

## ВАЖНЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИВМиМГ СО РАН ЗА 2019 ГОД рассмотренные и утвержденные на заседании ученого совета 22.11.2019

Представлены результаты по четырем основным научным направлениям Института: вычислительная математика, математическое моделирование и методы прикладной математики, параллельные и распределенные вычисления, информационные системы.

### Новый алгоритм решения обратной задачи идентификации источников в моделях процессов адвекции – диффузии – реакции на основе операторов чувствительности целевых функционалов по данным измерений типа изображений

В. В. Пененко, д.ф.-м.н., А. В. Пененко, к.ф.-м.н.

Лаборатория математического моделирования гидродинамических процессов  
в природной среде

Для нестационарных моделей переноса и трансформации примесей в атмосфере (моделей адвекции-диффузии-реакции) различной пространственной размерности разработан алгоритм идентификации источников на основе операторов чувствительности целевых функционалов по данным измерений типа изображений (т.е. временных рядов значений функции состояния модели в заданных точках области, высотных профилей и изображений функции состояния в определенные моменты времени). Операторы чувствительности строятся на основе ансамблей решений сопряженных задач, соответствующих заданному набору целевых функционалов от функций состояния модели [1–3]. Благодаря ансамблевому характеру алгоритма, он естественно отображается на параллельные вычислительные архитектуры. На рис. 1 представлен результат работы алгоритма по восстановлению функции источников загрязнения по данным мониторинга [1]. Алгоритм применим и в других областях приложений, в частности, к задачам идентификации источников для моделей биологии развития по данным микроскопии [2].

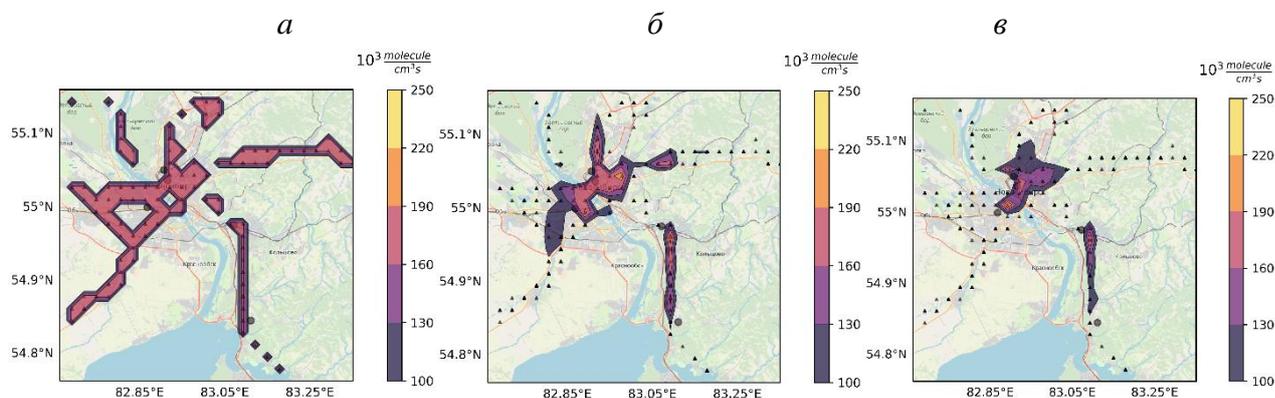


Рис. 1: Идентификация стационарных источников  $NO$  (а) по временным рядам концентрации  $O_3$  на 5 постах мониторинга; проекция «точного» решения на дополнение ядра оператора чувствительности (оценка «видимого» источника) (б) и результат решения задачи идентификации источника (в). Сценарный расчет на примере г. Новосибирска [1]

**Новый эффект нерадиационной рекомбинации экситона на дислокациях:  
теория, моделирование и экспериментальное исследование подвижности экситонов  
в полупроводниковых материалах**

К. К. Сабельфельд, д.ф.-м.н., А. Е. Киреева, к.ф.-м.н.  
Лаборатория стохастических задач

Обнаружен новый эффект нерадиационной рекомбинации экситона на дислокациях, построены теория этого взаимодействия, проведено стохастическое моделирование и экспериментальное исследование совместно с физиками из Института твердотельной электроники им. П. Друде (PDI, Berlin) дрефта, диффузии и рекомбинации экситонов в пьезоэлектрическом поле, порождаемом упругими напряжениями вокруг проникающих дислокаций. Оказалось, в отличие от общепринятой теории, что контраст интенсивности катодоллюминесценции (CL) слабо зависит от диффузии экситонов, но контраст энергии CL очень чувствителен к длине диффузии и, следовательно, позволяет определять ее экспериментально. Новая теория впервые позволила корректно определять подвижность экситонов и их длину диффузии в полупроводниках, что открывает новые возможности для создания наноразмерной элементной базы для нужд фотоники и оптоэлектроники [4–6].

