

## ЛАБОРАТОРИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Зав. лабораторией к.ф.-м.н. Черных И. Г.

### Важнейшие достижения

#### Высокопроизводительная вычислительная модель плазменных течений в открытых ловушках в режиме диамагнитного удержания

Д.ф.-м.н. Вшивков В. А., д.ф.-м.н. Дудникова Г. И., к.ф.-м.н. Боронина М. А., к.ф.-м.н. Генрих Е. А.

Создана численная модель удержания и нагрева плазмы в осесимметричной открытой магнитной ловушке для установок УТС. Гибридная модель с использованием метода частиц-в-ячейках основана на кинетическом приближении для ионных компонент фоновой плазмы и инжектируемого пучка и МГД приближении для электронной компоненты. Создан комплекс программ для проведения численного моделирования диамагнитного режима ловушки, эксперименты по исследованию которого планируются на установке КОТ (ИЯФ СО РАН). Проведены вычислительные эксперименты по исследованию эволюции структуры магнитного поля и плазмы, получены временные и пространственные характеристики фоновой и удерживаемой плазмы в зависимости от энергии, тока и ионного состава инжектируемого пучка и других параметров.

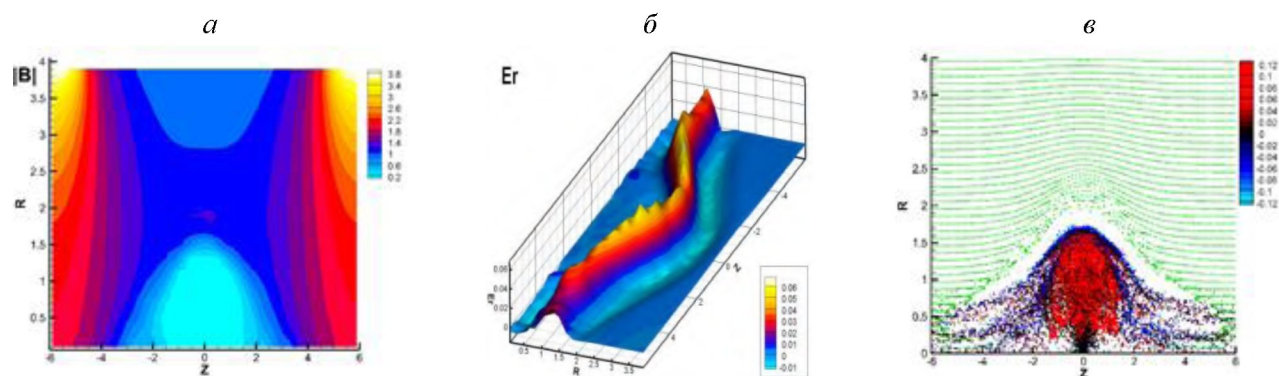


Рис. 1 – Значения модуля магнитного поля: формирование магнитной каверны (а); образование барьера электрического поля (б); распределение ионов в области решения: зеленый цвет – частицы фона, другие цвета – частицы инжектируемой и удерживаемой плазмы в зависимости от азимутальной скорости (в)

Результаты исследований опубликованы в работе

Boronina, M. A., Chernykh, I. G., Dudnikova, G. I., Genrikh, E. A., Vshivkov, V. A. Mathematical modelling of beam dynamics in diamagnetic confinement regime of open trap // J. of Phys.: Conf. Ser. 2028, 012020, 2021. DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012020.

Создана программа MTRAP-21 для моделирования истечения плазмы в осесимметричной линейной магнитной системе в режиме диамагнитного удержания, когда давление удерживаемой плазмы равно давлению магнитного поля ловушки. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021665047. Созданная программа позволяет проводить расчеты по исследованию режима диамагнитного удержания и равновесия плазмы, потери энергии и частиц из-за кулоновских столкновений при инжекции мощных атомарных пучков в открытую магнитную систему.

**Отчет по этапам научно-исследовательских работ, завершённым в 2021 г.  
в соответствии с планом НИР института**

**Проект НИР** "Суперкомпьютерные технологии решения больших задач естествознания, математические модели, методы анализа и оптимизации сложных информационных систем".

Номер государственной регистрации 0251-2021-0005.

Руководители: д.ф.-м.н., проф. РАН Марченко М. А., к.ф.-м.н. Черных И. Г.

Протестирована эффективность расчета динамики заряженных частиц в самосогласованном электромагнитном поле на методе частиц-в-ячейках.

Для тестирования производительности кода использован кластер НКС-1П Сибирского суперкомпьютерного центра и кластер НГУ. Тестирование проводилось в двух направлениях – определение производительности на одном узле в зависимости от архитектуры используемых процессоров, а также тестирование масштабируемости с использованием всех ресурсов суперкомпьютера.

Для тестирования кода на одном узле использовали следующие узлы

- 1) НКС-1П 2 × CPU Intel Xeon E5-2697A v4 (2.6 GHz, 16 cores),
- 2) НКС-1П 1 × Intel Xeon Phi 7290 KNL (1.5 GHz, 72 cores, avx-512),
- 3) НКС-1П 2 × Intel Xeon Platinum 8268 (2.9 GHz, 24 cores, avx512),
- 4) НГУ 4 × Intel Xeon Gold 6248 (2,5 Ghz, 20 cores, avx-512),

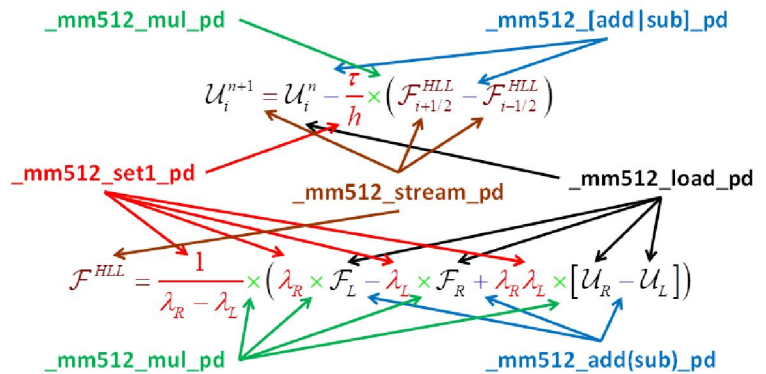
Было показано, что современные процессоры с поддержкой avx-512 являются наиболее подходящими для расчета движений частиц, поскольку в 3D геометрии для интерполяции полей и расчета плотности тока нужно не менее 8 узлов сетки, а хранение этих данных в локальных массивах позволяет добиться высокой производительности. В частности, узел 1 позволил обрабатывать  $1,5 \times 10^8$  частиц в секунду, узел 2 –  $2,3 \times 10^8$  ч/сек., узел 3 –  $3,7 \times 10^8$  ч/сек., узел 4 –  $7,2 \times 10^8$  ч/сек. Эти данные хорошо коррелируют с показателями пиковой производительности узла (кроме разве что KNL).

