

ISSN 2414-0171

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ И
ТЕХНИКИ

Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ

СЕРИЯ

**Математическое моделирование
физических процессов**

2022

ВЫПУСК 1

Главный редактор
Шагалиев Р. М.

Заместители главного редактора:
Алексеев А. В., Тишкин В. Ф.

Ответственный секретарь:
Соколовская Е. В.

Члены редколлегии:

Бартенев Ю. Г., Бетелин В. Б., Бочков А. И., Вронский М. А.,
Дрёмов В. В., Залялов Н. Н., Кибзун А. И., Козелков А. С.,
Козманов М. Ю., Куркин А. А., Петров И. Б., Прилуцкий М. Х.,
Смирнов Н. Н., Соколов С. С., Старостин Н. В., Степаненко С. А.,
Храмченков М. Г., Четверушкин Б. Н., Шестаков А. А., Янилкин Ю. В.

Адрес редакции и издателя: 607188,
г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37
тел.: (83130)28406, *e-mail*: sokol@vniief.ru.
Адрес сайта журнала: <http://vant.vniief.ru/>

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ

Математическое моделирование физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 1

Саров — 2022

Издается с 1978 г.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Вронский А. В.</i> , <i>Чубарешко И. С.</i> , <i>Шестаков А. А.</i> Моделирование переноса и поглощения лазерного излучения в мишенях инерциального термоядерного синтеза с непрямым воздействием	3
<i>Модестов Д. Г.</i> Оценка временной постоянной при учете запаздывающих нейтронов	17
<i>Гордеев Д. Г.</i> , <i>Жильникова Н. Н.</i> , <i>Кидямкина Д. Н.</i> , <i>Куделькин В. Г.</i> , <i>Куликова М. В.</i> , <i>Шумилина О. Н.</i> Библиотека программ УРС-ОФ расчета свойств веществ, адаптированная для вычислительных систем с возможностью параллельных и векторизованных вычислений	27
<i>Романов В. И.</i> , <i>Маслов Е. Е.</i> , <i>Гулаков С. Ю.</i> Метод пересчета трехмерного поля температур для решения задач прочности	40
<i>Милокова О. Ю.</i> MPI+OpenMP реализация метода сопряженных градиентов с предобуславливателями блочного неполного обратного треугольного разложения второго и первого порядка	48
<i>Запонов А. Э.</i> , <i>Конради Д. С.</i> Влияние материала подложки охлаждаемого инфракрасного матричного фотоприемника на нагрев его фоточувствительного слоя при взаимодействии с интенсивным лазерным излучением	62
<i>Мартынова И. А.</i> , <i>Мартынов А. П.</i> , <i>Николаев Д. Б.</i> , <i>Фомченко В. Н.</i> Система пространственно-группового преобразования информационных потоков	70
Сведения об авторах	83

C O N T E N T S

<i>Vronskiy A. V.</i> , <i>Chubareshko I. S.</i> , <i>Shestakov A. A.</i> Simulation of laser radiation transport and absorption in indirect-drive ICF targets	3
<i>Modestov D. G.</i> Estimation of time constant in accounting for delayed neutrons	17
<i>Gordeev D. G.</i> , <i>Zhilnikova N. N.</i> , <i>Kidyamkina D. N.</i> , <i>Kudelkin V. G.</i> , <i>Kulikova M. V.</i> , <i>Shumilina O. N.</i> URS-OF program library for calculation of material properties adapted to computing systems capable of parallel and vectorized calculations	27
<i>Romanov V. I.</i> , <i>Maslov E. E.</i> , <i>Gulakov S. Yu.</i> A 3D temperature field recalculation method for solving strength analysis problems	40
<i>Milyukova O. Yu.</i> MPI+OpenMP implementation of conjugate gradient method with the second and first order incomplete block inverse triangular factorization preconditioners	48
<i>Zaponov A. E.</i> , <i>Konradi D. S.</i> The effect of the substrate layer material of cooled infrared FPA photodetectors on heating of photosensitive layer due to interaction with intense laser radiation . . .	62
<i>Martynova I. A.</i> , <i>Martynov A. P.</i> , <i>Nikolaev D. B.</i> , <i>Fomchenko V. N.</i> A space-group transformation system for information flows	70
Information about authors	84

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редактор Е. Н. Старченко	Корректоры Т. А. Меркушева Е. А. Окатьева А. В. Федоренко	
--------------------------	---	--

Дата выхода в свет 25.03.2022		Формат 60×84/8
Усл. печ. л. ~ 11		Уч.-изд. л. ~ 13
Тираж 1000 экз.	Зак. тип. 700-2022	7 статей
Свободная цена		

СМИ "Вопросы атомной науки и техники"
серия "Математическое моделирование физических процессов"
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-29789 от 04 октября 2007 г.
выдано Роскомнадзором
Учредитель: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"

