непаралельному та паралельному (MPI) режимах. Для MPI-реалізації вказано мінімальний час, досягнутий при оптимальній кількості процесів.

Таблиця 1. Параметри ефективності моделі паралельних обчислень для сценарію «Київське водосховище, водопілля 1999 р.»

Число комірок	Час розрахунку, хв				Прискорення			Відносно MPI	
	Dell 7920		RTX 3080		Dell MPI	RTX 3080		RTX 3080	
	Serial	MPI	DP	SP		DP	SP	DP	SP
7 594	3.4	0.66	1.36	1.29	5.19	2.50	2.63	0.48	0.51
30 376	27.4	2.88	3.07	2.69	9.51	8.95	10.20	0.94	1.07
486 016	2447	131.7	40.3	24.9	18.58	60.78	98.45	3.27	5.30
1 944 064	21245	1268	237.1	136.3	16.76	89.60	155.85	5.35	9.30
7 776 256	162172	9786	1657	1216	16.57	97.85	133.38	5.90	8.05

Розрахунки на GPU виконувалися як у подвійній (DP), так і в одинарній (SP) точності, що пов'язано з вищою заявленою продуктивністю відеокарт для SP. Для аналізу залежності ефективності паралельних обчислень від розміру розрахункової сітки було використано базову сітку з 7 594 комірки та чотири додаткові сітки, отримані шляхом послідовного поділу кожної трикутної комірки на чотири (збільшення деталізації). Важливо зауважити, що зростання часу моделювання при збільшенні розмірів сітки обумовлено не лише збільшенням кількості комірок, а й необхідністю зменшення часового кроку відповідно до умови Куранта.

MPI-реалізація демонструє ефект насичення: для сіток з понад 100 тис. комірок прискорення досягає 17–18 разів порівняно з непаралельною версією. Однак для сіток із кількома мільйонами комірок використання MPI стає неефективним через надмірний час обчислень (перевищення реального часу моделювання).

GPU-версія також має ефект насичення. Для малих сіток (до 100 тис. комірок) вона поступається MPI, але для більших сіток переважає за продуктивністю. Наприклад, для сітки з понад 1 млн комірок: у подвійній точності GPU у 5 разів швидший за MPI, в одинарній точності – у 8–9 разів. Навіть для сітки розміром ~2 млн комірок GPU забезпечує моделювання швидше за реальний час.

Згідно з нашим досвідом використання моделі COASTOX-UN для задач гідравліки та перенесення забруднень, відмінності між результатами в подвійній та одинарній точностях є меншими за похибки експериментальних вимірів. Це дозволяє рекомендувати одинарну точність для подібних розрахунків без втрати достовірності результатів.

Застосування моделі для оцінки сценаріїв розповсюдження органічного забруднення р. Дніпро у вересні-жовтні 2024 року

В середині серпня 2024 року на прикордонних ділянках р. Сейм були виявлені високі рівні забруднення органічними речовинами, що надходили з транскордонним водним потоком із території РФ. Виникла загроза перенесення забруднення Десною до водозабору м. Київ та потрапляння у р. Дніпро в межах м. Києва. Для прогнозу забруднення вод Дніпра біля Києва двовимірну гідравлічну модель COASTOX-HD, що раніше використовувалась для прогнозування зон затоплень під час високих повеней [1], було доповнено модулем прогнозу динаміки забруднень COASTOX-RN.