На кластере нкс-1П также были протестирована масштабируемость параллельного алгоритма и время коммуникаций. В качестве параллельного алгоритма была выбрана двухуровневая декомпозиция по пространству и по частицам внутри подобластей с топологией тора. Было использовано 18 узлов CPU Intel Xeon E5-2697A v4. Параметры расчета  $10^8$  узлов сетки и  $10^9$  частиц.

Эффективность распараллеливания на 18 узлах составила более 95 %. Частично это результат того, что на пересылки тратится существенно меньше времени, чем на обработку частиц. Однако само время коммуникаций при переходе от 4 до 18 узлов увеличилось лишь в 3 раза для коммуникаций внутри группы (пересылка плотности тока в режиме "все со всеми") и на несколько процентов для коммуникаций между группами.

Построена вычислительная гидродинамическая модель взаимодействующих галактик. Для описания межзвездной среды используется модель гравитационной многокомпонентной односкоростной гидродинамики. Для описания звездной компоненты и темной материи используется модель на базе первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана. Кроме процессов звездообразования и эффекта от взрыва сверхновых в подсеточную модель добавлены 28 химических и ядерных реакций основных форм водорода и гелия до образования простейшего соединения гидрида гелия. Векторная форма записи уравнений и использование HLL метода позволяет

Рис. – 2 Схема векторизации вычислений



использовать векторные расширения AVX-512 для ускорения вычислений (рис. 2). Достигнута 97-процентная масштабируемость при использовании 16 узлов. В рамках одного ускорителя Intel Xeon Phi 7290 достигнуто 41-кратное ускорение и 302 GFLOPS производительности. С помощью вычислительной модели проведены вычислительные эксперименты по моделированию химодинамики взаимодействующих галактик.

В ходе вычислительных экспериментов взаимодействующих галактик показано, что в центральной области образуется пик барионной материи и газовой компоненты (атомарного водорода). В то же время бесстолкновительные компоненты немного диссипируют в результате свободного прохождения сквозь друг друга. Это связано с работой приливных сил обеих галактик. В наиболее горячей области образуется молекулярный водород в характерных пропорциях относительно атомарного водорода. На фронте ударной волны имеет место рост скорости процесса звездообразования. Следует отметить, что область образования иона гидрида гелия сильно коррелирует с областью звездообразования и накладывается на область молекулярного водорода. Это связано с тем, что эта область наиболее горячая и складывается из влияния сверхновых молодых звезд и разогретой ударными волнами областями. Таким образом, экспериментальным путем подтверждена гипотеза местонахождения областей с активным образованием гидрида гелия.

Разработан новый метод решения уравнений движения заряженных частиц в электромагнитных полях и проведено его сравнение с различными известными модификациями метода Бориса. Созданные двумерный и трехмерный алгоритмы основаны на использовании точного решения дифференциального уравнения для скорости заряженной частицы на шаге по времени при постоянных значениях электрического и магнитного полей. Проведен сравнительный анализ метода Бориса, его модификаций и нового метода по точности и времени их работы. Показано, что новый метод позволяет точнее вычислять траекторию и скорость заряженной частицы без значительного увеличения времени и сложности расчетов. Установлено, что при выборе модификации метода Бориса для решения задачи в первую очередь следует обращать внимание на точность получаемого решения, поскольку более простой и быстрый алгоритм решения может не дать выигрыша по времени его реализации.

Получено свидетельство о государственной регистрации программы MTRAP-21 для ЭВМ № 2021665047, предназначенной для численного моделирования течения плазмы в осесимметричной линейной магнитной системе в режиме диамагнитного удержания, когда давление удерживаемой плазмы равно давлению магнитного поля ловушки. Программа реализована на языке Fortran-90. В основу программы положена гибридная численная модель, основанная на МГД

приближении для описания электронной компоненты плазмы и кинетическом приближении для ионов, учтены возможность различных методов инжекции частиц в ловушку и механизмы диссипации, обусловленные конечной проводимостью и электронной теплопроводностью. Проведенные расчеты продемонстрировали возможность формирования стационарной конфигурации диамагнитной ловушки в режиме с непрерывной инжекцией ионного пучка в приосевую область ловушки. Показано, что время формирования и размер образующейся магнитной каверны согласуются с полученными аналитическими оценками баланса частиц и энергии в системе. Созданная программа позволяет проводить расчеты по исследованию режима диамагнитного удержания и равновесия плазмы, потери энергии и частиц из-за кулоновских столкновений при инжекции мощных атомарных пучков в открытую магнитную систему.

Разработана модификация параллельной программы для двумерного моделирования динамики плазмы в диамагнитном режиме открытой магнитной системы с целью ускорения вычислений. Так как наибольшую долю времени расчета занимает процедура вычисления координат и скоростей частиц, то автоматическая векторизация цикла по частицам компилятором (применение одной операции к нескольким данным одновременно) позволила использовать процессоры в интенсивном режиме и улучшить производительность кода. Для этого частицы приписываются ячейкам, для каждой ячейки организовываются массивы лежащих в ней частиц, для каждой ячейки цикл по частицам векторизуется. При этом требуемая сортировка частиц по ячейкам обеспечивается сортировкой в начальный момент и алгоритмом пересылки частиц из ячейки в ячейку на каждом шаге по времени. При таком подходе для межпроцессорных пересылок и обработки граничных условий на частицы требуется перебор лишь частиц крайних ячеек процессоров, а не всех частиц. Получено ускорение расчетов в 1.5–2 раза.