Оригинал-макет подготовлен
в Математическом отделении ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
Отпечатано в ИПЦ ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23

УДК 517.958:536.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА И ПОГЛОЩЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МИШЕНЯХ ИНЕРЦИАЛЬНОГО ТЕРМОЯДЕРНОГО СИНТЕЗА С НЕПРЯМЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ

А. В. Вронский¹, И. С. Чубарешко, А. А. Шестаков
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

Численное моделирование в задачах инерциального термоядерного синтеза позволяет оптимизировать постановки многочисленных экспериментов и уменьшать их число за счет сравнения результатов расчетов для различных конфигураций конструкций лазерных мишеней. Для задач инерциального термоядерного синтеза созданы двумерные и трехмерные модели переноса и поглощения лазерного излучения в приближении геометрической оптики. В настоящей работе излагается трехмерная модель переноса и поглощения лазерного излучения. Основной целью являются проверка и тестирование предложенной модели с демонстрацией полученных результатов. Расчеты, проведенные по этой модели, находятся в согласии с расчетами Ливерморской лаборатории США.

Ключевые слова: перенос и поглощение лазерного излучения, мишени непрямого облучения.

Введение

Многие научные лаборатории мира работают над освоением технологии управляемого термоядерного синтеза для получения практически неисчерпаемого источника энергии. На лазерных установках OMEGA (США, Лаборатория лазерной инженерии университета Рочестер) [1], NIF (США, Ливерморская национальная лаборатория) [2], Shenguang-III (Китай) [3] проводятся эксперименты с криогенными мишенями. Строятся мощные мегаджоульные лазерные установки во Франции [4] и России [5].

Одним из направлений работ при исследовании процессов имплозии и термоядерного зажигания мишеней на мегаджоульных лазерных установках является развитие технологии проведения численного моделирования мишеней для оптимизации постановки экспериментов. В настоящее время численное моделирование является основным, а зачастую и единственным инструментом для детального описания некоторых физических явлений при исследовании процессов термоядерного зажигания мишеней. Поэтому уверенность в оптимизации постановок экспериментов на лазерных установках при модернизации этих конструкций определяется все более реалистичным численным моделированием газодинамических процессов.

Численное моделирование позволяет оптимизировать постановки экспериментов и уменьшать их число за счет сравнения результатов расчетов для различных конфигураций конструкций лазерных мишеней. В таких задачах требуются достаточно точные разностные методики, описывающие движение контактной границы и сжатие газа в разных физико-математических моделях уравнения переноса излучения [2, 4–6]. В данной работе исследовалось влияние спектральных эффектов переноса излучения в различных приближениях на развитие коротковолновых возмущений в оболочечных мишенях непрямого облучения для мегаджоульных лазерных установок [7] с использованием методик [8, 9].

Для решения задач инерциального термоядерного синтеза в РФЯЦ-ВНИИТФ созданы двумерные [10] и трехмерные [11] модели переноса и поглощения лазерного излучения в приближении геометрической оптики. Применение трехмерной модели дает качественное улучшение результатов по распределению лазерной энергии в сравнении с обычной двумерной моделью в связи с более правильным описанием прохождения лазерного излучения у оси симметрии.

В настоящей работе излагается трехмерная модель переноса и поглощения лазерного излучения, реализованная в двумерной программе LAZER. Основными целями являются проверка и тестирование предложенной модели с демонстрацией полученных результатов.

Постановка задачи

Система уравнений, описывающая распространение теплового излучения, состоит из спектрального уравнения переноса в кинетической постановке

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{I_\nu}{\rho} \right) + \vec{\Omega} \nabla I_\nu + \alpha_\nu I_\nu = \frac{\alpha_{c\nu}}{4\pi} B_\nu + \frac{\alpha_s}{4\pi} U_\nu \quad (1)$$

и уравнения для внутренней энергии вещества

$$\rho \frac{dE}{dt} = \int_0^\infty \alpha_{c\nu} (U_\nu - B_\nu) d\nu + \rho Q_{laser}. \quad (2)$$

Здесь $\rho(\vec{r}, t)$ — плотность вещества; c — скорость света; t — время; $I_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}, \nu, t)$ — спектральная интенсивность излучения; ν — частота; $\vec{\Omega} \nabla I_\nu = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \xi I_\nu) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r \mu I_\nu) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} (\eta I_\nu)$ — оператор переноса в осесимметричной геометрии для цилиндрической системы координат; $\vec{\Omega} = (\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi, \eta = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi, \mu = \cos \theta)$ — единичный вектор в направлении полета фотона, где θ — угол между $\vec{\Omega}$ и осью симметрии задачи OZ , ϕ — угол между проекцией \vec{r} и проекцией $\vec{\Omega}$ на плоскость, перпендикулярную оси OZ , $\vec{r} = (r, z)$ — радиус-вектор; $\alpha_{c\nu}$ — коэффициент поглощения; α_s — коэффициент рассеяния; $\alpha_\nu = \alpha_{c\nu} + \alpha_s$ — коэффициент ослабления; $B_\nu(T, \nu)$ — интенсивность равновесного излучения (функция Планка с множителем); $U_\nu = \int_{\vec{\Omega}} I_\nu d\vec{\Omega}$ — спектральная плотность энергии излучения, умноженная на скорость света; E — внутренняя энергия вещества; Q_{laser} — энерговыделение от лазерного источника.

