**Проект РНФ № 14-11-00485 «**Высокопроизводительные методы и технологии моделирования электрофизических процессов и устройств**»**.

Руководитель – д.ф.-м.н. Ильин В. П.

В отчетном году достигнуты следующие результаты разработки и исследования вычислительных методов и технологий, реализуемых в рамках базовой системы моделирования (БСМ) и актуальных для математического моделирования электрофизических процессов и устройств на современных МВС.

1. Разработан и экспериментально исследован ряд новых высокопроизводительных итерационных методов для решения больших систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с разреженными матрицами, возникающими из аппроксимаций многомерных краевых задач на адаптивных квазиструктурированных сетках, а также параллельных технологий их программных реализаций на многопроцессорных вычислительных системах.

Технологическая основа алгоритмов – предобусловленные итерационные методы декомпозиции областей с параметризованным пересечением подобластей и варьируемыми интерфейсными условиями на смежных внутренних границах, являющиеся в алгебраическим плане блочными двухуровневыми методами Шварца – Якоби в подпространствах Крылова.

В 2017 г. предложены, программно реализованы и исследованы методы грубосеточной коррекции с базисными функциями 0, 1 и 2-го порядков на макросетке на основе дефляционно-проективного и вариационного принципов. Вторая идея, предложенная для ускорения итерационных процессов – это применение «неявных», или блочных, методов наименьших квадратов (МНК) в подпространствах Крылова, наиболее эффективно применяемых при решении несимметричных СЛАУ. Использование МНК в данном случае осуществляется на двух уровнях: первый – «улучшение» внутренних итераций между рестартами путем сохранения некоторого числа промежуточных векторов, образующих подпространство для минимизации невязки; второй – корректировка самих рестартовых приближений путем вычисления их оптимальных линейных комбинаций. Данная процедура значительно сокращает общее число итераций, экономично реализуется и хорошо распараллеливается.

Производительность двухуровневых итерационных методов декомпозиции областей в подпространствах Крылова обеспечивается средствами гибридного программирования. На верхнем уровне итерации по подобластями реализуются в распределенном MPI варианте. На нижнем уровне синхронное решение вспомогательных СЛАУ выполняется через многопотоковые вычисления. Для дополнительного ускорения используется векторизация арифметических операций. Разработана модификация популярного CSR формата хранения разреженных матриц – формат Vector Compressed Sparse Row (VSR), на основе которого реализовано умножение вектора на разреженную матрицу, что осуществляется системами команд типа AVX и AVX2.

В отчетном году также разработаны, программно реализованы в системе CUDA и экспериментально исследованы на графических ускорителях быстрые неявные методы переменных направлений для решения СЛАУ с постоянными коэффициентами. Все разработанные алгоритмы и технологии ориентированы на работу в составе библиотеки KRYLOV, являющейся интегрированным вычислительным окружением для высокопроизводительного решения широкого класса задач вычислительной алгебры на МВС.

2. Проведена работа по аппроксимации многомерных краевых задач на квазиструктурированных сетках с использованием различных типов подсеток в подобластях. Разработаны программы для аппроксимации задач методами конечных объемов и разрывных алгоритмов Галеркина. Реализованы универсальные подходы с использованием кусочно-линейных базисных функций на адаптивных квазиструктурированных сетках с тетраэдральными конечными элементами в трехмерных расчетных областях со сложной геометрией и контрастными материальными свойствами сред в подобластях.

3. В 2017 г. разработано математическое и программное обеспечение для решения трехмерных краевых задач для уравнений Пуассона и Гельмгольца в неограниченных расчетных областях со сложной геометрией граничных кусочно-гладких поверхностей и с контрастными свойствами материальных сред при задании условия излучения Зоммерфельда на бесконечности. Такие постановки зачастую возникают при моделировании антенных устройств или в задачах СВЧ-электроники, геоэлектроразведки и электромагнитного рассеивания.