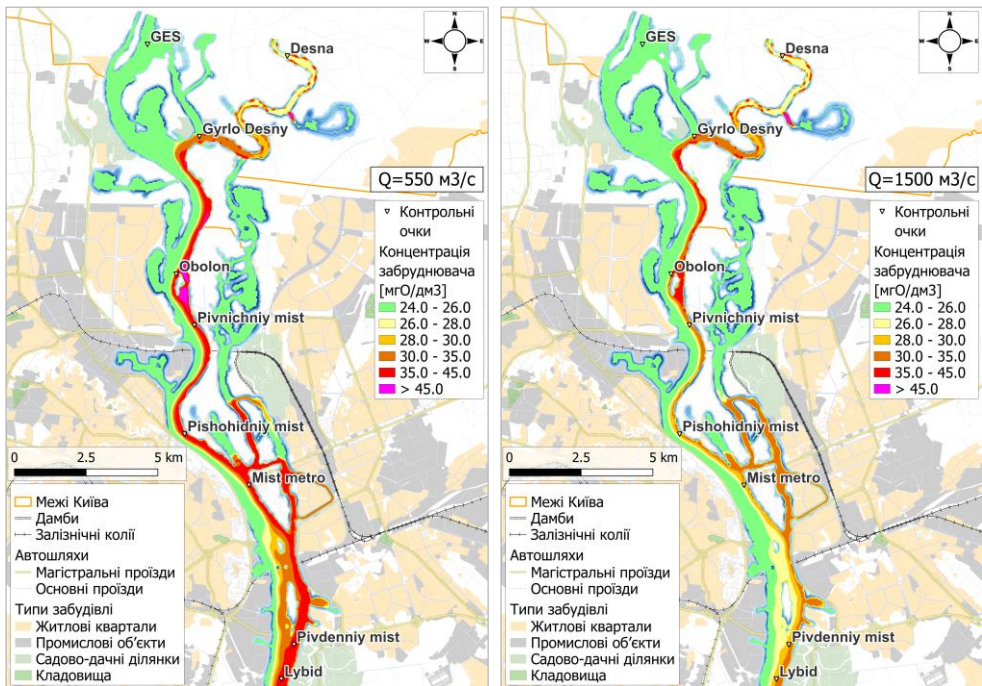


Рис. 4. Розподіл концентрації забруднювача для різних величин скидів КиївГЕС. Район Дніпра від греблі ГЕС до гирла р. Либідь. 6-й день від початку моделювання

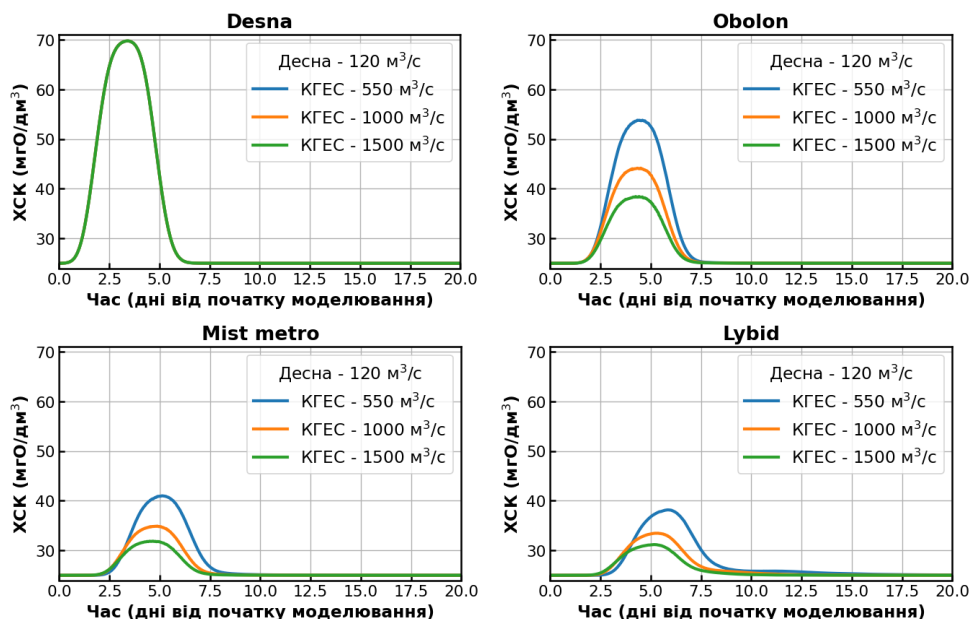


Рис. 5. Часова зміна концентрації забруднювача для різних величин скидів КиївГЕС в контрольних точках «Десна», «Оболонь», «міст Метро», «Либідь»

Вхідними перерізами для області моделювання були гребля Київської ГЕС та гирло р. Десна (Рис. 4), в перерізі якого задавалися сценарні концентрації забруднення. За прогностичними «оцінками зверху» пік концентрації ХСК у воді, що досягла гирла Десни, склав 70 мгО/дм^3 , а тривалість перевищення фонові концентрації становила приблизно 5 днів.

Для гідрологічної ситуації, актуальної на вересень, рівень Канівського водосховища становив 91.21 м БС, витрата Десни – $120 \text{ м}^3/\text{с}$, а середній скид води з Київської ГЕС – $550 \text{ м}^3/\text{с}$. Додатково розглядалися сценарії підвищених попусків із Київської ГЕС ($1000 \text{ м}^3/\text{с}$ та $1500 \text{ м}^3/\text{с}$) як можливий захід для зниження концентрації забруднювальних речовин у Дніпрі. Фонова концентрація ХСК у Дніпрі була задана сталою – 25 мгО/дм^3 .