Для системы уравнений переноса теплового излучения (1), (2) в некоторой области G , ограниченной замкнутой поверхностью \bar{G} , решается краевая задача с начальными и граничными условиями

$$\begin{aligned} T(\vec{r}, t = 0) &= T^0; \quad I_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}, \nu, t = 0) = I_\nu^0(\vec{r}, \vec{\Omega}, \nu); \\ I_\nu(\vec{r} \in \bar{G}, \vec{\Omega} \vec{n} < 0, \nu, t) &= \bar{I}_\nu(\vec{r} \in \bar{G}, \vec{\Omega}, \nu, t), \end{aligned}$$

где \vec{n} — внешняя нормаль к поверхности \bar{G} .

Система уравнений (1), (2) решается численно. На каждом временном шаге $[t^n \leq t \leq t^{n+1}]$ организуется цикл внешних итераций по температуре. По нелинейности внутренней энергии и функции Планка организуется цикл внутренних итераций. Цикл внешних итераций совмещается с итерациями по нелинейности коэффициента поглощения. Для ускорения итераций применяется метод ВДЭПФ [12]. Для решения кинетического уравнения используется разностная схема DDAD-TVDR [13, 14]. Она обладает улучшенными свойствами по сравнению со схемами DS_n -метода при расчете оптически плотных сред за счет введения искусственной диссипации.

Модель переноса и поглощения лазерного излучения

Моделирование переноса и поглощения лазерного излучения в задачах инерциального термоядерного синтеза с использованием двумерной программы LAZER, в которой реализована трехмерная модель переноса и поглощения лазерного излучения, состоит из следующих этапов:

- 1) задание геометрии лазерного пучка;
- 2) получение последовательности точек пересечения луча с разностной сеткой;
- 3) вычисление коэффициента поглощения лазерного излучения;
- 4) определение энерговыделения в ячейках, которые пересекаются лазерными лучами;
- 5) балансировка вычисленных значений энерговыделения в ячейках сетки;
- 6) сглаживание значений энерговыделения вторыми разностями.

После выполнения этих этапов решается система (1), (2).

Устройство лазерного пучка. Лучевой пучок образуется вращением ломаной линии вокруг оси симметрии пучка (рис. 1). Параметры, определяющие лучевой пучок: α_{\max} — угол полураствора лучевого пучка; θ — угол между осью симметрии пучка и осью симметрии задачи; (z_f, r_f) — координаты фокуса; R_0 — расстояние от линзы до фокуса; s — расстояние вдоль луча, отсчитываемое от линзы; $R(s)$ — радиус пучка (расстояние от образующих пучка до его оси симметрии); r_0 — радиус фокального пятна; d_0 — половина длины цилиндрической части пучка; $K \times M$ — число лучей в пучке.

Последовательно вычисляются величины

$$d_0 = \frac{r_0}{\operatorname{tg} \alpha_{\max}}; \quad R_1 = \frac{r_0}{\sin \alpha_{\max}}; \quad s_1 = R_0 - R_1; \quad s_2 = R_0 + R_1.$$

В точках, которые находятся на расстояниях s_1 и s_2 от линзы, лазерные лучи терпят излом. Радиус пучка в зависимости от расстояния от линзы определяется выражением

$$R(s) = \frac{1}{2} \sin \alpha_{\max} (|s - s_1| + |s - s_2|).$$

Отсюда следует, что

$$\frac{R^2(0)}{R^2(s)} = \frac{(|s_1| + |s_2|)^2}{(|s - s_1| + |s - s_2|)^2}.$$

Лучевой пучок состоит из набора лучевых трубок. Каждая из этих трубок определяется лучом, имеющим свои параметры (α, ϕ) , и телесным углом $\delta\omega(\alpha)$, который, в свою очередь, определяет площадь поперечного сечения трубки. Далее везде лучевая трубка отождествляется с определяющим ее лучом.