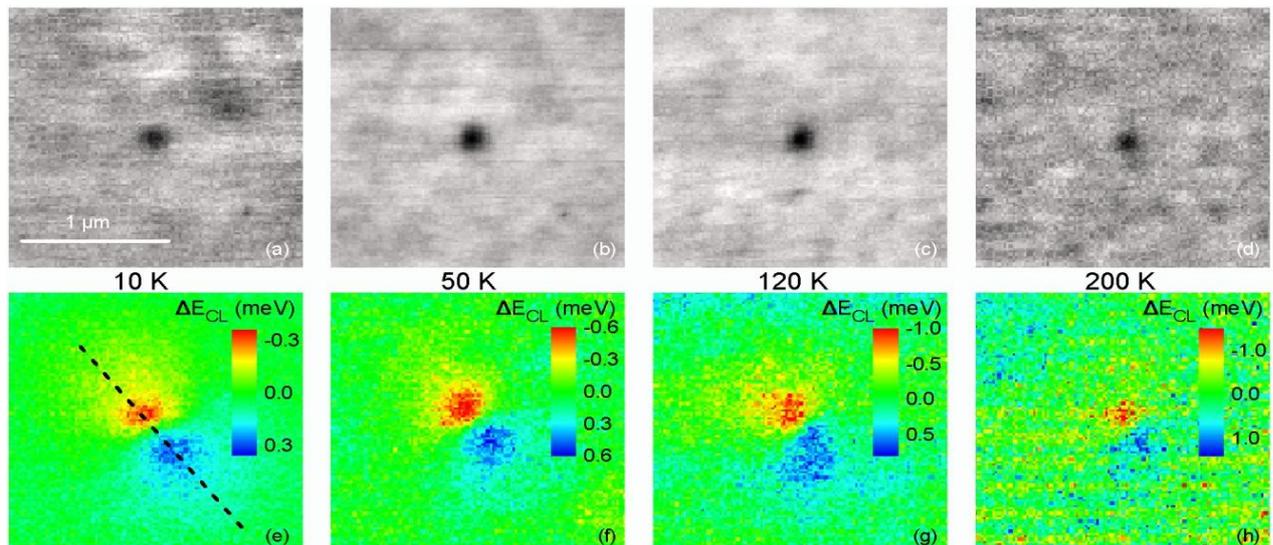


Рис. 2: Карта интенсивности катодоллюминесценции и распределение энергии запрещенной зоны вокруг дислокаций в полупроводнике из нитрида галлия [5, 6]

Результаты работы опубликованы в журналах Applied Physics Letters [4] и Physical Review Applied [5], входящих в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition.

**Построение численно-статистической модели однородного случайного поля  
с заданным распределением интеграла по одной из фазовых координат**

Г. А. Михайлов<sup>1</sup>, чл.-корр. РАН, Е. Г. Каблукова<sup>2</sup>, к.ф.-м.н., В. А. Огородников<sup>2</sup>, д.ф.-м.н.,  
С. М. Пригарин<sup>2</sup>, д.ф.-м.н.

<sup>1</sup>Лаборатория методов Монте-Карло

<sup>2</sup>Лаборатория стохастических задач

Представлен новый алгоритм построения модели трехмерного однородного случайного поля  $\zeta(x, y, z)$  в горизонтальном слое  $0 < z < H$  с заданными безгранично делимым одномерным распределением и корреляционной функцией  $K_\theta(x, y)$  интеграла по "вертикальной" переменной  $z$ . В работе используется гамма-распределение  $\Gamma(\nu, \theta)$  с параметрами формы  $\nu$  и масштаба  $\theta$ . Корреляционные функции  $K_l(z)$  поля  $\zeta(x, y, z)$  вдоль оси  $z$  могут представлять