Предложена модель взаимодействия лазерного поля с полностью ионизованной плазмой сверхкритической плотности в режиме "hole-boring", учитывающая как квантовую отдачу, так и спектральную отсечку на высоких энергиях. Результаты аналитических расчетов и трехмерного моделирования методом частиц-в-ячейках показали, что в прогнозируемых сценариях квантовые эффекты могут приводить к снижению эффективности преобразования лазерного излучения в высокоэнергетические фотоны в 2–3 раза. Аналитические расчеты показали, что такое квантовое подавление достигает максимума при определенном значении интенсивности и не растет с дальнейшим увеличением интенсивности. Немонотонное поведение коэффициента квантового подавления является результатом совместного влияния ускорения плазмы в продольном направлении и силы радиационного трения. Результаты численного моделирования подтверждают теоретические выводы. Прогнозируемые особенности могут служить подходящей диагностикой для тестирования различных теорий радиационного трения.

Для трехмерной гибридной модели диамагнитного режима открытой магнитной системы разработан новый алгоритм внеосевого ввода пучка в расчетную область, который позволяет точнее описать условия лабораторных экспериментов на установке КОТ (ИЯФ СО РАН).

Создана трехмерная численная модель взаимодействия тестирующего низкоэнергетического ленточного электронного пучка с релятивистским протонным сгустком, имеющая отношение к неразрушающей диагностике в физике высоких энергий. Электронный пучок моделируется путем расчета его траекторий в электромагнитном поле, генерируемом ионным сгустком. На основе серии вычислительных экспериментов получены зависимости отклонения электронного пучка от

его энергии и угла наклона к оси протонного сгустка, а также величины объемного заряда и скорости протонного сгустка. Показано, что амплитуда отклонения электронного пучка обратно пропорциональна его энергии и пропорциональна заряду и гамма-фактору протонного сгустка.

Предложен и обоснован метод мониторинга грязевых и магматических вулканов с применением мощных вибросейсмических источников, разработанных в СО РАН. Проведенные ранее экспериментальные работы на грязевых вулканах Таманской грязевулканической провинции и численные эксперименты показывают принципиальную возможность активного мониторинга вулканов. Основным достоинством таких источников является высокая повторяемость амплитудно-фазовых характеристик излучаемого сигнала. Следует отметить, что вибраторы являются экологически чистыми и, в отличие от взрывоопасных источников, не наносят вреда природе.

Разработаны и протестированы алгоритмы математического моделирования и программное обеспечение для высокопроизводительных вычислительных систем с различными архитектурами для грязевых и магматических вулканов. Рассмотрены модели для двух конфигураций магматических очагов.

На основе проведенного анализа выбраны перспективные подходы к построению более реалистичных моделей, учитывающие вязко-упругую природу вулканических магм и диффузную границу перехода между магмой и твердыми породами, и добавлены в разработанную в ходе проекта модель. Как показал проведенный анализ современного состояния науки в области изучения внутреннего строения вулканов и природы их извержений, достоверного описания геометрии магматических камер и происходящих в них процессов на сегодняшний день не существует, наиболее вероятно, что основные процессы, приводящие к извержениям, связаны с кипением расплавов и возникновением трещин (даек) в кровле магматического очага, которые заполняются жидкой магмой или газом. Поэтому для моделирования распространения упругих волн в таких средах рассмотрены основные подходы к созданию моделей с учетом термоупругих и вязких свойств вулканических сред. В частности, проведены численные эксперименты с целью фиксации влияния изменений сейсмических волн в случае трансформирования границ магматической камеры. Известно, что плотность жидких магм равна  $2,2-3,0 \text{ г/см}^3$ , что примерно на 10 % ниже, чем плотность твердых пород соответствующего состава. Проведенные численные эксперименты выполнены для моделей с резкими границами что, вероятно, нехарактерно для магматических камер. Важное значение имеет вязкость магм (свойство, определяющее их текучесть), которая зависит от состава и температуры и варьируется в широких пределах. На основе новых подобранных подходов продолжится дальнейшая разработка численных методов, алгоритмов и программ для моделирования активного вибропросвечивания вулканов перед извержением.

Полученные экспериментальные и теоретические результаты в области построения геофизических схем для вибросейсмических экспериментов, разработки геофизических моделей, проведения натурного численного моделирования и исследования глубинного строения вулканов не имеют аналогов.

### **Результаты работ по проектам РФФИ**

**Проект РФФИ № 19-51-14002\_анф\_а** "Моделирование образования звезд на массивно параллельных суперкомпьютерах".

Руководитель проекта – д.ф.-м.н. Куликов И. М.

Во втором году выполнения проекта российской стороной разработана новая вычислительная модель гравитационной гидродинамики с учетом переноса излучения в диффузионном приближении. Построенная вычислительная модель является качественным расширением модели гравитационной гидродинамики, адаптированной для воспроизведения процесса звездообразования и эволюции протопланетных дисков. Расширение состоит в рассмотрении уравнения состояния для идеального газа с учетом переменного отношения теплоемкостей газа и параболического термина в законе сохранения полной механической энергии газа. Терм сформулирован в виде теплопроводного члена с зависимостью от температуры в четвертой степени. Для вычислительной модели на основе метода разделения операторов разработан численный метод решения гиперболических, эллиптических и параболических уравнений. Вычислительная модель реализована с использованием неструктурированных тетраэдральных сеток и подвижных геодезических сеток. Для детальной верификации и сравнительных вычислительных экспериментов по изучению образования и эволюции протозвезд и газопылевых протозвездных дисков математическая модель также реализована с использованием многоуровневых вложенных сеток. Проведены вычислительные эксперименты по исследованию коллапса облака солнечной массы в модели гравитационной гидродинамики с учетом переноса излучения в диффузионном приближении. Проведен анализ образования и эволюции протозвезд и протозвездных дисков в газовой и газопылевой моделях. В основе параллельной реализации вычислительной модели лежит технология AVX-2 для реализации уравнений гидродинамики и автоматическая векторизация AVX-512 для решения уравнения Пуассона. Для многоядерной реализации используется технология OpenMP.

**Проект РФФИ № 19-07-00446 А "Разработка алгоритмов и программного обеспечения для суперкомпьютерного моделирования терагерцового излучения в плазме".**

Руководитель проекта – к.ф.-м.н. Берендеев Е. А.

