

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ РАСЧЕТОВ РЕГИОНАЛЬНЫХ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ РУДОНОСНЫХ ИЗОМЕТРИЧЕСКИХ СТРУКТУР В PYTHON

© 2024 С.Л. Шевырев, Н.Г. Борискина

*Дальневосточный геологический институт ДВО РАН, Владивосток, Россия, 690022;
e-mail: boriskina2000@mail.ru*

Поступила в редакцию 28. 04.2023; после доработки 11.01.2024; принята в печать 25.03.2024

Численные региональные геологические модели необходимы для реконструкции природы и условий формирования геологических структур, получения представлений об эволюции различных зон коры и верхней мантии территории исследований, развития складчатых и разрывных дислокаций, установления выраженности рудоносных структур центрального типа в рельефе земной поверхности. Реконструкции основываются на методах вычислительной динамики жидкостей, в которых реализуется представление о горных породах как о высоковязких жидкостях. Метод «маркеров-в-ячейках» («marker-in-cell») представляет собой одну из реализаций методик численного моделирования. В рамках проводимого исследования предложено ускорение работы моделей, портированных в Python, по сравнению с оригинальным исполнением на языке Matlab, без отказа от последовательного перебора маркеров. Показано, что вариантами решения могут быть либо векторизация кода (рефакторинг с использованием бинарных индексов вместо циклов перебора и функций `numpy`), либо увеличение скорости работы циклов путем их предварительной компиляции или параллельных вычислений. Полученные результаты могут быть использованы при реализации численных моделей геологических сред в Python.

Ключевые слова: минерагения, Python, маркеры-в-ячейках, численное моделирование, петрология.

ВВЕДЕНИЕ

Прогноз рудоперспективных структур и зон вулканоплутонических поясов Дальнего Востока России связан с выявлением закономерностей распределения проницаемых мантийных структур и интрузивов различного состава с учетом глубины их эрозионного среза (Фатьянов и др., 2010; Хомич, Борискина, 2013; Юшманов, Петрищевский, 2018). Структурный рисунок поверхности Земли контролируется глубиной эрозионного среза, который определяет вертикальную зональность оруденения гидротермальных и меднопорфировых месторождений (Ивин и др., 2018; Хомич, Борискина, 2018). Постановка детальных прогнозно-поисковых работ требует наличия первоначальных представлений о характере сопровождающих интрузию складчатых и разрывных нарушений, обнаруживающихся в морфоструктурах земной поверхности и выступающих в качестве поисковых признаков.

В качестве одного из средств проведения прогнозного минерагенического исследования выступает численное моделирование в современных средах научного программирования (Matlab/GNU Octave, Python и других). В работе (Gerya, 2019), посвященной введению в численное моделирование, на основе уравнений математической физики предложена модель (язык программирования Matlab), описывающая внедрение магматического тела и развитие сопровождающих ее дислокаций.

Оригинальная модель «маркеров-в-ячейках» («marker-in-cell», MIC) (Gerya, Yuen, 2003; Harlow, Welch, 1965) была портирована нами в язык Python для исследования оптимизации вычислений и отказа от использования коммерческой вычислительной платформы Matlab. Это хорошая замена проприетарных сред научных вычислений, имеющая значительное количество библиотек и широкую поддержку сообщества программистов и ученых. Выбор в пользу языка

Python в сравнении, к примеру, с R, сделан в связи с наличием в нем производительных библиотек для численных расчетов (*numpy*, *numba* и других), тогда как R предназначен, преимущественно, для анализа данных и машинного обучения (Python..., 2023).

Основной причиной невысокой относительной производительности кода Matlab мы видим в использовании большого количества циклов в текстовом интерпретаторе. В качестве возможных направлений увеличения производительности модели можно выделить векторизацию, то есть замену циклов прекомпилированными функциями и индексами Python там, где это возможно (Morra, 2018), и предварительную компиляцию (т. е. ускорение выполнения за счет автоматизированной трансляции программы Python на язык C и его последующей компиляции). Оригинальные коды Т. Геря (Gerya, 2009, 2019) отличаются открытостью, понятностью для ученых-программистов и возможностью внесения изменений.

Монографии Т. Геря (Gerya, 2009, 2019) произвели большое влияние на современные геодинамические и геотектонические исследования, а разработки используются для физического моделирования формирования тектонических дислокаций в различных обстановках тектонического цикла (Lavecchio et al., 2017; Moulas et al., 2018; Scmitt et al., 2023; Shi et al., 2018; Van Zelst et al., 2023; Zhong-Hai, Li, 2023) и геодинамических реконструкциях на основе полевых наблюдений (Kaatz, 2023), а также моделировании сейсмических зон (Goudarzi et al., 2023). На работы Т. Геря (Gerya, 2009, 2019) ссылаются, когда используют метод МС (Kortev et al., 2017) или сравнивают результаты применения альтернативных способов моделирования, таких как метод решеточных уравнений Больцмана (Mora et al., 2023). При этом, усиление эффективности и производительности вычислений не подвергается сколько-нибудь серьезному анализу, тогда как время выполнения программ может быть очень большим. В соответствии со сказанным, цель работы можно определить, как оптимизацию расчетов с помощью метода «маркер-в-ячейке» при программировании на языке Python и использовании доступных для этого языка средств оптимизации.

Задачами, решаемыми для достижения указанной цели явились: 1) подбор библиотек для реализации метода «маркер-в-ячейке» в Python; 2) подбор и тестирование средств оптимизации алгоритма «маркер-в-ячейке» и уменьшение времени выполнения программы, доступных в Python; 3) сравнение средств оптимизации и выбор оптимальных средств для дальнейшей реализации метода «маркер-в-ячейке» в Python.