собой кусочно-линейное приближение требуемой корреляционной функции, либо принадлежать классу Пойа, в частности это могут быть функции экспоненциального типа. Для построения базовой модели рассматривается совокупность  $n$  независимых элементарных горизонтальных слоев толщины  $h=H/n$ , сдвинутых по вертикали на случайную величину, равномерно распределенную в интервале  $(0, h)$ . Доказано, что для сформулированной модели нормированная корреляционная функция интеграла по  $z$  совпадает с заданной "горизонтальной" нормированной корреляционной функцией, а параметры одномерного распределения стремятся к заданным асимптотически при  $n \rightarrow \infty$ , хотя математическое ожидание и дисперсия совпадают с заданными точно. Для воспроизведения указанных выше корреляционных функций  $K_I(z)$  рассматривается дополнительная рандомизация базовой модели. Данная модель применима для имитации пространственной изменчивости облаков и определения взаимосвязей между облачными полями и распространяющейся в них радиации в теории климата и атмосферной оптики [7–10].

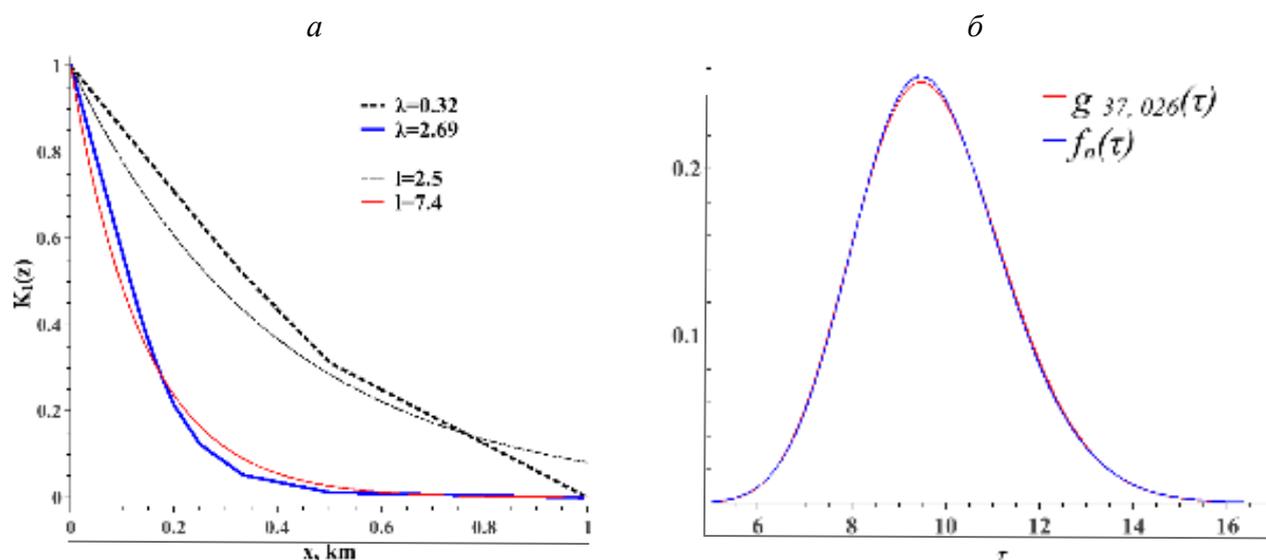


Рис. 3: а) Графики корреляционных функций  $K_I(z)$  поля  $\zeta_h(x, y, z)$ , построенные для пуассоновского распределения числа слоев  $n$  с параметром  $\lambda$  и соответствующих экспоненциальных корреляционных функций из класса Пойа; б) плотность  $f_h(u)$  одномерного распределения интеграла по "вертикальной" переменной  $z$  от поля  $\zeta_h(x, y, z)$ , смоделированного для непрерывного распределения величины  $h$ , и плотность заданного гамма-распределения  $g_{37,0.26}(u)$ .

### Новые вычислительные модели процессов нефтедобычи

М. И. Иванов, И. А. Кремер, к.ф.-м.н., Ю. М. Лаевский, д.ф.-м.н.

