

ВАЖНЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИВМИМГ СО РАН В 2018 г.

Решением Ученого совета отобраны два важнейших результата

1. Новые алгоритмы метода Монте-Карло для оценки вероятностных моментов параметров критичности процесса рассеяния частиц с размножением в случайных средах

Советник РАН, чл.-корр. РАН Михайлов Г. А., к.ф.-м.н. Лотова Г. З.

По аналогии с методом Келлога построен допускающий распараллеливание алгоритм метода Монте-Карло для оценки вероятностных моментов ведущего характеристического числа k уравнения переноса частиц с размножением в случайной среде. С этой же целью разработан рандомизированный метод гомогенизации на основе теории малых возмущений и диффузионного приближения. Тестовые расчеты, проведенные для однорупповой сферически симметричной модели системы, показали удовлетворительное согласование результатов, полученных двумя методами [1-2].

2. Построение математической модели земной коры по данным метода приемной функции и ее верификация с применением математического моделирования и методов активной сейсмологии

Д.т.н. Ковалевский В. В., к.ф.-м.н. Караваев Д. А., Брагинская Л. П., Григорюк А. П.

Построена существенно неоднородная 2D скоростная модель земной коры южного Прибайкалья по данным метода приемной функции с выделением в коде Р-волны обменных поперечных волн на основе двумерной сплайновой аппроксимации данных эксперимента PASSCAL. Разработаны параллельные алгоритмы и программы на основе конечноразностных методов с реализацией на кластере НКС-30Т Сибирского суперкомпьютерного центра и выполнено математическое моделирование полного вибросейсмического поля.

Впервые получены теоретические (синтетические) сейсмограммы для разработанной модели эксперимента PASSCAL на профиле Байкал – Улан-Батор, которые показали преобладание в волновом поле прямых и рассеянных волн в отличие от отраженных, преломленных и головных волн для известных слоистых моделей земной коры. Показано хорошее согласование теоретических сейсмограмм с регистрируемыми сейсмограммами, полученными методами активной сейсмологии, и вибросейсмическими данными, полученными ИВМиМГ СО РАН и ГИН СО РАН в Байкальском регионе.

Важнейшие результаты по секциям Ученого совета

Секция "Вычислительная математика и численное моделирование физики атмосферы и гидросферы"

Методы стохастического моделирования для вычисления интенсивности катодолюминесценции и тока, индуцированного электронным пучком для визуализации дислокаций в полупроводника

Д.ф.-м.н. Сабельфельд К. К., к.ф.-м.н. Киреева А. А.

Предложен новый бессеточный стохастический алгоритм вычисления интенсивности катодолюминесценции и тока, индуцированного электронным пучком. На его основе проведена серия расчетов катодолюминесцентных карт для полупроводников с краевыми дислокациями. Получен новый результат в физике взаимодействия экситонов и дислокаций: наши расчеты показали, что как интенсивность катодолюминесценции, так и распределение энергии запрещенной зоны в окрестности дислокации в рамках традиционного представления краевой дислокации в виде твердого цилиндра (диаметром порядка 3 нанометров) находятся в значительном противоречии с экспериментальными данными. Этот результат поставил задачу построения новой, фи-

зически обоснованной математической модели транспорта экситонов при наличии дислокаций для проверки предложенной нами теории взаимодействия экситонов и дислокаций. Над подобной теорией работают многие группы в мире, однако сложность самой физической задачи и отсутствие методов моделирования таких сложных взаимодействий экситонов с ансамблями дислокаций до сих пор препятствовали построению такой теории.

По предложенной нами совместно с группой ученых-физиков из Института твердотельной электроники им. П. Друде (PDI, Berlin) теории электрическое поле вокруг дислокации формируется за счет упругих сил, поскольку нитрид галлия (GaN) является пьезоэлектрическим кристаллом, и нам потребовалось точно вычислить приповерхностное поле в окрестности выхода дислокации на поверхность кристалла, поскольку именно оно может приводить к нерадиационной рекомбинации экситона.