В ходе выполнения проекта разработаны численные коды на основе метода частиц-в-ячейках, позволяющие моделировать лабораторные эксперименты по генерации мощного терагерцового излучения при столкновении в газовой струе двух фемтосекундных лазерных импульсов. Для случая, когда угол между лазерными импульсами очень мал, создана аксиально симметричная 2D3V численная PIC модель. Разработана модель ионизации атомов электрическими полями лазерных импульсов. При малых значениях полей скорость ионизации в этой модели определяется туннельным эффектом, в сильных полях происходит переход в надбарьерный режим, а для промежуточных полей используется аппроксимация Бауэра – Малсера. Разработан параллельный алгоритм движения частиц в аксиально-симметричной геометрии с учетом процессов ионизации и адаптивной концентрации. Чтобы понять, насколько сильно эффективность схемы и угловое распределение генерируемого излучения чувствительны к конечному углу между лазерными осями, создана полная 3D модель. Расчеты по этой модели полностью подтвердили предсказания теории, основанной на вычислении интенсивности излучения в дальней зоне источника, что позволило дать рекомендации по правильному размещению диагностик терагерцового излучения в эксперименте.

**Проект РФФИ № 19-07-00085 А "Интеллектуальная поддержка решения задач на пета- и эксафлопсных суперЭВМ".**

Руководитель проекта д.т.н. – Глинский Б. М.

Разработана концепция интеллектуальной поддержки решения вычислительно сложных задач математической физики на суперкомпьютерах, основанная на онтологическом представлении информации. Онтология математических методов и параллельных алгоритмов и онтология параллельных архитектур и технологий совместно с правилами вывода, сформулированными экспертами в заданной предметной области, позволяют подобрать эффективный численный метод, параллельный алгоритм и вычислительную архитектуру для решения задачи пользователя. Разработаны паттерны онтологического проектирования, описывающие основные классы онтологий. Реализован информационно-аналитический интернет-ресурс для поддержки решения вычислительно сложных задач на суперкомпьютерах. Выполнено наполнение контента информационно-аналитического интернет-ресурса, которое состояло в добавлении экземпляров описанных в онтологии классов, представляющих конкретные объекты рассматриваемой области знаний. Разработана база знаний, включающая онтологические описания задач гидродинамики космической плазмы, физики плазмы, геофизики, а также численных методов их решения на архитектурах суперкомпьютеров. Предложенная система интеллектуальной поддержки решения задач математической физики прошла успешную апробацию на задачах астрофизики, физике плазмы и геофизики.

**Проект РФФИ № 18-29-21025\_мк** "Суперкомпьютерное моделирование плазменных течений в режимах диамагнитного удержания открытых ловушек".

Руководитель проекта – д.ф.-м.н. Вшивков В. А.

На основе серии вычислительных экспериментов исследованы характеристики горячей плазмы в диамагнитном режиме пробкотрона в зависимости от параметров фоновой плазмы и инжектируемого ионного пучка, механизмов диссипации, начальной конфигурации магнитного поля. Используется двумерная аксиально-симметричная численная модель, основанная на решении уравнений Власова для ионных компонент фоновой плазмы и инжектируемого ионного пучка методом частиц в ячейках (PIC). Для электронов используется приближение магнитной гидродинамики без учета их массы. Учтены наиболее существенные в лабораторных экспериментах механизмы диссипации, обусловленные электрон-ионными и ион-ионными столкновениями. Исследована структура и время формирования магнитной каверны для различных значений аномальной частоты электрон-ионных столкновений, наличие которой обеспечивает радиальный дрейф горячей плазмы в переходной области на границе каверны. Показано, что токовый слой, формирующийся на границе плазмы, зависит от величины ларморовского радиуса горячих ионов. Для учета диссипации за счет ион-ионных столкновений используется метод Монте-Карло. Созданный алгоритм учитывает взаимодействие выбранной частицы с осредненной по ячейке частицей, что позволяет существенно уменьшить время расчета ион-ионных столкновений. Рассмотрены различные методы инжекции ионного пучка, включающие возможности внеосевой инжекции. Это позволяет, в отличие от осевой инжекции, задать как азимутальную компоненту скорости пучка, так и направление инжекции относительно магнитного поля ловушки и важно для соответствия условиям лабораторных экспериментов. Проведено исследование устойчивости гибридной численной модели. Показано, что для гидродинамического подхода гибридная модель некорректна, если не учитывать силу трения между ионной и электронной компонентами плазмы, поскольку фазовая скорость распространяющихся волн может быть

бесконечной. Проведены численные эксперименты для программ с векторизованными циклами расчета динамики частиц на процессорах Intel Xeon Phi 7290 (архитектура KNL, тактовая частота 1.5 ГГц) и Intel Xeon E5-2697 (архитектура BDW, тактовая частота 2.6 ГГц) с не векторизованной версией программы. Векторизованные циклы демонстрируют более высокую скорость работы: в 1.8 раз для процессоров KNL и в 2.5 раз для процессоров Broadwell. Для полного времени работы программы достигнуто его уменьшение до 2 раз на процессорах KNL и до 1.5 раз на Broadwell.

**Проект РФФИ № 20-47-540002\_р\_а\_Новосибирск** "Разработка эффективных параллельных вычислительных методов для глобального моделирования взаимодействия солнечного ветра с магнитосферой Земли".

Руководитель проекта – к.ф.-м.н. Черных И. Г.

Численный метод был верифицирован на тесте Кеппенса. Показано, что численный метод корректно и с малой диссипацией воспроизводит все МГД волны, а также без особенностей контактный разрыв во всех компонентах решения. Помимо отсутствия "карбункул"-эффектов в построенном численном методе имеет место также галилеева инвариантность построенного метода, что особенно важно в задачах развития турбулентности солнечного ветра и межзвездной среды. Была рассмотрена модельная задача высокоскоростного облака, моделирующего атмосферу планеты, с разреженной замагниченной средой. В начальный момент времени происходит набегание потока и образование ударной волны перед атмосферой облака. Само облако слабо деформируется за фронтом ударной волны. Также была рассмотрена задача развития сверхзвуковой турбулентности солнечного ветра. Было показано, что имеет место теплопередача подвижного фронта газа, как и при использовании модели частиц на основе кинетического подхода. Главным результатом выполнения проекта стал новый эффективный численный метод решения уравнений магнитной гидродинамики, реализованный в виде программного комплекса.