Лаборатория математических задач химии

Разработаны новые алгоритмы численного решения 3D задач фильтрации двухфазной несжимаемой жидкости при наличии нагнетательных и добывающих скважин. В основе предложенных алгоритмов лежит комбинация смешанного метода конечных элементов для вычисления давления и вектора суммарной скорости и противопотоковая схема метода конечных объемов для вычисления водонасыщенности. Рассмотрен как изотропный, так и анизотропный пласт. Предложенная методика распространена на модели двойной пористости описания трещиновато-пористых сред. Учет скважин осуществляется как непосредственным заданием потоков на границах скважин, так и интегральными дебитами при некотором неизвестном давлении. Предложена эффективная регуляризация вырожденной задачи для давления и суммарной скорости [11–15].

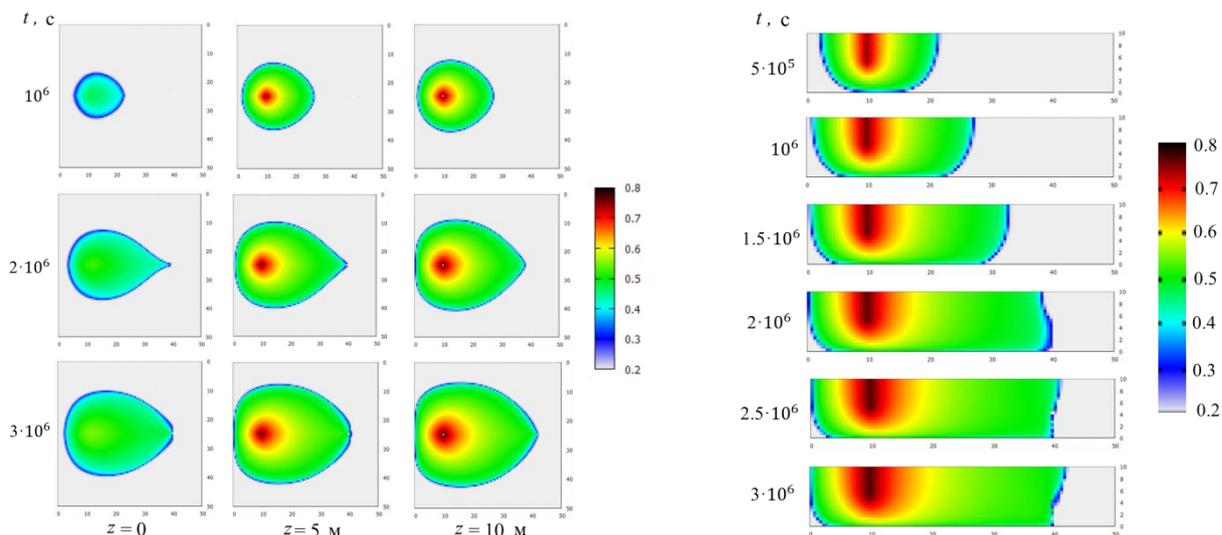


Рис. 4: Водонасыщенность в плоскостях  $z = 0$ ,  $z = 5$  м и  $z = 10$  м  $x = 25$  м

### Новый метод определения эффективного тензора жесткости методом “виртуального эксперимента” с цифровыми двойниками зерна

Г. В. Решетова, д.ф.-м.н.

Лаборатория вычислительных задач геофизики

В настоящее время широко используемый подход для определения упругих характеристик образцов зерна состоит в проведении дорогостоящих трудо/время затратных физических лабораторных экспериментов. Разработан альтернативный подход, основанный на математическом моделировании “виртуального эксперимента” по цифровым 3D изображениям компьютерной томографии. Метод основан на принципе эквивалентности энергии деформаций, в котором в качестве однородных граничных условий выбираются статические граничные условия, имитирующие физический эксперимент и определяются компоненты тензора жесткости. Особенностью алгоритма является новая схема решения задач статического нагружения образца методом установления задачи динамической теории упругости и схема параллельной реализации на основе MPI+OpenMP. Точность метода определения эффективных параметров проверялась на однородных образцах с известными свойствами, и слоистых, для которых эффективные параметры рассчитывались по методу Шенберга [16–18].