Рассматривается также применение итерационного метода декомпозиции области на подобласти, одна из которых является неограниченной и представляет собой внешность достаточно большой сферы с однородными электрофизическими свойствами. Для этой внешней подобласти решение выражается с помощью интегрального представления, а в остальных подобластях решения ищутся из внутренних краевых задач с помощью метода конечных объемов на квазиструктурированной сетке. С целью сокращения числа итераций по подобластям, подобласти конструируются с параметризованным пересечением и заданием различных типов интерфейсных краевых условий на внутренних границах смежных подобластей. Вспомогательные СЛАУ в ограниченных подобластях решаются синхронно с помощью прямых методов или с помощью итерационных процессов в подпространствах Крылова. Фактически, в общем случае применяется двухуровневый блочный итерационный процесс типа Шварца – Якоби, который можно также интерпретировать как метод решения специального операторного уравнения типа Пуанкаре – Стеклова, но на дискретном уровне.

4. Проведены работы по моделированию интенсивных пучков заряженных частиц в трехмерных электрических полях для исследования процессов в электрофизических приборах. Такие пучки являются рабочим элементом в электронно- и ионно-оптических системах, которые находят широкое практическое применение. При этом решается нелинейная самосогласованная задача, включающая в стационарном случае уравнения движения заряженных частиц, уравнение Пуассона для потенциала электрического поля, уравнение неразрывности потока зарядов и состоящая из следующих вычислительных задач: 1) интегрирование уравнений движения заряженных частиц; 2) вычисление потенциала и напряженности электрического поля; 3) расчет распределения объемного заряда.

Для третьей подзадачи предложен, теоретически и экспериментально обоснован метод расчета объемного заряда второго порядка. Он основывается на методе Р. Хокни, Дж. Иствуда распределения точечного заряда. В нашем случае рассмотрен отрезок траектории заряженной частицы. Важным достоинством предложенного подхода является то, что доказано повышение порядка точности не только для объемного заряда, но и для расчета потенциала электрического поля, создаваемого объемным зарядом. Доказаны теоремы о том, что разработанные алгоритмы имеют второй порядок точности, что подтверждается результатами численных экспериментов.

Выполнен расчет сложной практической задачи в трехмерной постановке, а именно парциальной электронной пушки с 15 катодами и 15 соосными анодами. Расчет проводился на сетке, включающей более 2 млн узлов. Пучок с каждого катода моделировался 200 трубками тока. Всего рассчитывалось около 3000 траекторий. Результаты расчетов подтверждают эффективность реализованных методов. Предложенные алгоритмы и структуры данных подготовлены к интеграции в разрабатываемый перспективный комплекс прикладных программ ЭРА-3Д для моделирования широкого класса физических процессов сильноточной СВЧ-электроники на современных высокопроизводительных параллельных вычислительных системах.

5. Проведен цикл работ по разработке и исследованию вычислительных методов и технологий для решения актуальных задач электромагнитного рассеяния. Ставилась цель, с одной стороны, создания и апробации алгоритмов высокого (до четвертого) порядка для моделирования динамических процессов, описываемых одномерным уравнением Шредингера, а с другой – проведение экспериментов по решению трехмерного уравнения Гельмгольца в широком диапазоне частот, включая решение обратных задач идентификации параметров модели в концепции библиотеки KANTOROVICH на основе применения алгоритмов условной минимизации целевого функционала, определяемого из решений вспомогательных прямых параметризированных краевых задач. По обоим направлениям исследований, описываемых одномерными и трехмерными моделями, проведены предварительные методические расчеты.

6. Начат цикл работ по интеграции модуля геометрического и функционального моделирования VORONOI из ядра базовой системы моделирования БСМ с интегрированной инженерной программной платформой ГЕРБАРИЙ, являющийся основой для создания современных САПР и разработанной по заказу фонда перспективных исследований на основе отечественного Ядра 3Д, содержащего развитые средства работы с геометрическими объектами. Целью создания системы VORONOI является обеспечение программных интерфейсов между вычислительными модулями ядра БСМ и САПР-инструментами для обеспечения дружественного графического контакта с пользователями из различных отраслей.