#### **Результаты работ по научно-исследовательским программам, проектам Президиума РАН, ОМН РАН**

**Проект РФФИ № 18-11-00044** "Разработка, реализация и исследование эффективных параллельных вычислительных методов для решения уравнений гидродинамики с использованием технологии вложенных сеток на массивно-параллельных суперЭВМ".

Руководитель проекта д.ф.-м.н. Куликов И. М.

В рамках работ по проекту в 2021 г. разработан новый численный метод решения уравнений гидродинамики на основе комбинации метода Годунова для определения лагранжевых значений давления и скорости, схемы Рунге для осреднения схемной скорости адвективного переноса и схемы типа Русанова для учета адвективного члена. Для повышения порядка точности метода на гладких решениях и для уменьшения диссипации на разрывах использованы кусочно-линейное, параболическое и кубическое представления физических переменных. Численный метод был верифицирован на классических задачах о распаде разрыва из книги Торо, трех задачах о взаимодействии сильных ударных волн, задаче Седова о точечном взрыве и задачах развития неустойчивостей типа Кельвина – Гельмгольца, Релея – Тейлора и Тейлора – Грина. На задаче Аксёнова экспериментально доказан второй порядок построенного численного метода. Численный метод был реализован в инфраструктуре разработанного ранее программного инструментария с



использованием многоуровневых вложенных сеток. На узлах кластера НКС-1П Сибирского суперкомпьютерного центра, оснащенных процессорами Intel Xeon Platinum 8268, были достигнуты 46-кратное ускорение и 94 % эффективность при использовании 48 MPI процессов. Экспериментально установлено, что оптимальная энергоэффективность программного инструментария достигается при использовании 8 ядер и составляет 650 MFLOPS/Ватт, а при использовании всех 48 ядер процессора энергоэффективность асимптотически выходит на значение 230 MFLOPS/Ватт. В ходе вычислительных экспериментов по исследованию подрыва белого карлика за счет приливного нагрева от близкого прохождения черной дыры было установлено, что эволюция взрыва сверхновой не зависит от динамики точки подрыва. При исследовании множественного подрыва белого карлика экспериментально подтверждена гипотеза о том, что воспламенение и переход к детонационному горению не требуется для получения достаточно мощных взрывов сверхновых типа Ia. Для задач столкновения белых карликов экспериментально построена зависимость прохождения сценариев взрыва сверхновых типа Ia или Iaх в зависимости от температуры карликов и скорости их столкновения. Также в ходе вычислительных экспериментов установлено, что столкновение такого горячего объекта как белый карлик и относительно холодной планеты земного типа или газового гиганта ведет только к остыванию белого карлика и не приводит к взрыву сверхновой.

**Проект РФФИ № 19-71-00054** "Суперкомпьютерное моделирование генерации терагерцового излучения при фокусировке мультигигаваттных электронных пучков в плазме".

Руководитель проекта к.ф.-м.н. Берендеев Е. А.

Разработан параллельный 3D3V PIC код Luthien, имитирующий открытые граничные условия, допускающие непрерывную инжекцию электронного пучка в плазму, и позволяющий учесть существенно трехмерные эффекты.

Проведено сравнение 3D3V кода с разработанным ранее 2D3V кодом. Для этого выбрана задача определения инкремента неустойчивости одинарного пучка, инжектируемого в плазму. В рамках пространственно неоднородной задачи об инжекции пучка через границу плазмы инкременты нарастания неустойчивости в 2D и 3D геометриях хорошо совпадают. Трехмерная модель будет в дальнейшем использоваться для моделирования реального лабораторного эксперимента, в котором схема столкновения обязательно будет содержать либо конечный угол, либо конечный прицельный параметр, что нарушит аксиальную симметрию пучково-плазменной системы и потребует учета трехмерных эффектов.

Выполнен поиск режимов эффективной генерации терагерцового излучения в плазме со встречными электронными пучками. Показано, что максимальная эффективность достигается в случае, когда пучки первоначально фокусируются в пятна одинакового размера. Однако за счет последующей перефокусировки каждого из пучков поперечные профили возбуждаемых ими ленгмюровских колебаний начинают локально не совпадать друг с другом, что включает механизм лобового столкновения потенциальных плазменных волн с разными поперечными структурами и приводит к эффективной генерации излучения на второй гармонике плазменной частоты. Эффективность преобразования мощности пучков в мощность такого излучения достигает 1.4 %.

**Проект РФФ № 19-71-20026** "Численное моделирование открытых плазменных ловушек для решения задач управляемого термоядерного синтеза с использованием перспективных высокопроизводительных вычислительных систем".

Руководитель проекта – к.ф.-м.н. Черных И. Г.

Создан новый алгоритм решения уравнений движения заряженных частиц в электромагнитных полях в нерелятивистском приближении. Рассмотрены варианты аналитически и дискретно заданных электрического и магнитного полей для расчета траекторий движения заряженных частиц на основе использования аналитических решений уравнения движения. Для дискретно заданных полей использовались 2D- или 3D-линейная интерполяции на сдвинутых сетках. Показано, что точность и устойчивость нового алгоритма зависит только от точности и устойчивости алгоритма вычисления электромагнитных полей.

Разработан высокопроизводительный метод нулевых столкновений для моделирования процессов ион-ионных столкновений в высокотемпературной плазме. Отличительная особенность предлагаемого метода по сравнению с классическим обусловлена отсутствием тригонометрических функций, что позволяет существенно сократить время работы программы на современных процессорах. Предложенный метод сохраняет энергию и импульс всей системы при изменении траекторий и скоростей частиц. Проведенная серия численных экспериментов показала эффективность предложенного подхода.

Исследована динамика быстрых ионов в режимах с сильными ион-электронными и слабыми ион-ионными столкновениями. Показано, что проникновение ионов за переходной слой связано с несохранением азимутального момента, вызванным ион-электронными столкновениями в переходном слое. Увеличение силы трения обусловлено большой разницей средних скоростей ионов и электронов в переходном слое, что объясняет наблюдающееся в режимах со слабыми ион-ионными столкновениями выталкивание фоновых ионов из переходного слоя.