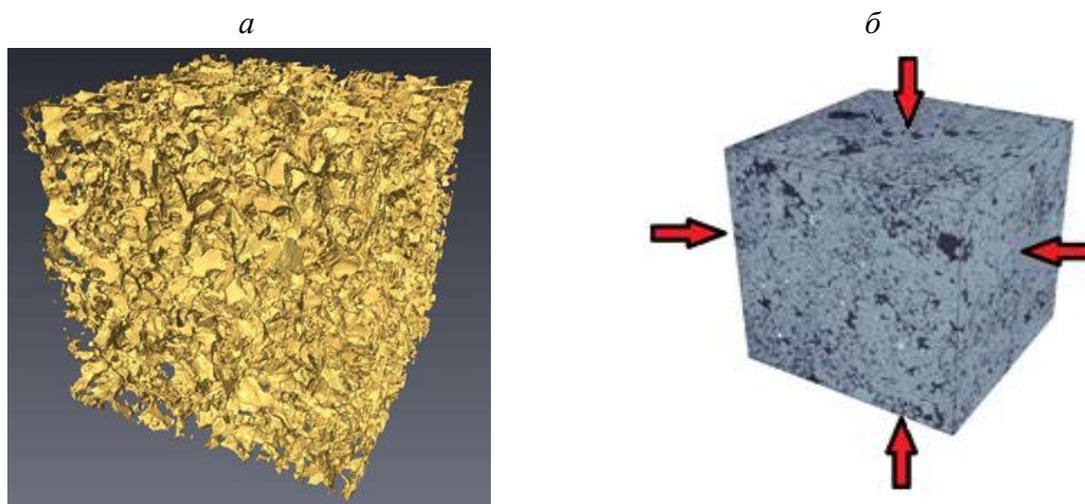


Рис. 5: Цифровой образец зерна (а) и математическое моделирование физического эксперимента (б)

## Реализация нового быстрого метода расчёта распространения цунами на ПК с использованием FPGA плат

Ан. Г. Марчук, д.ф.-м.н.

Лаборатория математического моделирования волн цунами

Реализован численный метод расчёта распространения волн цунами в рамках нелинейной модели мелкой воды с применением вентильной матрицы, программируемой пользователем (FPGA). Суть подхода заключается в использовании специализированной платы, с учётом интенсивности потоков данных при расчёте динамики волны по разностной схеме МакКормака. Адаптация алгоритма к FPGA осуществлена в сотрудничестве с ИАЭ СО РАН. Использование такой вычислительной архитектуры позволило достичь ускорения расчётов более чем в 200 раз по сравнению с моделированием на том же ПК без FPGA платы [19]. При использовании такого подхода численное моделирование распространения цунами на участке океана с реальным рельефом дна (пример расчета для Камчатского побережья приведен на рис. 6) занимает несколько десятков секунд, что даёт возможность оценивать ожидаемую высоту цунами у берега до её прихода туда.

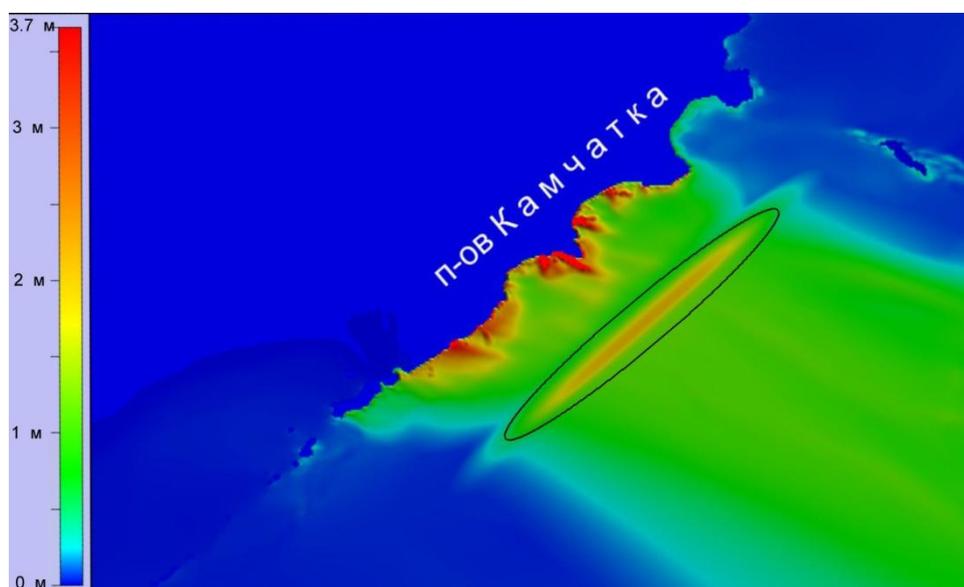


Рис. 6: Распределение максимумов высоты цунами от вытянутого модельного источника длиной 500 км в сегменте расчётной области у берегов Камчатки, рассчитанное по схеме МакКормака с применением FPGA платы. Максимальная высота начального смещения водной поверхности в эллипсовидном очаге составляла +2 м

## Обоснование нестандартности взрыва сверхновых типа Ia с помощью вычислительного эксперимента на суперЭВМ

И. М. Куликов, д.ф.-м.н., И. Г. Черных, к.ф.-м.н.