При работе над данной проблемой нами построена теория взаимодействия экситона с дислокацией и на ее основе создан стохастический алгоритм для расчета катодолюминесценции и в целом катодолюминесцентных карт дислокаций. Построен алгоритм моделирования движения экситона в пьезоэлектрическом поле в окрестности дислокации с учетом того, что вектор скоростей вокруг дислокации чрезвычайно сложен и имеет большие градиенты при приближении к оси дислокации, где число Пекле резко возрастает. Стохастический алгоритм моделирования движения экситонов в таком поле скоростей удалось построить и реализовать на основе точного (аналитического) вычисления распределения позиции экситона на поверхности сферы [3–6].

Алгоритм расчета ортоскопических и коноскопических интерференционных картин для одноосных кристаллов

Д.т.н. Дебелов В. А., к.ф.-м.н. Васильева Л. Ф.

Разработан алгоритм расчета ортоскопических и коноскопических интерференционных картин для немагнитных прозрачных оптически одноосных кристаллов. Впервые выполнен расчет реалистических цветных интерференционных картин (на примере кальцита и кварца). Упомянутые картины являются важным инструментом в работе петрографов, кристаллооптиков, ювелиров и др. при определении типа и качества исследуемого образца минерала.

Результат расширяет возможности систем виртуальной реальности при физически корректном моделировании природных оптических явлений. Расчетный алгоритм базируется на прямом физически корректном моделировании взаимодействия лучей света с анизотропными средами. Применяется трассировка лучей света, характеризующихся состоянием поляризации, фазой и индикатором когерентности. Аналогичные результаты, судя по публикациям, отсутствуют. При отладке алгоритма проводилось качественное сравнение с фотографией реальной картины [7, 8].

Модель нагрева и остывания пластины дивертора с учетом испарения под воздействием высокоскоростного пучка электронов

Чл.-корр. РАН Лазарева Г. Г., м.н.с. Максимова А. Г.

Расширена математическая модель нагрева и остывания пластины дивертора из тугоплавкого металла вольфрама под воздействием высокоскоростного пучка электронов с учетом процессов плавления и испарения. Модель основана на решении двухфазной задачи Стефана. Положение и скорость движения границы раздела фаз зависят от разрывных нелинейных коэффициентов. Плотность, теплопроводность и удельная теплоемкость учтены как зависимости от температуры материала в диапазоне $300 \text{ K} < T < 8000 \text{ K}$. Эти функции имеют разрывы или теряют гладкость при температуре плавления 3695 K . Условие на границе свободный расплав – твердое тело состоит в непрерывности температуры и разрывности теплового потока за счет поглощения или выделения известного количества тепла. На решение задачи большое влияние оказывают разрывные по пространству и времени нелинейные граничные условия, описывающие нагрев и испарение материала. При проведении экспериментов на установке ВЕТА вольфрамовые образ-

цы подвергались воздействию осесимметричного электронного пучка с энергией 80–90 кВт. Распределение плотности теплового потока по поверхности измерялось с помощью рентгеновской визуализации. Для реализации схемы непрерывного счета условие на свободной границе включено в решаемое уравнение теплопроводности. Расчеты проводились с интервалом сглаживания 5 К. Процесс испарения на границе учитывался в расчете результирующего потока энергии через мощность теплового потока, потерю мощности, температуру на границе, давление насыщенного пара и скорость испарения. Сравнение экспериментально полученных радиусов расплавленной области в различные моменты времени с расчетными данными показывают сильное влияние учета процесса испарения [9].

Модель двойной пористости на основе гибридной функции перетока

Д.ф.-м.н. Лаевский Ю. М. в соавторстве с сотрудниками СВФУ (г. Якутск) к.ф.-м.н. Григорьевым А. В. и к.ф. м.н. Яковлевым П. Г.