Детально исследован наблюдаемый ранее эффект вытеснения ионов фона из переходного слоя на границе диамагнитной каверны. Показано, что при формировании диамагнитного пузыря кроме дрейфа в скрещенных магнитном и азимутальном электрическом оказавшиеся в переходном слое фоновые ионы испытывают дополнительный дрейф, выталкивающий их из переходного слоя. Скорость этого дрейфа прямо пропорциональна частоте ион-электронных столкновений. Исследована возможность формирования конфигурации с обращенным полем в открытой ловушке с внеосевой атомарной инжекцией. Проведена серия расчетов, в которой инжектированные ионы обладали азимутальной компонентой скорости, значительно превышающей продольную и радиальную. Показано, что в режимах с малым током инжектируемых ионов происходило формирование токового кольца с радиусом, равным ларморовскому радиусу ионов с центром на оси ловушки. Наблюдаемое выравнивание азимутальных скоростей электронной и ионной компонент плазмы в области с малым магнитным полем послужило препятствием к ожидаемому обращению поля и пересоединению силовых линий. Проведено детальное исследование динамики частиц, инжектированных в магнитную ловушку в разные моменты времени. Показано, что в случае образования каверны магнитного поля частицы, инжектированные в ранние моменты времени, захватываются магнитным полем, если они обладают большим отношением радиальной компоненты скорости к продольной, и покидают область каверны при малом отношении. Несмотря на отражение от магнитного барьера, часть ионов проникают в область вакуумного

магнитного поля, что связано с радиальным дрейфом из-за силы трения, действующей на ионы в переходном слое.

Создана трехмерная численная модель взаимодействия высокоскоростного ионного пучка с однородной холодной плазмой в магнитной системе открытой ловушки. Для решения кинетического уравнения применяется метод частиц-в-ячейках с использованием новых алгоритмов, созданных в рамках проекта. На основе проведенных вычислительных экспериментов показано, что распространение инжектируемого ионного пучка сопровождается генерацией возмущений на границе вытесненного магнитного поля. При малых числах Маха инжектируемого пучка возбуждается желобковая неустойчивость с большими азимутальными числами. Повышение скорости инжектируемых ионов приводит к подавлению желобковой неустойчивости из-за эффектов конечного ларморовского радиуса. Полученные результаты согласуются с имеющимися теоретическими моделями развития желобковой неустойчивости.

### Публикации

#### Издания, включенные в реферативную базу данных Web of Science

1. Chernykh I., Kulikov I., Tutukov A. Hydrogen–helium chemical and nuclear galaxy collision: Hydrodynamic simulations on AVX-512 supercomputers // *J. of Comput. and Appl. Math.* 2021. V. 3911. Art. Num. 113395. DOI: 10.1016/j.cam.2021.113395.

2. Kulikov, I., Chernykh, I., Vorobyov E., Elbakyan V., Vshivkova L. M2H3D code: Moving mesh hydrodynamics by means AVX-2 technology // *Commun. in Comput. and Inform. Sci.* 2021. V. 1413. P. 307–319. DOI: 10.1007/978-3-030-78759-2\_26.

3. Annenkov, V., Berendeev, E., Volchok, E., Timofeev, I. Particle-in-cell simulations of high-power THz generator based on the collision of strongly focused relativistic electron beams in plasma // *Photonics* 2021. Vol. 8, 172. DOI: 10.3390/photonics8060172.

4. Timofeev, I. V., Berendeev E. A., Annenkov, V. V., Volchok, E. P., Trunov V. I. Optimal synchronization of laser pulses in THz generation scheme with colliding plasma wakes // *Phys. of Plasm.* 2021. Vol. 28, 013103. DOI: 10.1063/5.0029848.

5. Liseykina, T. V., Macchi, A., Popruzhenko, S. V. Quantum effects on radiation friction driven magnetic field generation // *Eur. Phys. J. Plus.* 2021. Vol. 136, 170. DOI: 10.1140/epjp/s13360-020-01030-2.

#### Издания, включенные в реферативную базу данных Scopus

1. Kulikov, I. M. Mathematical simulation of turbulent combustion of carbon in the problems of white dwarf mergers and explosions of the type Ia supernovae // *J. of Appl. and Indust. Math.* 2021. V. 15, iss. 3. P. 1–8. DOI: 10.1134/S1990478921030017.

2. Kulikov, I. M. On a computational model of gravitational hydrodynamics with consideration of radiation transfer in the diffusion approximation using tetrahedral meshes // *J. of Appl. and Indust. Math.* 2021. Vol. 15, iss. 2. P. 277–284. DOI: 10.1134/S1990478921020083.

3. Volchok, E. P., Timofeev, I. V., Annenkov, V. V., Berendeev, E. A. Coherent THz emission produced in plasma by transversely modulated colliding laser beams // *2021 IEEE Intern. Conf. on Plasma Sci. (ICOPS)*. P. 1–1. DOI: 10.1109/ICOPS36761.2021.9588655.