В качестве объекта исследований направлений оптимизации выбрана предложенная Т. Геря (Gerya, 2009) простая модель вязкого гравитационного течения двух вертикальных слоев.

МЕТОДИКА, ОБЪЕКТЫ И МАТЕРИАЛЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследование тектонических структур, наблюдаемых в дистанционном изображении Земли, проводимое для хорошо изученных геологических объектов, может быть использовано при разработке методической основы регионального прогноза полезных ископаемых с переносом на менее изученные площади. Малиновская кольцевая структура и связанная с ней Малиновская рудно-магматическая система расположены в пределах Восточно-Сихотэ-Алинского вулканоплутонического пояса в зоне сопряжения Самаркинского (юрского) и Журавлевского (раннемелового) террейнов (Сахно и др., 2013; Степанов и др., 2013; Шевырев, Шевырева, 2016).

Малиновская кольцевая структура находится в зоне влияния Центрального Сихотэ-Алинского разлома, разделяющего Самаркинский и Журавлевский террейны (Шевырев, Шевырева, 2016 см. рис. 1) и представляет собой почти правильную окружность диаметром около 5 км, наблюдаемую в дистанционном изображении и образованную меандрирующими рекой Малиновкой и ручьем Намовым, в центре кольцевой структуры присутствует гора Маячная (894.2 м) (рис. 1а).

В геологическом отношении Малиновская рудно-магматическая система представляет собой интрузив габбро-диоритов сеноманского возраста, внедрившийся в песчано-сланцевые толщи нижнего мела. Габброиды прорваны дайками андезитов, андезибазальтов и базальтов маастрихтского вулканического комплекса. В пределах поднятия присутствуют разрывные нарушения радиального и концентрического строения. Штокверковое и жильное золото-сульфидно-кварцевое оруденение связано с пироксеновыми и биотит-двопироксеновыми монцогаббро-диоритами, монцонитами, диоритами и кварцевыми монцодиоритами (Степанов и др., 2013). Анализ изотопных соотношений в расплавах позволил В.Г. Сахно с соавторами (2013) предположить глубокий мантийный источник расплавов, их коровую контаминацию, а также то, что базальтоиды, с которыми связано оруденение, имеют остаточную природу.

Малиновская структура может быть использована в качестве примера при изучении пространенности изометрических структур вулканоплутонических поясов на космических снимках, а также при их численном моделировании, так как хорошо изучена в структурно-гео-

