

ПРИОРИТЕТНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ I.3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА, ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ И РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Программа I.3.1. Методы вычислительной математики в прикладных задачах естествознания (координатор акад. А. Н. Коновалов)

В Институте вычислительной математики и математической геофизики разработан специальный двухпараметрический весовой метод, который с одной стороны обладает повышенным быстродействием, как и метод мажорантной частоты, с другой — применим для случая неограниченной частоты парного столкновения и коэффициентов коагуляции. Доказана ограниченность дисперсий оценок «по столкновениям» и «по поглощениям» при использовании данного метода.

В том же Институте на основе реальных данных разработаны и верифицированы численные стохастические модели совместных гидрометеорологических процессов, основанные на использовании марковских цепей и специальных нелинейных преобразований векторных гауссовских процессов. Показано, что использование стационарных моделей позволяет строить важные для приложений нестационарные скалярные процессы с периодически меняющимися характеристиками, исследованы вероятностные свойства опасных метеорологических явлений (длительные понижения либо резкие перепады температуры воздуха, неблагоприятные сочетания метеорологических элементов и т. д.). Модели предназначены для оценки последствий изменений климата.

Построены алгоритмы точного и приближенного статистического моделирования неоднородного пуассоновского точечного поля со сложной для моделирования интенсивностью и исследована сравнительная трудоемкость этих алгоритмов. Для повышения эффективности построенных алгоритмов используется алгоритм моделирования последовательности испытаний в методе исключения по одному случайному числу. Сформулирован и обоснован многоэтапный вариант этого алгоритма, что снизило трудоемкость метода «максимального сечения».

На основе численного моделирования совместной модели океана и льда региона Север-

ного Ледовитого океана (СЛО) и Северной Атлантики изучено влияние межгодовой изменчивости стока сибирских рек на характер распределения и распространения пресной воды. Несмотря на малость межгодовой изменчивости стока по отношению к расходам вод в масштабах океана, ее влияние проявляется в усилении либо циклонической, либо антициклонической составляющих движения приповерхностных вод СЛО. Усиление циклоничности сопровождается возрастанием расхода распресненных и холодных вод Арктики через канадские проливы с соответствующим повышением объемов поступающих из Атлантики соленых и теплых вод. Ослабление циклоничности движения водных масс в Арктике приводит к сокращению выноса арктических вод через канадские проливы с одновременным уменьшением притока соленых и теплых вод из Атлантики, при этом увеличивается поток арктических вод через пролив Фрама.

Сформулирована концепция природоохранного прогнозирования, основанная на совокупности решений прямых и обратных задач для оценок целевых функционалов, характеризующих качество атмосферы и воды для моделей динамики, переноса и трансформации загрязняющих примесей. Предполагается наличие неопределенностей в моделях и входных данных. Концепция базируется на вариационных принципах в формулировках со слабыми ограничениями. Принципиальными элементами являются способы оценки функций чувствительности и неопределенности, которые участвуют в алгоритмах решения обратных задач и, по существу, содержат информацию о степени адекватности результатов прогнозирования.

Предложена новая математическая модель на основе двухтемпературной гомогенизации с учетом фазового перехода газогидрат—вода. Каждой точке среды приписывается две температуры: температура осадочной породы (каркаса) и температура двухфазной системы

газогидрат—вода, взаимодействие между которыми осуществляется по закону ньютоновского теплообмена. Для описания фазового перехода в системе газогидрат—вода предполагается использовать нелинейное условие Стефана в энтальпийной постановке. Коэффициент теплообмена является нелинейной функцией температуры системы газогидрат—вода — за счет смачиваемости теплообмен в системе каркас—вода значительно выше, чем в системе каркас—лед. Этот эффект приводит к

значительным вычислительным трудностям, преодолеть которые позволило применение «невяной по теплообмену» разностной схемы. Описанный подход впервые позволил адекватно описать процесс плавления газогидрата с точки зрения сопоставления с экспериментальными данными.

В Институте математики им. С. Л. Соболева установлены двусторонние оценки тахнорм обратных матриц для матриц монотонного вида и вполне неотрицательных матриц.

Программа I.3.2. Параллельные и распределенные вычисления в задачах математического моделирования (координатор акад. Б. Г. Михайленко)

В Институте вычислительной математики и математической геофизики предложен алгоритм параллельной реализации асинхронных вероятностных клеточных автоматов, полностью сохраняющий поведенческую стохастичность. Алгоритм испытывался на задаче моделирования гетерогенных химических реакций на каталитических наночастицах, нанесенных на металлическую подложку. Проведена серия вычислительных экспериментов по реализации предложенного алгоритма на суперкомпьютерах с общей и распределенной памятью, а также на графических ускорителях. Сравнительный анализ полученных результатов позволил выявить влияние различных свойств параллельных архитектур суперкомпьютеров на их производительность при моделировании асинхронными клеточными автоматами.

Разработан и реализован программный пакет ChemPAK для подборки и оптимизации кинетических схем для исследования различных химических процессов (рис. 1). С этой целью был создан модуль экспорта данных из пакета Fluent. На примере исследования процессов пиролиза легких углеводородов было проведено численное моделирование трехмерных газодинамических потоков в химических реакторах различной геометрии проточного типа с вводом энергии в виде излучения/нагрев газовой смеси через стенки реактора. Разработаны алгоритмы и созданы два программ-

ных модуля, расширившие возможности пакета Ansys Fluent в области моделирования поглощения энергии излучения газовой смесью и моделирования теплоотвода от стенок реактора. Реагирующую газовую смесь доводят до пороговой температуры старта реакций с помощью нагрева стенок реактора, а дальнейший нагрев происходит с помощью подачи лазерного излучения в реакционную зону химического реактора. Таким образом, можно точно регулировать температуру реакционной зоны, что позволяет исследовать происходящие химические и газодинамические процессы в химическом реакторе с высокой точностью.

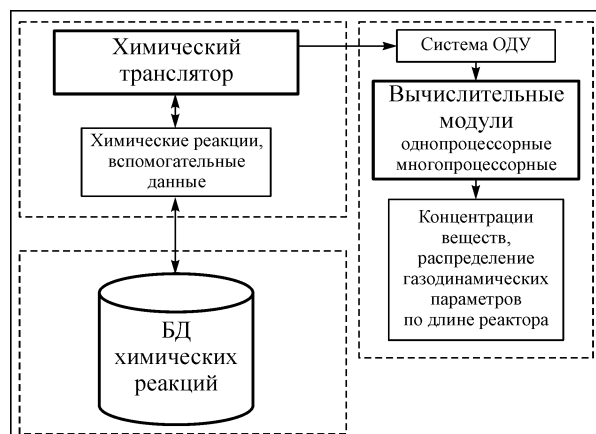


Рис. 1. Схема пакета ChemPAK.