4. Berendeev, E. A., Timofeev, I. V., Volchok, E. P., Annenkov, V. V. PIC simulations of high-power THz radiation produced by the collision of profiled plasma wakefields // *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 2028 012008. DOI:10.1088/1742-6596/2028/1/012008.
5. Berendeev, E., Volchok, E. Luthien: A parallel PIC code for modeling the interaction of focused electron beams with plasma // Sokolinsky L., Zymbler M., (eds.) *Parallel Computational Technologies. PCT 2021. Commun. in Comput. and Inform. Sci.* 2021. Vol. 1437. Springer, Cham. DOI 10.1007/978-3-030-81691-9\_16.
6. Boronina, M. A., Chernykh, I. G., Dudnikova, G. I., Genrikh, E. A., Vshivkov, V. A. Mathematical modelling of beam dynamics in diamagnetic confinement regime of open trap // *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2028, 012020, 2021. DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012020.
7. Glinskiy, B. M., Zagorulko, Yu. A., Zagorulko, G. B., Kulikov, I. M., Sapetina, A. F., Titov, P. A., Zhernyak, G. F. Building ontologies for solving compute-intensive problems // MSR-2020. *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 1715. Art. Num. 012071. DOI: 10.1088/1742-6596/1715/1/012071.
8. Sapetina, A. F., Glinskiy, B. M., Martynov, V. N. Numerical modeling results for vibroseismic monitoring of volcanic structures with different shape of the magma chamber // MSR-2020. *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 1715. Art. Num. 012057. DOI: 10.1088/1742-6596/1715/1/012057.
9. Zagorulko Y., Zagorulko G., Snytnikov A., Glinskiy B., Shestakov V. Information-analytical system to support the solution of compute-intensive problems of mathematical physics on supercomputers // Malyshkin V. (eds) *Parallel Computing Technologies. PaCT 2021. Lect. Notes in Comput. Sci.* 2021. Vol. 12942. Springer, Cham. DOI 10.1007/978-3-030-86359-3\_33.
10. Glinskiy, B., Sapetina, A., Snytnikov, A., Zagorulko, Y., Zagorulko, G. The automated construction of a scheme for solving compute-intensive problems based on the ontological approach and Semantic Web technologies // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2099 012022. 2021. DOI: 10.1088/1742-6596/2099/1/012022.
11. Vshivkov, V. A., Soloviev, A. A., Chernoshtanov, I. S., Efimova, A. A. Null collision Monte Carlo simulation model for particle-in-cell method // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021, 2028(1), 012005. DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012005.
12. Voropaeva, E., Vshivkov, K., Vshivkova, L., Dudnikova, G., Efimova, A. New motion algorithm in the particle-in-cell method // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021, 2028(1), 012011. DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012011.
13. Dudnikova G., Chernykh, I., Vshivkov, V. 3D numerical simulation of ribbon electron beam bending by relativistic proton bunch // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2028 012016. DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012016.
14. Grigoryev, V., Stoyanovskaya, O., Snytnikov, N. Supercomputer model of dynamical dusty gas with intense momentum transfer between phases based on OpenFPM library // *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2099, 012056. 2021. DOI: 10.1088/1742-6596/2099/1/012056.
15. Kulikov, I., Chernykh, I., Boronina, M. On a simple verification test of codes for modelling of magnetohydrodynamic turbulence // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 2028. Art. Num. 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/2028/1/012003.
16. Kulikov, I., Chernykh, I., Karavaev, D., Tutukov, A. A study of white dwarf shock detonation and type Ia supernova explosion // *J. of Phys.: Conf. Ser.* 2021. V. 2028. Art. Num. 012004. DOI: 10.1088/1742-6596/1336/1/012004.

17. Tchernykh, A., Facio-Medina, A., Pulido-Gaytan, B., Rivera-Rodriguez, R., Cortes-Mendoza, J. M., Radchenko, G., Babenko, M., Chernykh, I., Kulikov, I., Nesmachnow, S. Toward digital twins' workload allocation on clouds with low-cost microservices streaming interaction // Proc. 2020 Ivannikov Ispras Open Conf. (ISPRAS 2020). 2020. P. 115–121. DOI: 10.1109/ISPRAS51486.2020.00024.

18. Kulikov, I. M., Vorobyov, E. I., Chernykh, I. G., Elbakyan, V. G. Application of geodesic grids for modeling the hydrodynamic processes in spherical objects // J. of Appl. and Indust. Math. 2020. Vol. 14, iss. 4. P. 672–680. DOI: 10.1134/S1990478920040067.

### **Издания, включенные в библиографическую базу данных РИНЦ**

1. Воропаева, Е. С., Вшивков, К. В., Вшивкова, Л. В., Дудникова, Г. И., Ефимова, А. А. Алгоритмы движения в методе частиц в ячейках // Выч. мет. и програм. 2021. № 22. С. 1–13. DOI: 10.26089/NumMet.v22r418.

2. Боронина, М. А., Вшивков, В. А., Киреев, С. Е. Модификация параллельного алгоритма для численного моделирования открытой магнитной ловушки // Вестн. НГУ. Сер.: Информ. технol. 2021. Т. 19, № 1. С. 15–25. DOI: 10.25205/1818-7900-2021-19-1-15-25.

3. Boronina, M. A., Chernykh, I. G., Dudnikova, G. I., Vshivkov, V. A. Numerical modelling of open magnetic trap using parallel computers // MSR-2021: thes. of the Intern. conf., Oct. 4–8, 2021. DOI: 10.24412/cl-35065-2021-1-01-66.

4. Glinskiy, B. M., Zhernyak, G. F., Zagorulko, G. B., Titov, P. A. Using ontologies for solving scientific problems (by example of geophysics) // Num. Meth. and Program. 2021. № 22(4). P. 333–343. DOI: 10.26089/NumMet.v22r422.

5. Глинский, Б. М., Сапетина, А. Ф., Снытников, А. В., Загорулько, Г. Б., Загорулько, Ю. А., Шестаков, В. К. Автоматизация построения схемы решения вычислительно сложных задач математической физики на суперкомпьютерах // Информ. и матем. технol. в науке и управлении. 2021. № 4 (24). С. 50–59. DOI: 10.38028/ESI.2021.24.4.005.

6. Сапетина, А. Ф., Глинский, Б. М., Мартынов, В. Н. Моделирование активного вибропросвечивания вулканической постройки для оценки возможности проведения мониторинга // Проблемы комплексного геофизического мониторинга сейсмоактивных регионов: Труды 8-й Всерос. науч.-техн. конф. с междунар. участием, Петропавловск-Камчатский, 26 сент. – 2 окт. 2021 г. / Отв. ред. Д. В. Чебров. Петропавловск-Камчатский: КФ ФИЦ ЕГС РАН, 2021. С. 293–297. ISBN 978-5-903258-45-1.

### **Свидетельства о регистрации в Роспатенте**

1. Свидетельство № 2021665047. Программа для ЭВМ "MTRAP-21" : св-во о государственной регистрации программы для ЭВМ / Ефимова А. А., Вшивков В. А., Боронина М. А., Дудникова Г. И., Генрих Е. А.

### **Участие в конференциях и совещаниях**

1. The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes virtual, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г. – 9 докладов, из них 4 пленарных

(Берендеев Е. А., Боронина М. А., Вшивков В. А., Вшивков К. В., Вшивкова Л. В., Генрих Е. А., Дудникова Г. И., Ефимова А. А., Куликов И. М., Черных И. Г.).

2. Конференция международных математических центров мирового уровня, Сочи, 9–13 августа 2021 г. – 2 доклада (Куликов И. М.).