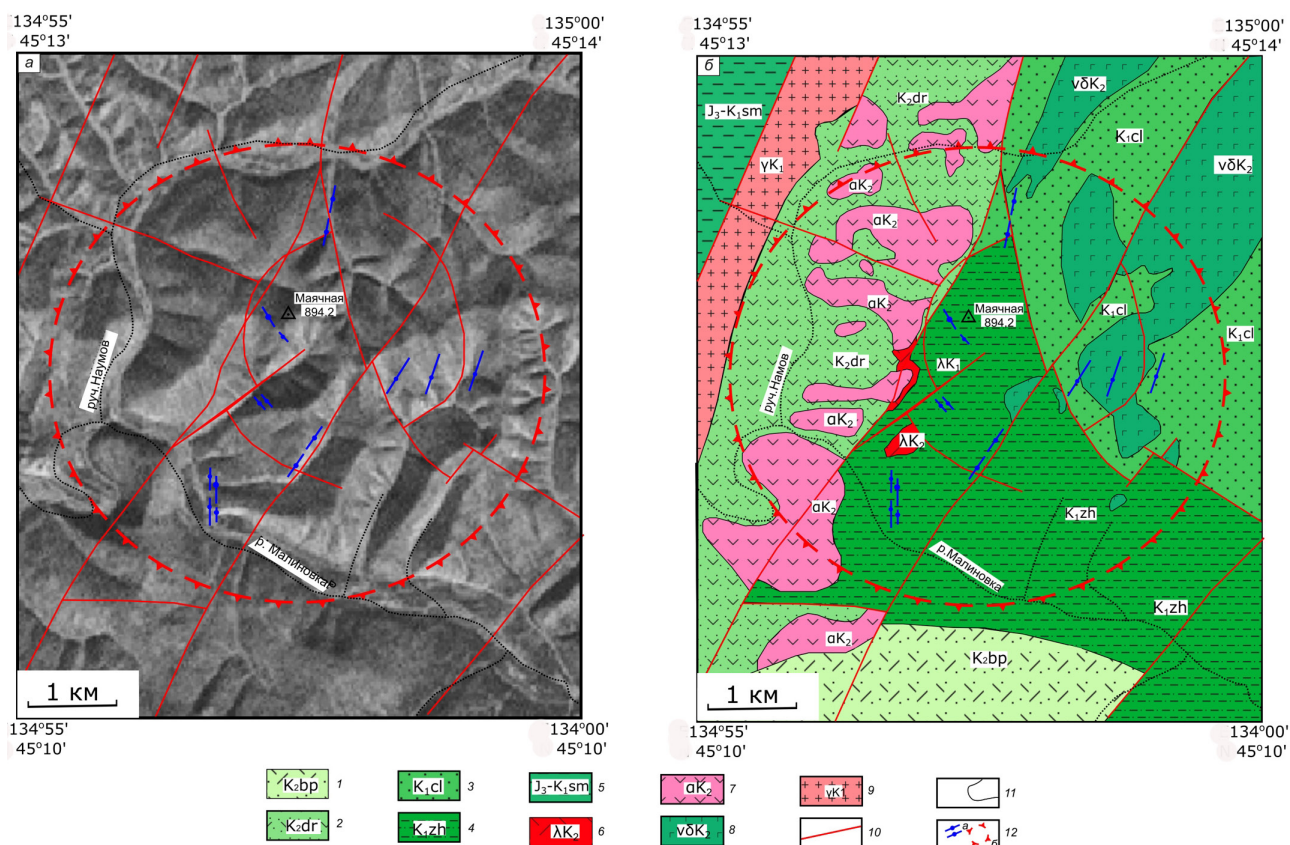


Рис. 1. Малиновская кольцевая структура: а — выраженность в изображении Landsat 7 ETM (дата съемки: 29 октября 2010, канал 7); б — схематическая геологическая карта, по (Степанов и др., 2013): 1 — туфы риолитов и дацитов, туфоалевролиты, туфопесчаники богопольской свиты; 2 — андезиты и туфы среднего состава дорофеевской свиты; 3 — песчаники и алевролиты ключевской свиты; 4 — песчаники и алевролиты журавлевской свиты; 5 — алевролиты, аргиллиты, кремнистые сланцы самаркинской свиты; 6 — риолиты и дациты; 7 — андезиты, андезидациты; 8 — габбро, габбро-диориты; 9 — граниты; 10 — разломы; 11 — геологические границы; 12 — известные рудные тела (а) и предполагаемые границы Малиновского поднятия (б).

Fig. 1. Malinovka ring structure: а — expression in Landsat 7 ETM image (acquisition date 29 October 2010, band 7); б — schematic geologic map, according to (Stepanov et al., 2013): 1 — rhyolite and dacite tuffs, tuff siltstone, tuff sandstone of the Bogopol Formation; 2 — andesites and andesitic tuffs of Dorofeevsky Formation; 3 — sandstones and siltstones of Klyuchevskoy Formation; 4 — sandstones and siltstones of Zhuravlevskiy Formation; 5 — siltstones, mudstones and siliceous shales of Samarka Formation; 6 — rhyolite and dacite; 7 — andesite, andesidacites; 8 — gabbro, gabbro-diorites; 9 — granite; 10 — faults; 11 — geologic boundaries; 12 — known ore bodies (а) and supposed boundaries of the Malinovka uplift (б).

логическом и минерагеническом отношении, а также хорошо различима на дистанционной основе (Сахно и др., 2013; Степанов и др., 2013; Шевырев, Шевырева, 2016). Для развития методик оценки структур на космических снимках критичным является реконструирование истории их формирования, типизация, установление симметричности формирующихся разрывных нарушений и конформность интрузивных тел складчатым дислокациям, что возможно сделать с помощью рассматриваемых здесь методов численного моделирования.

Нами исследовалась применимость численной 2D модели Т. Геря (Gerya, 2009, 2019) для отображения внедрения подкоровой интрузии в осадочный чехол и формирования связанных с ней дислокаций. Такая модель, по нашему мне-

нию, может служить аналогом для реконструкции возникновения кольцевых (изометричных) геологических структур. Для моделирования поведения расплава при его внедрении мы использовали состав, содержащий 25% верхней континентальной коры и 75% гидратированной мантии. Реологические свойства заимствованы из (Gerya, 2009, 2019). Выбранная модель важна для объяснения механизмов формирования вулканоплутонических структурно-вещественных ассоциаций и скрытых интрузивов осадочного чехла, а также прогноза связанных с ними полезных ископаемых.

Проведенные численные расчеты основываются на методе «маркеров-в-ячейках» («marker-in-cell»), который обеспечивает адвекцию моделируемой среды за счет ее интерполяции свойств

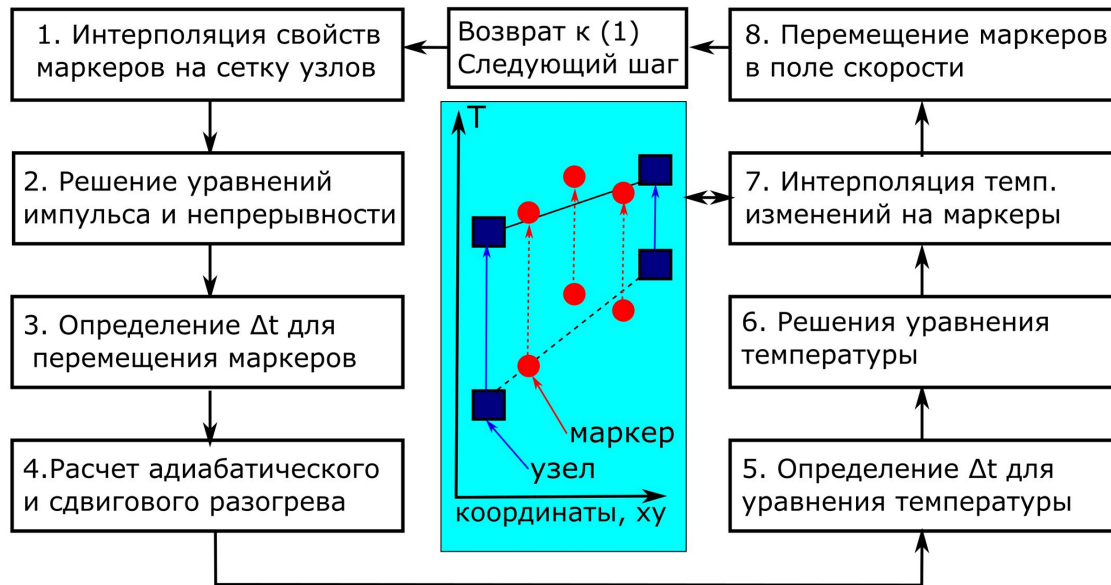


Рис. 2. Алгоритм реализации метода «маркеров-в-ячейках» для численного решения вязкой термомеханической модели, по (Gerya, 2009).