Предложена модель двойной пористости для трещиновато-пористой среды с использованием комбинации классической и градиентной функций массообмена между трещинами и пористыми блоками в случае течения слабо сжимаемой однофазной жидкости. Такая функция массообмена позволяет учитывать анизотропные свойства фильтрации в более общем, по сравнению с известными моделями, виде. Введено понятие эффективной нормали к трещиноватой среде. Установлено достаточное условие разрешимости соответствующей дифференциальной задачи в виде неравенства, при котором справедлива априорная оценка решения. В случае переменной эффективной нормали возможно возникновение неустойчивости, и наличие слагаемого, соответствующего классической функции перетока, служит своего рода стабилизатором. Вычислительный алгоритм основан на использовании конечно-элементной аппроксимации по пространству и полностью неявной аппроксимации по времени. Для сеточной задачи также получена априорная оценка при том же условии, что и для дифференциальной задачи. Найден набор параметров, для которых возникает неустойчивость [10,11].

Метод декомпозиции расчетной области на две подобласти без их пересечения для решения трехмерных внешних краевых задач для уравнения Лапласа

Д.ф.-м.н. Свешников В. М., к.ф.-м.н. А. О. Савченко, Петухов А. В.

Предложен, теоретически и экспериментально исследован метод декомпозиции расчетной области на две подобласти без пересечения для решения трехмерных внешних краевых задач для уравнения Лапласа, описывающего распределение потенциала электрического поля. Исходная краевая задача сводится к двум подзадачам: внутренней и внешней на сфере, которые решаются параллельно. Предложен метод выделения особенности во внешней краевой задаче. Для сшивки решений на границе сопряжения подобластей (сфере) записывается специальное операторное уравнение, которое аппроксимируется системой линейных алгебраических уравнений. Данная система решается итерационными методами в подпространствах Крылова. Примеры решения модельных задач подтверждают работоспособность предлагаемого подхода [12].

Методы решения условно-корректных обратных задач продолжения и производных от них задач усвоения данных с учетом неопределенностей на базе вариационных принципов со слабыми ограничениями для математических моделей процессов гидротермодинамики, переноса и трансформации примесей в атмосфере

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

Разработаны новые методы решения условно-корректных обратных задач продолжения и производных от них задач усвоения данных на базе вариационных принципов со слабыми ограничениями для математических моделей процессов и данных наблюдений с учетом неопределенностей. Для построения численных алгоритмов применяется концепция локальных сопряженных задач в сочетании с методами расщепления и декомпозиции операторов моделей и

функционалов. Принципиальные положения разработаны для четырехмерных задач гидротермодинамики геофизических жидкостей (атмосфера, водные объекты) в системе Земля и, на их основе, задач охраны окружающей среды. Методы используются в задачах, где необходим учет сложной конфигурации областей и их границ, а также в тех случаях, когда отсутствуют данные об источниках или о граничных условиях.

Исследование температурных аномалий Арктического шельфа и процессов разрушения субаквальной мерзлоты на основе комплекса региональных вложенных моделей

Д.ф.-м.н. Платов Г. А., д.ф.-м.н. Голубева Е. Н., к.ф.-м.н. Малахова В. В.

Сформирован комплекс региональных вложенных моделей окраинных морей Арктики. На основе разработанного комплекса проведено исследование изменчивости гидрологии Сибирских морей, обусловленной современными климатическими процессами. Использование технологии встроенных моделей позволило воспроизвести и уточнить процессы, протекающие на шельфе моря Лаптевых в летний период. Наиболее важными среди них являются процессы распространения пресных вод р. Лены при различных режимах атмосферной циркуляции и формирование аномалий температуры, способных проникать в придонный слой, способствуя разрушению субаквальной мерзлоты [13–15].

Секция "Математическое моделирование и методы прикладной математики"

Новые семейства точных решений двумерного уравнения эйконала

Москаленский Е. Д.

Предложен способ получения решений двумерного уравнения эйконала для случая, когда скорость в среде зависит только от одной координаты. Причиной интереса к такому типу уравнения является то, что двумерное уравнение эйконала общего вида сводится, с помощью конформной замены переменных, к уравнению, в котором правая часть зависит от одной переменной. За счет подбора общего вида решения удалось, в некоторых случаях, свести исходное уравнение к одному или нескольким обыкновенным дифференциальным уравнениям, поддающимся решению. Полученные результаты могут быть использованы при исследовании распространения волн цунами, например для тестирования численных методов расчета [16].