3. Международная конференция "Марчуковские научные чтения 2021" (МНЧ-2021), Новосибирск, 4–8 октября 2021 г. – 8 докладов, из них 1 пленарный (Берендеев Е. А., Боронина М. А., Винс Д. В., Вшивков В. А., Глинский Б. М., Дудникова Г. И., Ефимова А. А., Сапетина А. Ф., Соловьев А. А., Титов П. А., Черных И. Г.).

4. Parallel Computing Technologies (PaCT 2021), 13–18 сентября 2021 г., Калининград – 1 доклад (Глинский Б. М.).

5. 8-я Всероссийская научно-техническая конференция с международным участием "Проблемы комплексного геофизического мониторинга сейсмоактивных регионов", Петропавловск-Камчатский, 26 сентября – 2 октября 2021 г. – 1 доклад (Глинский Б. М., Сапетина А. Ф.).

6. Международная конференция "Иванниковские чтения", Нижний Новгород, 24–25 сентября 2021 г. – 2 доклада (Куликов И. М., Ломакин С. В., Сапетина А. Ф., Черных И. Г.).

7. International conference of numerical analysis and applied mathematics 2021, Родос (Греция), 20–26 сентября 2021 г. – 1 доклад (Куликов И. М., Черных И. Г.).

8. Национальный суперкомпьютерный форум 2021, Переславль-Залесский, 30 ноября – 3 декабря 2021 г. – 1 доклад (Куликов И. М., Черных И. Г.).

9. Научная конференция "Суперкомпьютерные дни в России", Москва, 27–28 сентября 2021 г. – 1 доклад (Куликов И. М., Черных И. Г.).

### Участие в оргкомитетах конференций

1. Дудникова Г. И. – член программного комитета The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г.;

2. Вшивков В. А. – председатель программного комитета The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г.;

3. Боронина М. А.:

– член организационного комитета Международной конференции "Марчуковские научные чтения 2021" (МНЧ-2021), Новосибирск, 4–8 октября 2021 г.,

– член организационного комитета The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г.,

– член программного комитета The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г.;

4. Куликов И. М. – заместитель председателя программного комитета The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г.

5. Глинский Б. М.:

– член программного комитета Международной конференции "Марчуковские научные чтения 2021" (МНЧ-2021), Новосибирск, 4–8 октября 2021 г.,

- член программного комитета The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г.,
- член программного комитета ПаВТ-2021, Волгоград, 30 марта – 1 апреля 2021 г.,
- член программного комитета "Суперкомпьютерные дни в России", Москва, 27–28 сентября 2021 г.;

6. Черных И. Г.:

- член программного комитета Международной конференции "Марчуковские научные чтения 2021" (МНЧ-2021), Новосибирск, 4–8 октября 2021 г.;
- член программного комитета The 4th Virtual workshop on numerical modeling in MHD and plasma physics: Methods, tools, and outcomes, Новосибирск, 12–14 октября 2021 г.,
- член программного комитета "Суперкомпьютерные дни в России", Москва, 27–28 сентября 2021 г.

### Итоговые данные по лаборатории

Публикаций, индексируемых в базе данных Web of Science – 5  
 Публикаций, индексируемых в базе данных Scopus – 23  
 Публикаций, индексируемых в базе данных РИНЦ – 22  
 Свидетельств о регистрации программ в Роспатенте – 1  
 Докладов на конференциях – 26, в том числе 5 пленарных  
 Участников оргкомитетов конференций – 13

### Кадровый состав

1. Черных И. Г.	зав. лабораторией	к.ф.-м.н.
2. Берендеев Е. А.	н.с.	к.ф.-м.н.
3. Боронина М. А.	с.н.с.	к.ф.-м.н.
4. Винс Д. В.	н.с.	к.т.н.
5. Вшивков В. А.	г.н.с.	д.ф.-м.н.
6. Вшивков К. В.	н.с.	Ph.D.
7. Генрих Е. А.	н.с.,	к.ф.-м.н.
8. Глинский Б. М.	г.н.с.	д.т.н.
9. Дудникова Г. И.	г.н.с.	д.ф.-м.н.
10. Ефимова А. А.	м.н.с.	
11. Зернова Л. В.	ведущ. программист	
12. Кононов А. А.	электроник 1-й кат.	
13. Куликов И. М.	в.н.с.	д.ф.-м.н.
14. Кучин Н. В.	гл. специалист по СПО	
15. Лисейкина Т. В.	с.н.с.	д.ф.-м.н.
16. Ломакин С. В.	гл. специалист по ИС	
17. Макаров И. Н.	ведущ. программист	
18. Сапетина А. Ф.	м.н.с.	
19. Снытников Н. В.	н.с.	к.ф.-м.н.
20. Соловьев А. А.	н.с.	к.т.н.

21. Судаков А. С. инженер

22. Титов П. А. м.н.с.

Берендеев Е. А., Винс Д. В., Сапетина А. Ф., Судаков А. С., Титов П. А. – молодые научные сотрудники.

### **Педагогическая деятельность**

Берендеев Е. А. – доцент аспирантуры ИВМиМГ СО РАН, ст. преп. ММФ НГУ

Глинский Б. М. – профессор НГУ

Куликов И. М. – профессор НГТУ, доцент ММФ НГУ

Лисейкина Т. В. – доцент Института математики им. Никольского РУДН

Сапетина А. Ф. – ст. преп. ММФ НГУ

### **Руководство студентами**

Воропаева Е. С. – 4-й курс ММФ НГУ, руководитель Вшивков В. А.

Завьялов О. Р. – 5-й курс ФПМИ НГТУ, руководитель Куликов И. М.

Переладова А. Е. – 4-й курс ММФ НГУ, руководитель Куликов И. М.

### **Руководство аспирантами**

Пригарин В. Г. – 4-й год аспирантуры, НГТУ, руководитель Куликов И. М.

Судаков А. С. – 1-й год аспирантуры, ИВМиМГ, руководитель Вшивков В. А.

Ульяничев И. С. – 4-й год аспирантуры, НГТУ, руководитель Куликов И. М.

### **Защита дипломов**

Завьялов О. Р. – бакалавр ФПМИ НГТУ, руководитель Куликов И. М.

Переладова А. Е. – бакалавр ММФ НГУ, руководитель Куликов И. М.