Лаборатория суперкомпьютерного моделирования

Сверхновые звезды типа Ia (белые карлики) используются в виде «стандартных свечей» для измерения расстояний во Вселенной. Однако, экспериментально были обнаружены вариации кривых блеска, на что обратил внимание профессор А.В. Тутуков (Институт астрономии РАН). Необходимо было теоретически обосновать этот эффект. В работе теоретически обоснована нестандартность взрыва сверхновых типа Ia с помощью вычислительного эксперимента на суперкомпьютере НКС-1П (ССКЦ ИВМиМГ СО РАН), оснащенного про-

цессорами Intel Xeon Phi KNL. Для описания эволюции белых карликов и их взрыва в виде сверхновой типа Ia разработана гидродинамическая модель вырожденного газа с использованием звездного уравнения состояния. Для описания гидродинамической модели используется система уравнений гравитационной газовой динамики, переопределенная уравнением для энтропии. Такая запись уравнений позволяет разработать эффективную программную реализацию с использованием векторных инструкций AVX-512. Вычислительные эксперименты показали, что в зависимости от ядерного горения углерода варьируется энергия взрыва, что приводит к различию в кривых блеска. Что в свою очередь говорит о ненадежности использования этого эталона [20, 21].

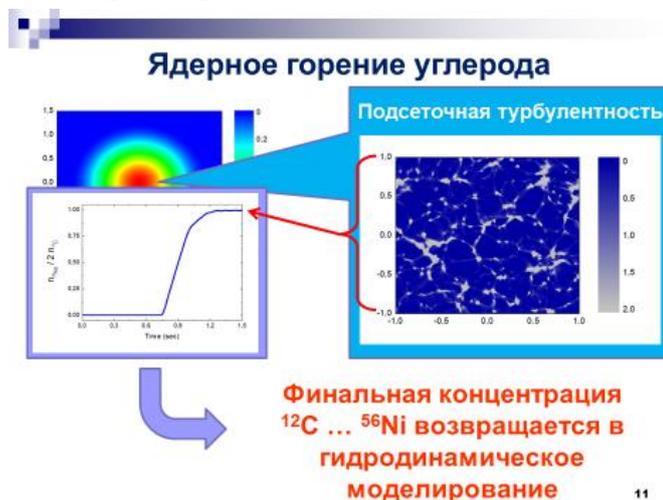


Рис. 7

### **Разработаны и реализованы алгоритмы системы LuNA, существенно повышающие её производительность**

В. Э. Малышкин, к.ф.-м.н., В. А. Перепёлкин, Н. А. Беляев, С. Е. Киреев  
Лаборатория синтеза параллельных программ

В лаборатории разрабатывается язык и система LuNA автоматизации конструирования параллельных программ численного моделирования. Система освобождает пользователя от решения таких сложных задач параллельного программирования как программирование коммуникаций, синхронизация процессов и потоков, планирование вычислений, распределение и динамическое перераспределение ресурсов и т.п. Основным результатом исследований в 2019 г. стало существенное (до 1–1,5 порядков) повышение производительности работы системы LuNA по сравнению с предыдущей версией системы, что позволило: 1) повысить производительность исполнения LuNA-программ и 2) расширить класс прикладных задач, на которых система LuNA обеспечивает приемлемую производительность. Это определяет значимость работы. Отставание в производительности от ручной реализации составляет 2–3 раза и более (для сложных программ). Повышения производительности удалось достичь за счёт трансляции исходной LuNA-программы в новую императивную модель вычислений мультиагентного типа, а также за счёт применения узкоспециализированных алгоритмов компиляции и исполнения к LuNA-программам частного вида. Разработка модели и алгоритмов составляет новизну работы [22–23].



and Computational Biology, World Scientific Pub Co Pte Lt, 2019. V. 17. 1940002, doi: 10.1142/s021972001940002x.