Fig. 2. Algorithm for implementing the marker-in-cell method for the numeric solution of viscous thermomechanical model, after (Gerya, 2009).

с подвижных частиц (маркеров) на неподвижные узлы решетки и обратно (рис. 2). Для численного решения уравнений используется метод конечных разностей (МКР).

В оригинале модели Т. Геря (Gerya, 2009, 2019) реализуют последовательный перебор маркеров и узлов решеток, что, с одной стороны, делает код доступным для чтения, понимания и изменения, с другой — существенно прибавляет время вычисления модели, которое возрастает при увеличении разрешения модели и количества маркеров.

Для качественной интерпретации наблюдаемой на космических снимках картины изометричных структур важно привести обоснование их связи с глубинным строением. Доработанная нами модель Т. Геря (Gerya, 2009, 2019) способна описывать эволюцию глубинного очага и коровой интрузии для заданного промежутка времени, а также формирование складчатых и разрывных дислокаций при внедрении в складчатые, моноклиальные и горизонтально залегающие толщи. Наши добавления включают возможность выбора типа коровых дислокаций и работу через интерфейс командной строки. На рисунке 3 показано формирование интрузивно-купольного поднятия, размер модели 120×100 км, время жизни модели 10178 лет (4300 временных интервала). Площадь глубинного магматического очага выбрана соответствующей Малиновской структуре. Проведенное моделирование (рис. 3) позволяет отследить стадии жизни интрузии (состав исходного расплава: 25% верхней континентальной коры, гранодиорита,

75% гидратированной мантии), внедряющейся в складчатую толщу осадков. Уже через 100 лет жизни модели (рис. 3б) формируется интрузивное тело мощностью около 6 км и протяженностью до 12 км в плоскости сечения модели с одновременным ростом поднятия на поверхности. При этом интрузия стремится занять апикальную часть антиклинальной складки с формированием лакколита. Вязкость основного расплава невысокая и процесс идет достаточно быстро. Уже через 150 лет с развитием разрывных нарушений обособливается тело горста, при этом рост поднятия продолжается (рис. 3в). В дальнейшем денудация приводит к компенсации поднятия (рис. 3г, 3д) с формированием слоя переотложенных осадков. После 10000 лет жизни модели наступает истощение магматического очага, и становится заметной контаминация интрузии. На рис. 3е также показан предполагаемый эрозионный срез, обнаживший апикальную часть интрузии с сохранением перекрытия вмещающими породами.

Исходный файл модели, предложенной Т. Геря (Gerya, 2009, 2019), написанный на языке программирования Matlab, был доработан нами в среде разработки с открытым исходным кодом GNU Octave, а также переписан на язык программирования Python (портирование). Добавлена возможность выбора состава магматического расплава (гидратированная мантия, обогащенная базальтовой, диоритовой или гранодиоритовой компонентами), а также характера дислокаций (горизонтальное, моноклиальное или складчатое строение пород чехла). Для дальнейшего анализа дистанционной основы для нас