Порівняння розподілів концентрації ХСК у Дніпрі для базового сценарію і для сценарію зі скидом Київської ГЕС $1500 \text{ м}^3/\text{с}$ показано на Рис. 4 разом з розташуванням контрольних точок моделі. Часову динаміку показника ХСК для обраних контрольних точок показано на Рис. 5, з якої видно перенесення забруднення та зниження пікової концентрації за течією Дніпра.

Часи добігу забруднення до контрольних точок у руслі Дніпра оцінені за різницею між часами піків концентрації в точках і у вхідному створі моделі. Вони наведені в Табл. 2. В таблиці також показані значення пікових концентрацій ХСК. Моделювання підтверджує, що підвищений попуск води з Київської ГЕС може бути засобом зниження концентрації забруднювальної речовини, що потрапляє в Дніпро з Десни, завдяки розбавленню більшими об'ємами води.

Таблиця 2. Максимальні концентрації ХСК та часи добігу плями забруднення від вхідного створу до контрольних точок моделі для сценаріїв різних скидів води з Київської ГЕС

Контрольна точка	Час добігу, год.			ХСК, мгО/дм³		
КГЕС Q, м³/с	550	1000	1500	550	1000	1500
Десна	0	0.0	0.0	69.7	69.7	69.7
Гирло Десни	14	13.0	15.0	66.7	65.3	61.5
Оболонь	28	26.0	24.0	53.8	44.2	38.4
Північний міст	33	27.0	23.0	48.0	40.1	35.8
Пішохідний міст	39	33.0	31.0	44.1	37.1	33.5
Міст Метро	41	35.0	30.0	41.0	34.9	31.9
Південний міст	55	41.0	41.0	38.2	33.5	31.2
Либідь	59	46.0	42.0	38.2	33.5	31.2

В розглянутому сценарії біля Північного мосту пікову концентрацію за результатами розрахунків можна було знизити на 34% за рахунок заданого попуску води з ГЕС. При зростанні витрат води через ГЕС з 550 до 1500 м³/сек також є можливість підвищити швидкість проходження плями забруднення Дніпром за межі Києва – біля Південного мосту час добігу забруднення скоротився також на 34%.

За даними моніторингу Держекоінспекції України суттєвого зниження РК в Дніпрі в межах Києва восени 2024 року не спостерігалось. За рахунок розпаду органічного забруднення на шляху від гирла Сейму в Десні максимальні концентрації ХСК в гирлі Десни не перевищили 50 мгО/дм³ з відповідним розбавленням водами Дніпра нижче за течією. Розроблена модель може бути використана в подальшому для прогнозування забруднення р. Дніпро органічними речовинами, а після відповідного доповнення – й іншими видами забруднювальних речовин.

Таблиця 3. Параметри ефективності моделі паралельних обчислень забруднення Дніпра

Обладнання		Час розрахунку, хв	Прискорення	Прискорення відносно MPI
Dell 7920	Serial (1 ядро)	1921.56	1	
	MPI (32 ядра)	112.14	17.14	1
RTX 3080	DP	63.46	30.28	1.77
	SP	36.38	52.82	3.08

У Табл. 3 наведено тривалості моделювання базового 20-денного сценарію на графічній карті NVIDIA RTX 3080 та на 2-процесорній 40-ядерній робочій станції в непаралельному та паралельному (MPI) режимах при розмірі розрахункової сітки в 152 112 комірок на 135 км довжини розрахункової області. Паралельна MPI-версія прискорює розрахунок приблизно у 17 разів (за використання 32 ядер – оптимальної кількості), забезпечуючи прийнятний час обчислення – близько 112 хв. Обчислення на графічній карті виявилось ще швидшим – приблизно 64 хв у подвійній точності (DP) та 37 хв в одинарній точності (SP) (прискорення приблизно у 30 та 53 рази відповідно).