3. Penenko, A. A Newton-Kantorovich method in inverse source problems for production-destruction models with time series-type measurement data // Numerical Analysis and Applications, Pleiades Publishing Ltd. 2019. V. 12. P. 51–69, doi: 10.1134/S1995423919010051.

4. Kaganer, V. M.; Sabelfeld, K. K.; Brandt, O. Piezoelectric field, exciton life time, and cathodoluminescence intensity at threading dislocations in GaN{0001}. Applied Physics Letters. 112 (2018), iss. 12. 122101. (Импакт-фактор 3.495).

5. Kaganer, V. M.; Laehnemann J.; Pfueller C.; Sabelfeld K. K.; Kireeva A. E.; Brandt, O. Determination of the carrier diffusion length in GaN from cathodoluminescence maps around threading dislocations: fallacies and opportunities. Physical Review Applied. 2019. V. 12. N 5. 054023. (Импакт фоктор 4.532).

6. Kaganer, V.; Laehnemann, J.; Pfueller, C.; Brandt, O.; Sabelfeld, K.; Kireeva, A. Can we determine the carrier diffusion length in GaN from cathodoluminescence maps around threading dislocations? International Conference on Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (DRIP XVIII), Berlin, Sept. 8–12, 2019.

7. Михайлов, Г. А.; Каблукова, Е. Г.; Огородников, В. А.; Пригарин, С. М. Построение численно-статистической модели однородного случайного поля с заданным распределением интеграла по одной из фазовых координат // ДАН. 2019. Т. 489, № 2. С. 19–23.

Перевод: Mikhailov, G. A.; Kablukova, E. G.; Ogorodnikov, V. A.; Prigarin, S. M. Constructing a Numerically Statistical Model of a Homogeneous Random Field with a Given Distribution of the Integral over One of the Phase Coordinates. Dokl. Mathematics. 2019. V. 100, N 3. P. 1–4.

8. Kablukova, E. G.; Mikhailov, G. A.; Ogorodnikov, V. A.; Prigarin, S. M. Simulation of a random field with given distribution of one-dimensional integral. RJNAMM. 2019. 34(6). P. 327–338.

9. Каблукова, Е. Г.; Михайлов, Г. А.; Огородников, В. А.; Пригарин, С. М. Построение численно-статистической модели однородного случайного поля с заданным распределением интеграла по одной из фазовых координат. (Приглашенный доклад на Международной конференции «АПВПМ-2019»).

10. Mikhailov, G.; Kablukova, E.; Ogorodnikov, V.; Prigarin, S. Construting a numerially statistical model of a homogeneous random field with the given distribution of the integral over one of the phase coordinates (Пленарный доклад на 11-й Международной молодежной научной школе-конференции «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач»).

11. Ivanov, M. I.; Kremer, I. A.; Laevsky, Yu. M. On the upwind scheme for solving to filtration problem // Sib. Electronic Math. Reports. 2019. V. 16. P. 757–776 (WoS, Scopus, SJR: Q2). DOI: 10.33048/semi.2019.16.051.

12. Ivanov, M. I.; Kremer, I. A.; Laevsky, Yu. M. On wells modeling in filtration problems // Sib. Electronic Math. Reports. 2019. V. 16. P. 1868–1884 (WoS, Scopus, SJR: Q2). DOI 10.33048/semi.2019.16.133.

13. Лаевский, Ю. М.; Иванов, М. И.; Кремер, И. А. Об одной противопотоковой схеме решения уравнения Баклея – Леверетта // Международная конференция "АПВПМ ", 1–5 июля 2019 г., Новосибирск (плeнарный доклад).

14. Иванов, М. И.; Кремер, И. А.; Лаевский, Ю. М. Смешанный метод конечных элементов решения вырожденной задачи Неймана // Международная конференция "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики", 1–5 июля 2019 г., Новосибирск (устный доклад).

15. Laevsky, Yu. Some approaches to oil reservoir simulation // The Week of Applied Mathematics and Mathematical Modelling, The Third International conference Multiscale methods and Largescale Scientific Computing, Vladivostok, Oct. 7–11, 2019. (плeнарный доклад).