Оценка упругих свойств образцов горной породы по 3D цифровым изображениям компьютерной томографии

Д.ф.-м.н. Решетова Г. В.

В настоящее время широко используемый подход к определению упругих характеристик образцов керна состоит в проведении дорогостоящих трудо/время затратных физических лабораторных экспериментов. Разработан альтернативный подход, основанный на математическом моделировании "виртуального эксперимента" по 2D и 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 податливости. 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 [17–21].

Метод восстановления изображений трехмерных объектов в спектральной позитронной эмиссионной томографии с учетом комптоновского рассеяния

Д.ф.-м.н. Казанцев И. Г.

Разработан метод восстановления изображений по томографическим проекциям, регистрируемым детекторами высокого спектрального разрешения, обладающими возможностью регистрации фотонов, претерпевших комптоновское рассеяние. Доказано, что при необременительных ограничениях восстановление может быть произведено с использованием алгоритма обращения послойного лучевого преобразования Радона. Эксперименты позволяют сделать вывод, что многоспектральная информация, содержащаяся в данных рассеяния, может быть успешно использована наравне с традиционным монохроматическим излучением. Подход может быть применен в задачах улучшения разрешения на многоспектральных данных, используемых в сканерах эмиссионной томографии [22].

Секция "Параллельные и распределенные вычисления"

Разработка алгоритмов и реализация подсистемы управления библиотекой фрагментированных подпрограмм

Д.т.н. Малышкин В. Э., Городничев М. А., Киреев С. Е., Перепелкин В. А.

Разработана и реализована подсистема управления библиотекой параллельных фрагментированных подпрограмм (модулей) на базе системы программирования LuNA. Библиотека хранит модули, пополняется новыми, а также предоставляет информацию о модулях и их свойствах в унифицированном виде. Спецификация функциональных свойств модулей выполняется путем введения вычислительной модели предметной области, при этом входные и выходные параметры библиотечной подпрограммы ставятся в соответствие переменным этой вычислительной модели. Реализована подсистема для включения библиотечных фрагментированных подпрограмм в прикладные программы. Система LuNA предоставляет программисту прикладной программный интерфейс, позволяющий осуществлять запуск библиотечных фрагментированных подпрограмм в программах, написанных на языке C++.

В качестве экспериментального примера применения подсистемы для включения библиотечных фрагментированных программ в прикладные программы разработан скелетон (каркас) программы решения задач пространственной динамики методом частиц-в-ячейках.

Суперкомпьютерное моделирование астрофизических объектов

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

Получены важнейшие результаты в области исследования взрыва сверхновых звезд типа Ia на основе эволюции белых карликов. Разработана вычислительная модель процесса сверхновой типа Ia на массивно-параллельных суперкомпьютерах с использованием технологии адаптивных вложенных сеток. Для реализации используется стек технологий параллельных вычислений FFTW/MPI/OpenMP/CUDA/AVX-512. С помощью вычислительных экспериментов на суперЭВМ исследованы два сценария взрыва сверхновых типа Ia, в основе которых – взрыв на периферии звезды.

Получены важнейшие результаты в области исследования процессов звездообразования во взаимодействующих галактиках. Проведено исследование процесса звездообразования в ходе столкновения S и E галактик. С помощью вычислительного эксперимента на суперЭВМ показано образование двухрукавного диска из молодых звезд [23].

Big data и обработка данных площадных сейсмических наблюдений

Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Кабанихин С. И., д.ф.-м.н. Шишленин М. А., Новиков Н. С.

Создание алгоритмов и комплекса программ численного решения обратных задач акустики и сейсморазведки при реализации платформы цифрового интеллектуального месторождения на основе обработки площадных систем наблюдений в сейсморазведке и микросейсмическом мониторинге, исследования и решения трехмерных аналогов уравнений Гельфанда – Левитана – Крейна на основе малоранговых аппроксимаций, тензорного разложения и теплицевых матриц при обработке больших данных. Показано, что применение методов, использующих структуру матриц, можно уменьшить число операций, необходимых для решения обратной задачи, на два порядка.