Висновки

Поєднання технологій MPI та OpenACC у паралельній реалізації моделюючої системи COASTOX-UN дозволило досягти високої обчислювальної ефективності при моделюванні транспорту наносів і розповсюдження забруднюючих речовин на деталізованих сітках. Тестування показало, що навіть побутові комп'ютери з потужними GPU перевершують за продуктивністю професійні робочі станції. Валідація моделі проведена за даними моніторингу ^{90}Sr під час весняної повені 1999 року. Систему також застосовано для кількісної оцінки зменшення концентрацій забруднювачів у водах р. Дніпро біля Києва при транскордонному надходженні речовин із гирла р. Десна. Отримані результати підтверджують можливість використання COASTOX-UN для оперативного прогнозування забруднення водойм, зокрема в умовах надзвичайних ситуацій. Подальші дослідження передбачають розширення функціоналу моделі для інших типів забруднювачів, зокрема важких металів, розробку рекомендацій щодо оптимізації управління водними ресурсами в умовах надзвичайних екологічних ситуацій, адаптацію моделі для потреб інших регіонів України, зокрема придунайських територій та басейну Дністра. Реалізація цих напрямів дозволить створити ефективний інструмент для підтримки прийняття рішень у сфері охорони водних ресурсів та запобігання екологічним катастрофам.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Сорокін, М.В. (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. <https://doi.org/10.32347/2411-4049.2023.2.163-193>
2. Zheleznyak, M. J., Demchenko, R. I., Khursin, S. L., Kuzmenko, Y. I., Tkalic, P. V., Vitiuk, N. Y. (1992). Mathematical modeling of radionuclide dispersion in the Pripjat-Dnieper aquatic system after the Chernobyl accident. *Science of The Total Environment*, 112(1), 89–114. [https://doi.org/10.1016/0048-9697\(92\)90241-j](https://doi.org/10.1016/0048-9697(92)90241-j)
3. 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. <https://doi.org/10.1051/radiopro/2016048>
4. Zheleznyak, M., Kivva, S., Pylypenko, O., Sorokin, M. (2022). Modeling of Behavior of Fukushima-Derived Radionuclides in Freshwater Systems. In: Nanba, K., Konoplev, A., Wada, T. (eds) *Behavior of Radionuclides in the Environment III*. Springer, Singapore. 2022, 199–252. https://doi.org/10.1007/978-981-16-6799-2_11.
5. Коцюруба, 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), с. 5–14. <https://doi.org/10.33099/2311-7249/2024-51-3-5-14>
6. Vanzo, D., Peter S., Vonwiller L., Burgler M., Weberndorfer M., Siviglia A., Conde D., Vetsch D. (2021) Basement v3: a modular freeware for river process modelling over multiple computational backends. *Environmental Modelling Software*, 143, 105102. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2021.105102>
7. Camenen, B., Larson, M. (2007). A Unified Sediment Transport Formulation for Coastal Inlet Application. ERDC/CH: CR-07-1, US Army Corps of Engineers, 247 p.

8. Zheleznyak, M., Donchytz, G., Hygynyak, V., Marinetz, A., Lyashenko, G., Tklich, P., Treebushny, D., Kovalets, I. (2003). RIVTOX – one dimensional model for the simulation of the transport of radionuclides in a network of river channels. RODOS Report WG4-TN(97)05, 52 p. <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.4071.8241>
9. IAEA (2006). Radiological Conditions in the Dnieper River Basin: Assessment by an international expert team and recommendations for an action plan. STI/PUB/1230, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria. ISBN 92-0-104905-6, 200 p.
10. Voitsekhovitch, O., Zheleznyak, M. (2001). Countermeasure application, feasibility and analysis of their effectiveness as an aid for providing recommendations for improvement of modelling approaches: a Chernobyl case study. In: Implementing Computerised Methodologies to Evaluate the Effectiveness of Countermeasures for Restoring Radionuclide Contaminated Fresh Water Ecosystems, L. Monte (Ed.) ENEA. ISSN 1120 5555. 139-178.
11. Войцехович, О., Канівець, В., Кіреєв, С., Лаптев, Г., Обрізан С. (2016). Стан радіоактивного забруднення поверхневих вод. 30 Років Чорнобильської катастрофи (огляди). *Збірник інформаційно-аналітичних доповідей*. Київ: КІМ, 129-139.