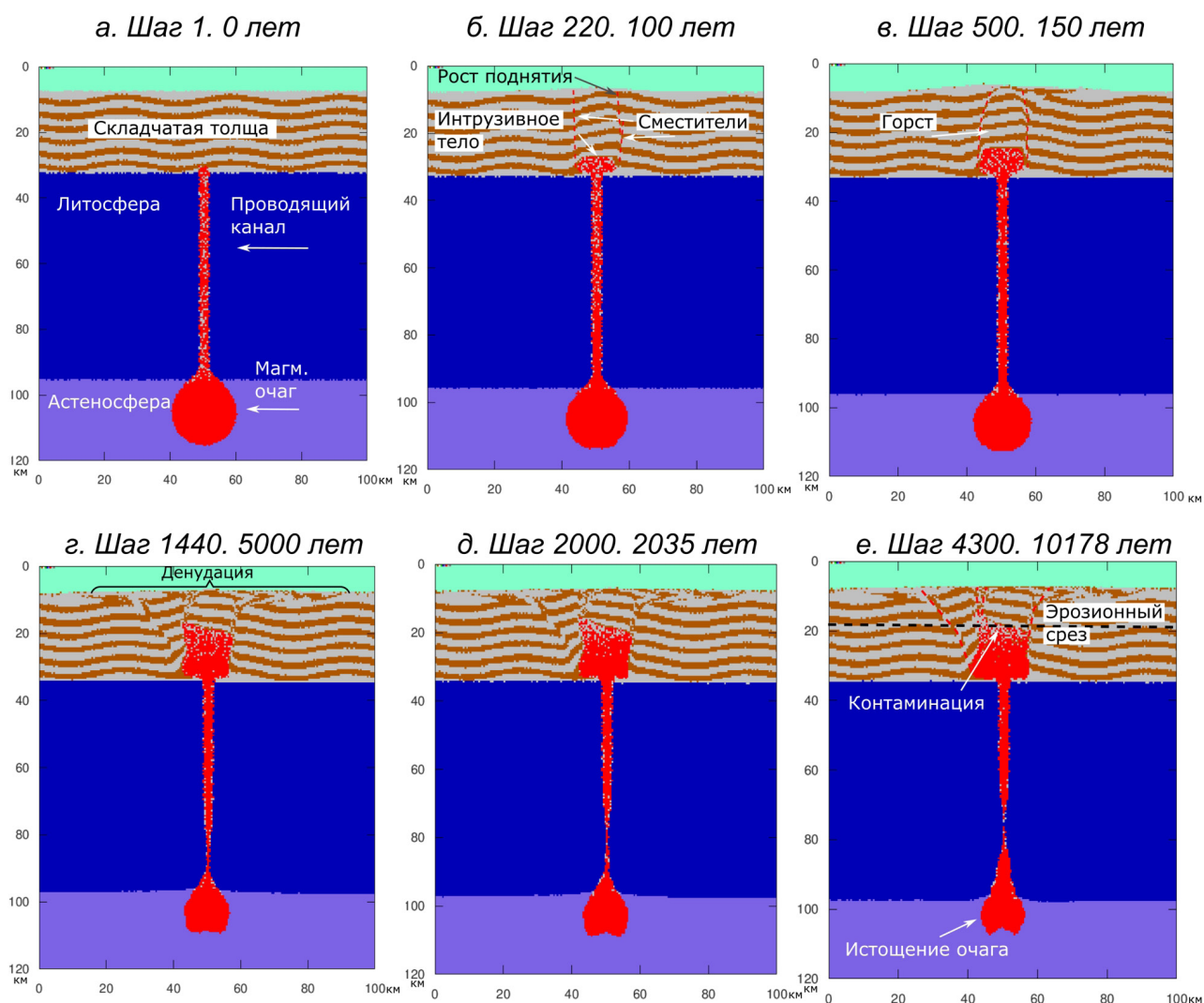


Рис. 3. Внедрение интрузии в складчатую толщу (на основе доработанной оригинальной модели Т. Геря), расчет в GNU Octave.

Fig. 3. Intrusion into the folded strata (based on modified model of T. Gerya), computations in GNU Octave.

представляет интерес расположение разрывных нарушений относительно центра вулканоплутонической структуры, формирование флексур и надвигов. На основе дополненной модели внедрения интрузии (Gerya, 2009, 2019) возможно описание процесса проникновения мантийного расплава, обогащенного компонентами различного состава, в осадочные толщи горизонтального, моноклинального и складчатого залегания.

Критичной проблемой, ограничивающей практическую применимость таких геодинамических моделей, является низкая производительность программ, написанных на языке Matlab. Полное время расчета модели Т. Геря внедрения интрузии мантийного расплава в складчатый осадочный чехол (моделируется участок коры 120×100 км, разрешение 201×61 пиксель) составляет 1 месяц 20 дней и 10 часов (!) на компьютере Apple MacBook Air M1 16Gb 2020, расчеты проводились в среде GNU Octave. В соответствии с

этим предпринимались усилия по акселерации выполнения кода программы.

Выбор компьютера для тестирования без дискретного графического процессора (GPU) определяется высокой стоимостью и дефицитом видеопроцессоров Nvidia, а также необходимостью использования специальных библиотек, совместимых с программным обеспечением CUDA и типов данных для GPU. По сути дела, это приводит к специализации программы для использования на конкретном оборудовании и уменьшает количество потенциальных пользователей. Важным фактом является еще и то, что увеличение производительности при использовании GPU заметно только для просчета очень больших моделей, в противном случае центральный процессор (CPU) работает значительно быстрее (Seif, 2023).

Средствами Python проводилось исследование для подбора метода оптимизации работы

модели. Для реализации метода MIC нами использовался алгоритм и исходный код модели MIC (файл «Stokes_continuity_markers.m»), опубликованный в (Gerya, 2009). Портинг исходного кода в Python было выполнено с помощью библиотек *numpy* и *matplotlib*, входящих в сборку Python для выполнения научных исследований (Anaconda..., 2023) (табл. 1).

Для выбора технологии ускорения выполнения моделей Т. Геря на основе метода «маркер-ячейке» и решения уравнения Стокса с помощью метода конечных разностей было проведено исследование модели вязкого течения жидкости (Gerya, 2009). Модель изначально включает два вертикальных слоя различной плотности и вязкости, близкими по своим характеристикам (плотности и вязкости) к геологическим средам (рис. 4; табл. 1). В процессе работы модели вязкого течения маркеры материалов стремятся перераспределиться в соответствии со своей плотностью — более легкий слой (темный) стремится занять свое положение над более тяжелым слоем (рис. 4). Физические характеристики сред для работы модели «маркер в ячейке» приведены в (табл. 2).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для сравнения производительности методов ускорения численных расчетов модели «маркер-ячейке» нами сопоставлялись исходный код Matlab (среда выполнения GNU Octave) и портированный код в Python, использующий циклы *for* (как потребляющие наибольшее количество ресурсов). Код ускорялся с помощью библиотеки *Cython* и декоратора *jit* (библиотека *numba*), в качестве альтернативы стадии 1 и 8 (рис. 2) вычислялись параллельно с помощью библиотеки *joblib* Python. Тестирование выполнялось на компьютере MacBook Air M1 16 GB 2020 с применением транслятора Rosette. Программы были написаны в виде скриптов Python, которые удобно выполнять в системной консоли. Время выполнения контролируется с помощью постав-

Таблица 1. Библиотеки/модули, обеспечивающие реализацию метода MIC в Python

Table 1. Libraries/modules for implementation of the MIC method in Python

Номер	Название	Назначение	Литература
1	Numpy	Работа с матричными данными	(Numpy..., 2023)
2	Matplotlib	Визуализация результатов вычислений, сохранение рисунков на диск	(Matplotlib..., 2023)
3	Cython	Трансляция текста программы в С и компиляция исполняемого файла с помощью системного компилятора	(Cython..., 2023)
4	Numba	Предварительная компиляция и кеширования отдельных процедур программы	(Numba..., 2023)
5	Joblib	Параллелизация вычислений, распределение задач между ядрами процессора. Показала снижение эффективности	(Joblib..., 2023)