Параллельные алгоритмы численного статистического моделирования для решения стохастических дифференциальных уравнений с частными производными

Д.ф.-м.н. Артемьев С. С., проф. РАН, д.ф.-м.н. Марченко М. А., Смирнов Д. Д.

Разработаны и реализованы на суперкомпьютере параллельные алгоритмы численного статистического моделирования решений стохастических дифференциальных уравнений с частными производными – одномерных и двумерных уравнений теплопроводности, Бюргерса и Кортевега-де-Фриза, а также для обратной задачи гравиметрии.

Секция "Информационные системы"

Эволюционные методы оптимизации инженерных сетей

К.ф.-м.н. Мигов Д. А., к.т.н. Монахов О. Г., к.т.н. Токтошов Г. Ы., к.ф.-м.н. Юргенсон А. Н.

Разработаны методы оптимального синтеза сетей инженерных коммуникаций по критерию минимума суммарных затрат на их строительство и эксплуатацию, основанные на иерархической гиперсетевой модели. Предложен метод дифференциальной эволюции, позволяющий улучшить первоначальное решение путем отображения ребер вторичной сети в первичную сеть с использованием дополнительных точек Штейнера. Разработан новый метод поиска оптимальных трасс для прокладки инженерных сетей, учитывающий несовместимость различных типов ресурсов для их прокладки по групповой (общей) трассе. Кроме того, разработан модифицированный муравьиный алгоритм, обеспечивающий получение не только экономичного, но и достаточно надежного по отношению к заданному порогу решения при условии, что сбои происходят в первичной (физической) сети. Проведенные численные эксперименты показывают применимость предложенных методов.

Публикации:

1. Mikhailov G. A., Lotova G. Z. New Monte Carlo algorithms for estimating probability moments of criticality parameters for a scattering process with multiplication in stochastic media // *Doklady Math.* 2018. Vol. 97, N 1. P. 6–10. DOI: 10.1134/S1064562418010039.

2. Mikhailov G. A., Lotova G. Z. Monte Carlo methods for estimating the probability distributions of criticality parameters of particle transport in a random medium // *Comput. Math. and Math. Phys.* 2018. Vol. 58, N 11. P. 1828–1837. DOI: 10.1134/S09655f42518110088.

3. Kaganer, V. M, Sabelfeld, K. K., Brandt, O. Piezoelectric field, exciton lifetime, and cathodoluminescence intensity at threading dislocations in GaN{0001} // *Appl. Phys. Let.*, v. 112 (2018), iss. 12, 122101.

4. Sabelfeld K. Application of the von Mises-Fisher distribution to Random Walk on Spheres method for solving high-dimensional diffusion-advection-reaction equations // *Stat. and Probab. Let.*, v. 138 (2018). P. 137–142.

5. Karl K. Sabelfeld, Anastasya E. Kireeva, Vladimir M. Kaganer, and Oliver Brandt. Drift and diffusion of excitons at threading dislocations in GaN{0001}, *Phys. Rev. Let.*, 2018, submitted.