16. Reshetova, G.; Cheverda, V.; Khachkova, T. A Comparison of MPI/OpenMP and Coarray Fortran for Digital Rock Physics Application // *Lecture Notes in Computer Science*. 2019. V. 11657. P. 232–244. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-25636-4\\_19](https://doi.org/10.1007/978-3-030-25636-4_19) (WoS).
17. Reshetova, G.; Khachkova, T. Parallel Numerical Method to Estimate the Effective Elastic Moduli of Rock Core Samples from 3D Tomographic Images // *Lecture Notes in Computer Science*. 2019. V. 11386. P. 452–460. DOI [https://doi.org/10.1007/978-3-030-11539-5\\_52](https://doi.org/10.1007/978-3-030-11539-5_52) (WoS).
18. Reshetova, G.; Cheverda, V.; Lisitsa, V.; Khachkova, T. Multiscale Digital Rock Modeling for Reservoir Simulation // *OnePetro, Conference Paper, PE/IATMI Asia Pacific Oil & Gas Conference and Exhibition*. [Electron. resource]. <https://doi.org/10.2118/196561-MS> (WoS).
19. Lavrentiev, M.; Lysakov, K.; Marchuk, An.; Oblaukhov, K.; Shadrin, M. Fast evaluation of tsunami waves heights around Kamchatka and Kuril Islands // *Science of Tsunami HAZARDS*, 2019. V. 38, Num. 1. P. 1–13.
20. Kulikov, I.; Chernykh, I.; Tutukov, A. A new hydrodynamic code with explicit vectorization instructions optimizations, dedicated to the numerical simulation of astrophysical gas flow. I. Numerical method, tests and model problems // *The Astrophysical J. Supplement Series*. 2019. V. 243. Art. Num. 4. WoS, Q1.
21. Kulikov, I.; Chernykh, I.; Karavaev, D.; Berendeev, E.; Protasov, V. HydroBox3D: Parallel & Distributed Hydrodynamical Code for Numerical Simulation of Supernova Ia // *Lecture Notes in Computer Science*. 2019. V. 11657. P. 187–198. WoS, Q2.
22. Akhmed-Zaki, D.; Lebedev, D.; Malyshkin, V.; Perepelkin, V. Automated Construction of High Performance Distributed Programs in LuNA System. In: *Parallel Computing Technologies. PaCT 2019. Lecture Notes in Computer Science*. V. 11657. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-030-25636-4\_1.
23. Belyaev, N.; Kireev, S. LuNA-ICLU Compiler for Automated Generation of Iterative Fragmented Programs. In: *Parallel Computing Technologies. PaCT 2019. Lecture Notes in Computer Science*. V. 11657. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-030-25636-4\_2.
24. Токтошов, Г. Ы.; Юргенсон, А. Н.; Мигов, Д. А. Оптимизация маршрутов прокладки магистрального трубопровода для транспортировки георесурсов // *Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов*. 2019. Т. 330, № 6. С. 41–49. DOI: 10.18799/24131830/2019/6/2124.
25. Rodionov, A. S. On Evaluating a Network Throughput // *Proceedings of the 13th International Conference on Ubiquitous Information Management and Communication, IMCOM 2019, Phuket, Thailand, Jan. 4–6, 2019*. P. 34–41. DOI: 10.1007/978-3-030-19063-7\_3.
26. Lyakhov, O. A.; Toktoshov, G. Y. The Repair Works Planning Problems in the Utility Networks Nodes // *15<sup>th</sup> IEEE International Asian School-Seminar "Optimization Problems of complex systems"*, Novosibirsk, Aug. 26–30, 2019. P. 92–95. DOI: 10.1109/OPCS.2019.8880256.
27. Tkachev, K. V. The Interaction Interface Between the Model and the Observer Agent in the Simulation System // *15<sup>th</sup> IEEE International Asian School-Seminar "Optimization Problems of complex systems"*, Novosibirsk, August 26–30, 2019.
28. Tkachev, K. V.; Volzhankina, K. A.; Migov, D. A. Comparison of the Work of Algorithms for Arranging Message Distribution Devices in Transport Networks // *15<sup>th</sup> IEEE International Asian School-Seminar "Optimization Problems of complex systems"*, Novosibirsk, Aug. 26–30, 2019. P. 200–203.
29. Kalney, A.; Nasibullina, T.; Migov, D.; Rodionov, A.; Tkachev, K.; Toktoshov, G. Designing of Optimal Power Supply Networks for the Equipment of Multifunctional Safety Systems (MFSS) // *15<sup>th</sup> IEEE International Asian School-Seminar "Optimization Problems of complex systems"*, Novosibirsk, August 26–30, 2019. P. 187–191.