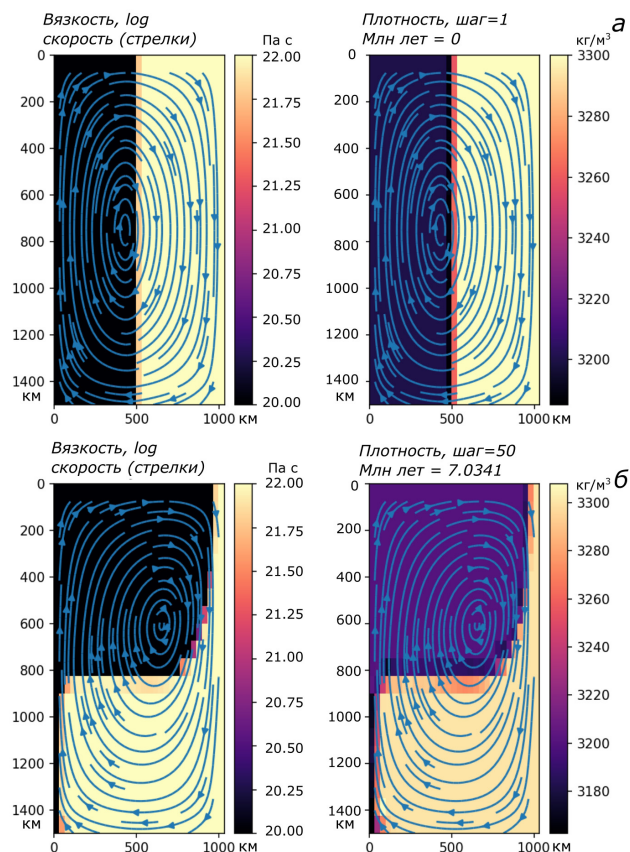


Рис. 4. Модель MIC, реализация в Python (а — исходное состояние; б — конечное состояние).

Fig. 4. MIC model, Python implementation (a — initial state; b — final state).

ляемой вместе с Python библиотекой *time*, результаты измерений времени выполнения выводятся в консоль. Использованный исходный код программы Python доступен на соответствующем репозитории (Sergei Shevurev, 2023). Результаты тестовых запусков модели приведены в (табл. 3).

Как видно из тестирования, наименьшей производительностью отличается выполнение программы в GNU Octave (700 с), а наибольшей — реализация метода «just in time (jit)» в Python (47 с), требующего значительной переработки

Таблица 2. Физические характеристика сред и параметры модели MIC**Table 2.** Physical characteristics of the media and MIC model parameters

Высота × Ширина модели (км)	Разрешение модели (пиксели)	Слой	Плотность, кг/м ²	Динамическая вязкость, Па × с
1500 × 1000	21 × 31	Левый	3200	1e+20
		Правый	3300	1e+22

Таблица 3. Затраты времени в секундах на вычисление модели "маркер-в-ячейке" (50 итераций, моделируемое геологическое время 7 млн лет)**Table 3.** Time expenses in seconds to compute the MIC model (50 iterations, simulated geologic time span 7 Ma)

Номер	Язык программирования	Акселерация	Время выполнения, с	Увеличение производительности, раз
1	Matlab/GNU Octave	—	700	—
2	Python	—	102	7
3	Python	joblib*	216	3
4	Python	Cython/clang	84	8
5	Python	Just-in-time (jit)	47	15

Примечание. *параллельно с помощью joblib вычислялись только шаги 1 и 8 циклов (рис. 2)

Note. *in parallel, only steps 1 and 8 cycles were calculated using joblib (Fig. 2).

интерпретируемого кода. Реализация параллельных вычислений показала, наоборот, существенное снижение производительности. Так, применение библиотеки *joblib* для параллельного расчета шагов только 1 и 8 циклов (интерполяция свойств маркеров и перемещение маркеров в поле скорости) привело к снижению производительности в два раза даже по сравнению с выполнением кода, портированного в Python (216 секунд против 102 секунд), и оказалось не оправданным. Применение Python, помимо ускорения работы алгоритма до 15 раз, позволяет обеспечивать использование привлекательных библиотек визуализации, таких как *matplotlib*.

Полученный опыт акселерации выполнения метода «маркер-в-ячейке», а также адаптация модели внедрения подкорковых интрузий в складчатые и моноклиальные толщи с дальнейшим изучением формируемых дислокаций планируется использовать в качестве методической основы изучения морфологических особенностей и возможно глубинного строения тектономагматических поднятий и изометрических структур окраинных вулcano-плутонических поясов.

ВЫВОДЫ

В результате проведенного исследования на основе количественных примеров показано преимущество использования Python для ускорения выполнения кода численных моделей, использующих метод MIC перед моделированием в Matlab. Применение численных моделей MIC

в Python позволит использовать доступные для него средства ускорения производительности работы кода.

Обратная интерпретация наблюдаемых структур поверхности в сопоставлении с моделируемым составом интрузивных тел, определяющих скорость их внедрения в контексте строения вмещающей осадочной толщи, может способствовать формированию первичных представлений о глубинном строении рудно-магматических структур, дополняющих имеющиеся геофизические данные.

Наряду с этим, модели с определенной долей абстракции могут играть роль в реконструкции истории развития интрузивных массивов в различных обстановках и условиях внедрения.

Компьютерные модели, использованные в статье для тестирования производительности численных вычислений в Python, доступны на репозитории (Sergei Shevryev, 2023). Модели Т. Геря, использованные в его книгах (Gerya, 2009; 2019), доступны на сайте издательства (Cambridge..., 2023). Все вычисления выполнены в некоммерческой сборке Anaconda Python (Anaconda..., 2023), содержащей необходимые библиотеки, в том числе, обеспечивающие ускорение численных расчетов.