6. Sabelfeld K. A mesh free algorithm for solving diffusion-convection-reaction equations on complicated domains // *Doklady mathematics*, v. 898 (2). P. 435–438 (2018).
7. Васильева Л. Ф., Дебелов В. А., Шелепаев Р. А. О разработке виртуального полярископа // Труды Международной научной конференции SCVRT2018, ЦарьГрад, Московская обл., 20–23 нояб. 2018 г. С. 325–332.
8. Васильева Л. Ф., Дебелов В. А., Шелепаев Р. А. Компьютерная модель поляризационного микроскопа для наблюдения фотореалистических интерференционных картин // Труды Международной конференции "Вычислительная математика и математическая геофизика", Новосибирск, 8–10 окт. 2018 г. С. 82–93.
9. Arakcheev A. S., Apushkinskaya D. E., Kandaurov I. V., Kasatov A. A., Kurkuchekov V. V., Lazareva G. G., Maksimova A. G., Popov V. A., Snytnikov A. V., Trunev Yu. A., Vasilyev A. A., Vyacheslavov L. N. Two-dimensional numerical simulation of tungsten melting in exposure to pulsed electron beam // *Fusion Engin. and Design*. Jul. 2018. V. 132. P. 13–17.
11. Григорьев А. В., Лаевский Ю. М., Яковлев П. Г. О модели двойной пористости трещиновато-пористых коллекторов на основе гибридной функции перетока // *СибЖВМ*. 2018. Т. 21, № 2. С. 155–169.
[Grigoriev A. V., Laevsky Yu. M., Yakovlev P. G. On a double porosity model of fractured porous reservoirs based on a hybrid flow function // *Num. Analysis and Appl*. 2018. V. 11, iss. 2. P. 121–133.].
12. Свешников В. М., Савченко А. О., Петухов А. В. Численное решение трехмерных внешних краевых задач для уравнения Лапласа методом декомпозиции расчетной области без пересечения // *СибЖВМ*. Т. 21, № 4. С. 435–449.
13. Golubeva E., Platov G, Malakhova V., Kraineva M., Iakshina D. Modelling the longterm and inter-annual variability in the Laptev Sea hydrography and subsea permafrost state // *Polarforschung*. 2018. V. 87 (2). P. 195–210. DOI: 10.2312/polarforschung.87.2.195.
14. Malakhova V. V. Estimation of the subsea permafrost thickness in the Arctic Shelf // *Proc.SPIE 10833*, 24th International symposium on atmospheric and ocean optics: Atmospheric physics, 108337T, Dec. 13, 2018. DOI: 10.1117/12.2504197.
15. Fofonova V., Zhilyaev I., Kraineva M., Iakshina D., Tananaev N., Volkova N., Sander L., Papenmeier S., Michaelis R., Wiltshire K. H. Features of the water temperature long-term observations in the Lena River at basin outlet // *Polarforschung*. 2018. V. 87 (2). P. 135–150. DOI:10.2312/polarforschung.87.2.135.
16. Москаленский Е. Д. Новые семейства точных решений двумерного уравнения эйконала для случая, когда скорость в среде зависит только от одной координаты // *СибЖВМ*. 2018. Т. 21, № 3. С. 259–271.
17. Решетова Г. В., Хачкова Т. С. Численный метод оценки эффективных упругих характеристик горной породы по двумерным и трехмерным цифровым изображениям ядра // *Выч. методы и программирование*. 2017. Т. 18. С. 416–433.
18. Решетова Г. В., Хачкова Т. С. Параллельный алгоритм оценки упругих свойств образцов горной породы по 2D и 3D КТ-изображениям ядра // Тез. Междунар. геол.-геофиз. конф. и выставки "Современные технологии изучения и освоения недр Евразии" ("ГеоЕвразия –2018"), Москва, 5–8 февраля 2018 г.
19. Решетова Г. В., Хачкова Т. С. Определение эффективных упругих модулей образцов ядра по их трехмерным цифровым изображениям // Техн. конф. SPE "ПЕТРОФИЗИКА XXI", Петергоф, 4–5 июня 2018 г.
20. Reshetova G., Khachkova T. A method of determining effective elastic properties of rock core samples from 3D digital tomographic images // *Techn. paper 80th EAGE Conf. & Exhib.* 2018, Copenhagen (Denmark), June 11–14, 2018.

21. Решетова Г. В., Хачкова Т. С. Оценка упругих свойств образцов горной породы по цифровым изображениям керна // Тез. 14-й Международной выставки и научного конгресса "Интерэкспо ГЕО-Сибирь – 2018", Новосибирск, 25–27 апр. 2018 г.

22. Kazantsev I. G., Olsen U. L., Poulsen H. F., Hansen P. C. A spectral geometric model for Compton single scatter in PET based on the single scatter simulation approximation // *Inverse Problems*. 2018. Vol. 34, N 2. Paper 024002. DOI: 10.1088/1361-6420/aaa05d.

23. Kulikov I. M., Chernykh I. G., Glinskiy B. M., Protasov V. A. An efficient optimization of Hll method for the second generation of Intel Xeon Phi Processor // *Lobachevskii J. of Mathematics*. 2018. Vol. 39, iss. 4. P. 543–551.