Стаття надійшла до редакції 02.06.2025 і прийнята до друку після рецензування 01.09.2025

REFERENCES

1. Sorokin, M. V. (2023). Parallelization of numerical solutions of shallow water equations by the finite volume method for implementation on multiprocessor systems and graphics processors. *Environmental Safety and Natural Resources*, 46(2), 163–193 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.32347/2411-4049.2023.2.163-193>
2. Zheleznyak, M. J., Demchenko, R. I., Khursin, S. L., Kuzmenko, Y. I., Tklich, P. V., Vitiuk, N. Y. (1992). Mathematical modeling of radionuclide dispersion in the Pripyat-Dnieper aquatic system after the Chernobyl accident. *Science of The Total Environment*, 112(1), 89–114. [https://doi.org/10.1016/0048-9697\(92\)90241-j](https://doi.org/10.1016/0048-9697(92)90241-j)
3. 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. <https://doi.org/10.1051/radiopro/2016048>
4. Zheleznyak, M., Kivva, S., Pylypenko, O., Sorokin, M. (2022). Modeling of Behavior of Fukushima-Derived Radionuclides in Freshwater Systems. In: Nanba, K., Konoplev, A., Wada, T. (eds) *Behavior of Radionuclides in the Environment III*. Springer, Singapore. 2022, 199–252. https://doi.org/10.1007/978-981-16-6799-2_11.
5. Kotsyruba, V., Proshchyn, I., Sorokin, M. and Pylypenko, O. (2024). Improved method for forecasting the consequences of emergencies of a terrorist nature at hydraulic facilities. *Modern Information Technologies in the Sphere of Security and Defence*, 51(3), 5–14 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.33099/2311-7249/2024-51-3-5-14>
6. Vanzo, D., Peter, S., Vonwiller, L., Burgler, M., Weberndorfer, M., Siviglia, A., Conde, D., Vetsch, D. (2021). Basement v3: a modular freeware for river process modelling over multiple computational backends. *Environmental Modelling Software*, 143, 105102. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2021.105102>
7. Camenen, B., Larson, M. (2007). A Unified Sediment Transport Formulation for Coastal Inlet Application. ERDC/CH: CR-07-1, US Army Corps of Engineers, 247 p.
8. Zheleznyak, M., Donchytz, G., Hygynyak, V., Marinetz, A., Lyashenko, G., Tklich, P., Treebushny, D., Kovalets, I. (2003). RIVTOX – one dimensional model for the simulation of the transport of radionuclides in a network of river channels. RODOS Report WG4-TN(97)05, 52 p. <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.4071.8241>

9. IAEA (2006). Radiological Conditions in the Dnieper River Basin: Assessment by an international expert team and recommendations for an action plan. STI/PUB/1230, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria. ISBN 92-0-104905-6, 200 p.
10. Voitsekhovitch, O., Zheleznyak, M. (2001). Countermeasure application, feasibility and analysis of their effectiveness as an aid for providing recommendations for improvement of modelling approaches: a Chernobyl case study. In: Implementing Computerised Methodologies to Evaluate the Effectiveness of Countermeasures for Restoring Radionuclide Contaminated Fresh Water Ecosystems, L. Monte (Ed.) ENEA. ISSN 1120 5555. 139-178.
11. Voitsekhovitch, O., Kanivets, V., Kireev, S., Laptev, G., Obrizan, S. (2016). The state of radioactive contamination of surface waters. *30 Years of the Chornobyl Disaster (reviews). Collection of information and analytical reports*. Kyiv: KIM, 129-139 [in Ukrainian].

The article was received 02.06.2025 and was accepted after revision 01.09.2025

Сорокін Максим Вікторович

науковий співробітник Інституту проблем математичних машин і систем НАН України (ІПММС)

Адреса робоча: 03187 Україна, м. Київ, проспект Академіка Глушкова, 42

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3165-6040> **e-mail:** maxim.sorockin@gmail.com

Железняк Марк Йосипович

кандидат фізико-математичних наук, професор Інституту радіоактивності навколишнього середовища Університету Фукусіма, Японія

Адреса робоча: 960-1296, Японія, м. Фукусіма, Канаягава, 1

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7723-6052> **e-mail:** zheleznyak.m@gmail.com

Ківва Сергій Леонідович

кандидат фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник ІПММС НАН України

Адреса робоча: 03187 Україна, м. Київ, проспект Академіка Глушкова, 42

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-8570-6579> **e-mail:** skivva@gmail.com

Пилипенко Олександр Ігорович

науковий співробітник ІПММС НАН України

Адреса робоча: 03187 Україна, м. Київ, проспект Академіка Глушкова, 42

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-6883-5018> **e-mail:** oi.pylypenko@gmail.com