Список литературы [References]

Ивин В.В., Медведев Е.И., Фатьянов И.И. Минерало-геохимическая типизация и зональность многометалльно-серебряного оруденения Нижне-Таежного рудного узла (Северное Приморье) // Успехи современного естествознания.

2018. № 5. С. 76–81 [Ivin V.V., Medvedev E.I., Fatyanov I.I. Mineral-geochemical typesization and zonality of multimetal silver mineralization of the Lower-Taiga ore cluster (Northern Primorye) // Uspekhi sovremennogo yestestvoznaniya. 2018. № 5. P. 76–81 (in Russian)].
- Сахно В.Г., Степанов В.А., Гвоздев В.И., Доброшевский К.Н. Малиновская золоторудная магматическая система Центрального Сихотэ-Алиня: геохронология, петрохимический состав и изотопная характеристика магматических комплексов (Приморье, Россия) // ДАН. 2013. Т. 452. № 1. С. 61–69. <https://doi.org/10.7868/s0869565213260174> [Sakhno V.G., Gvozdev V.I., Stepanov V.A. et al. The Malinovka gold-bearing ore-magmatic system of central Sikhote Alin (Primor'e Region, Russia): Geochronology, petrogeochemistry, and isotopic signatures of igneous complexes // Doklady Earth Sciences. 2013. V. 452. № 1. P. 887–894. <https://doi.org/10.1134/S1028334X13090043>].
- Степанов В.А., Бельченко Е.Л., Доброшевский К.Н., Гвоздев В.И. Малиновское золоторудное месторождение, Приморский край // Руды и металлы. 2013. № 3. С. 26–34 [Stepanov V.A., Belchenko E.L., Dobroshevsky K.N., Gvozdev V.I. Malinovskoye zolotorudnoye mestorozhdeniye, Primorskiy kraj [Malinovskoye gold deposit, Primorsky region] // Rudy i metally. 2013. № 3. P. 26–34 (in Russian)].
- Фатьянов И.И., Хомич В.Г., Борискина Н.Г. Скрытая минерально-геохимическая зональность низкосульфидного золото-серебряного оруденения (месторождение Многовершинное, Нижнее Приамурье) // ДАН, 2010. Т. 435, №1. С. 91–95 [Fatyaynov I.I., Khomich V.G., Boriskina N.G. Hidden mineralogical and geochemical zonation of low-sulfide gold-silver mineralization (Mnogovershinnoe deposit, Lower Amur area) // Doklady Earth Sciences. 2010. V. 435. № 1. P. 1456–1459. <https://doi.org/10.1134/S1028334X10110103>].
- Хомич В.Г., Борискина Н.Г. Глубинная геодинамика юго-востока России и позиция платиноносных базит-гипербазитовых массивов // Вулканология и сейсмология. 2013. № 5. С. 40–50 [Khomich V.G., Boriskina N.G. The deep geodynamics of Southeast Russia and the setting of platinum-bearing basite-hyperbasite massifs // Journal of Volcanology and Seismology. 2013. V. 7. № 5. P. 328–337. <https://doi.org/10.1134/S0742046313040040>].
- Хомич В.Г., Борискина Н.Г. Предпосылки обнаружения скрытой Au-Мо-(±Cu)-порфировой минерализации в Покровском рудном поле (Гонжинский район, верхнее Приамурье) // Успехи современного естествознания. 2018. № 6. С. 125–130 [Khomich V.G., Boriskina N.G. Prerequisites to finding of a concealed Au-Мо-(±Cu)-porphyry mineralization in the Pokrovskoe ore field (Gonzha ore area, Upper Amur region) // Uspekhi sovremennogo yestestvoznaniya. 2018. № 6. P. 125–130 (in Russian)].
- Шевырев С.Л., Шевырева М.Ж. Моделирование флюидных рудоносных палеосистем с применением средств дистанционного зондирования Земли как новое направление прогнозных исследований // Вестник ВГУ. Серия: Геология. 2016. № 3. С. 80–85 [Shevyrev S.L., Shevyreva M.Z. Simulation of fluid ore-bearing paleosystems with remote sensing of the earth as new direction of prospective researches // Vestnik VGU. Seriya: Geologiya = Proceedings of Voronezh State University. Series: Geology. 2016. № 3. P. 80–85 (in Russian)].
- Юшманов Ю.П., Петрищевский А.М. Белогорская интрузивно-купольная структура (Нижнее Приамурье): глубинное строение и рудно-магматическая зональность // Отечественная геология. 2018. № 1. С. 61–67 [Yushmanov Yu.P., Petrishchevsky A.M. Belogorsk intrusive-dome structure (Lower Amur region): deep structure and ore-magmatic zoning // Otechestvennaya Geologiya. 2018. № 1. P. 61–67 (in Russian)].
- Anaconda.Org [Электронный ресурс]. URL: <https://anaconda.org> (дата обращения: 21.07.2023).
- Cambridge University Press. Introduction To Numeric Geodynamics. Book's page [Электронный ресурс]. URL: <https://www.cambridge.org/ru/universitypress/subjects/earth-and-environmental-science/structural-geology-tectonics-and-geodynamics/introduction-numerical-geodynamic-modelling-2nd-edition> (accessed 20.07.2023).
- Cython. C-Extensions for Python [Электронный ресурс]. URL: <https://cython.org> (accessed 21.07.2023).
- Gerya T. Introduction to Numerical Geodynamic Modelling. 2th edn. Cambridge GB: Cambridge University Press, 2019. 454 p.
- Gerya T. Introduction to Numerical Geodynamic Modelling. Zürich CH: Swiss Federal University (ETH), 2009. 359 p.
- Gerya T.V., Yuen D.A. Characteristics-based marker-in-cell method with conservative finite-differences schemes for modeling geological flows with strongly variable transport properties // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 2003. V. 140. № 4. P. 293–318. <https://doi.org/10.1016/j.pepi.2003.09.006>
- Goudarzi M., Gerya T., van Dinther Y. A comparative analysis of continuum plasticity, viscoplasticity and phase-field models for earthquake sequence modeling // Computational Mechanics. 2023. V. 72. P. 615–633. <http://dx.doi.org/10.1007/s00466-023-02311-0>
- Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface // Physics of Fluids. 1965. V. 8. № 12. P. 2182–2189. <http://doi.org/10.1063/1.1761178>
- Joblib: running Python functions as pipeline jobs [Электронный ресурс]. URL: <https://joblib.readthedocs.io> (accessed 21.07.2023).
- Kaatz L., Schmalholz S.M., Timm J. Numerical Simulations Reproduce Field Observations Showing Transient Weakening During Shear Zone Formation By Diffusion Hydrogen Influx and H2O Inflow // Geochemistry, Geophysics, Geosystems. 2023. V. 24. e2022GC010830. <http://dx.doi.org/10.1029/2022GC010830>
- Koptev A.I., Cloetingh S., Burov E. et al. Long-distance impact of Iceland plume on Norway's rifted margin. Scientific Reports. 2017. V. 7. № 1. P. 10408. <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-017-07523-y>
- Lavecchio A., Thieulot C., Beekman F. et al. Lithosphere erosion and continental breakup: interaction of extension, plume upwelling and melting // Earth and Planetary Sciences Letters. 2017. V. 467. P. 89–98. <http://dx.doi.org/10.1016/j.epsl.2017.03.028>

- Matplotlib. Visualization with Python [Электронный ресурс]. URL: <https://matplotlib.org> (accessed 21.07.2023).
- Mora P., Morra G., Yuen D.A. Model of plate tectonics with the Lattice Boltzmann Method // Artificial Intelligence in Geosciences. 2023. № 4. P. 47–58. <https://doi.org/10.1016/j.aiig.2023.03.002>
- Moulas E., Schmalholz S.M., Podladchikov Yu. et al. Relation between mean stress, thermodynamic, and lithostatic pressure // Journal of Metamorphic Geology. 2018. V. 37. № 1. P. 1–14. <http://dx.doi.org/10.1111/jmg.12446>
- Morra G. Pythonic geodynamics: implementations for fast computing. Switzerland: Springer Cham, 2018. 227 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-55682-6>
- Numba: A High Performance Python compiler [Электронный ресурс]. URL: <https://numba.pydata.org> (accessed 21.07.2023).
- Numpy [Электронный ресурс]. URL: <https://numpy.org> (accessed 21.07.2023).
- Python Vs R: Know The Difference [Электронный ресурс]. URL: <https://www.interviewbit.com/blog/python-vs-r> (accessed 17.07.2023).
- Scmitt A.K., Sliwinski J.S., Caricchi L. et al. Zircon age spectra to quantify magma evolution // Geosphere. 2023. V. 19. № 4. P. 1006–1031. <https://doi.org/10.1130/GES02563.1>
- Seif G. Here's how to use CuPy to make Numpy Over 10X faster [Электронный ресурс]. URL: <https://towardsdatascience.com/heres-how-to-use-cupy-to-make-numpy-700x-faster-4b920dda1f56> (accessed 15.06.2023).
- Shevyrev S. pyMIC testing repository [Электронный ресурс]. URL: <https://github.com/SergeiShevyrev/SergeiShevyrev/tree/main/pyMIC> (accessed 08.02.2023).
- Shi Y., Wei D., Li Zhong-Hai et al. Subduction Mode Selection During Slab and Mantle Transition Zone Interaction: Numerical Modeling // Pure and Applied Geophysics. 2018. V. 175. P. 529–548. <https://link.springer.com/article/10.1007/s00024-017-1762-0>
- Van Zelst I., Thieulot C., Craig T.J. The effect of temperature-dependent material properties on simple thermal models of subduction zones // Solid Earth. 2023. V. 14. № 7. P. 683–707. <http://doi.org/10.5194/se-14-683-2023>
- Zhong Xinyi, Li Zhong-Hai. Compression at strike-slip fault is a favorable condition for subduction initiation // Geophysical Research Letters. 2023. V. 50. e2022GL102171. <http://dx.doi.org/10.1029/2022GL102171>

OPTIMIZATION OF COMPUTATION METHODS CALCULATING REGIONAL GEOLOGIC MODELS OF ORE-BEARING ISOMETRIC STRUCTURES IN PYTHON

S.L. Shevyrev, N.G. Boriskina

*Far East Geological Institute FEB RAS, Vladivostok, Russia, 690022;
e-mail: boriskina2000@mail.ru*

Received April 28, 2023; revised January 11, 2024; accepted March 25, 2024

Numeric regional models are necessary to reconstruct the nature and conditions of formation of geological structures, to obtain ideas about the evolution of different zones of the crust and upper mantle, the evolution of fold and fault dislocations and predicting expression of manifestation of deep structures on earth's surface. Numeric reconstructions are based on computational dynamics methods, in which rock is represented as highly viscous liquid. «Markers-in-cell» method is one of the implementations of that approach. We propose to accelerate model ported into Python, as compared to Matlab, without rejecting sequential enumeration of markers. It is shown that the solutions can be either code vectorization (refactoring with binary indices instead of enumeration loops and numpy functions) or acceleration of loops by their pre-compilation or parallel computations. The results obtained can be used in the implementation of numeric geological modeling in Python.

Keywords: minerageny, Python, markers-in-cell, numeric modeling, petrology.