Геометрия луча показана на рис. 2. Параметры, определяющие луч и его физические характеристики: $(\alpha, \phi) \in [0, \alpha_{\max}] \times [0, \pi]$ — пара угловых параметров, определяющих луч в пучке ($\phi \in [0, \pi]$, так как плоскость, проходящая через ось симметрии задачи и ось симметрии пучка, является плоскостью симметрии); $\mathbf{u}(\alpha, \phi, s) = (u_x(\alpha, \phi, s), u_y(\alpha, \phi, s), u_z(\alpha, \phi, s))$ — направляющие косинусы луча; $\mathbf{r}(\alpha, \phi, s) = (x(\alpha, \phi, s), y(\alpha, \phi, s), z(\alpha, \phi, s))$ — траектория луча в трехмерной декартовой системе координат; $(r(s), z(s)) = (\sqrt{x^2(s) + y^2(s)}, z(s))$ — траектория луча в цилиндрической геометрии; κ — коэффициент лазерного поглощения, формула для которого будет приведена далее; $E_0 P(t)$ — мощность лазерного излучения $\left(\int_0^\infty P(t) dt = 1 \right)$; $\bar{A}(\alpha)$ — распределение интенсивности излучения по углу $\left(2\pi \int_0^{\alpha_{\max}} \bar{A}(\alpha) \sin \alpha d\alpha = 1 \right)$; $\delta\omega(\alpha) \approx \sin \alpha \delta\alpha \delta\phi$ — телесный угол, приписываемый лучу с параметрами (α, ϕ) ; $I(0, \alpha, t) = E_0 P(t) \bar{A}(\alpha) \delta\omega(\alpha)$ — интенсивность излучения на линзе; $I(s, \alpha, \phi, t)$ — интенсивность вдоль луча с параметрами (α, ϕ) .

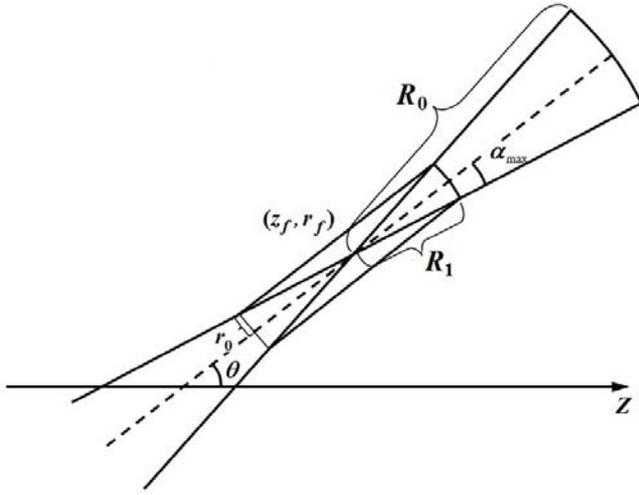


Рис. 1. Геометрия лучевого пучка

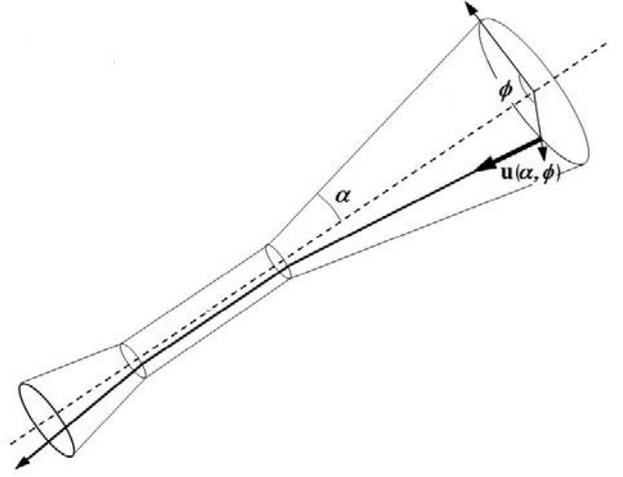


Рис. 2. Геометрия лазерного луча

Рассмотрим сначала поведение отдельного луча. Вдоль каждого луча выполняется соотношение

$$I(s, \alpha, \phi, t) = \frac{R^2(0)}{R^2(s)} I(0, \alpha, t) \exp\left(-\int_0^s \kappa dl\right). \quad (3)$$

Луч с параметрами $(\alpha, 0)$ (лежащий в одной плоскости с осью симметрии) состоит из набора направляющих векторов (направляющих косинусов):

$$\mathbf{u}(\alpha, 0, s) = \begin{cases} \mathbf{u}_1(\alpha, 0) = -(\sin(\theta + \alpha), 0, \cos(\theta + \alpha)), & s \in [0, s_1]; \\ \mathbf{u}_2(\alpha, 0) = -(\sin \theta, 0, \cos \theta), & s \in (s_1, s_2]; \\ \mathbf{u}_3(\alpha, 0) = -(\sin(\theta - \alpha), 0, \cos(\theta - \alpha)), & s \in (s_2, s_\infty), \end{cases}$$

где s_∞ — расстояние от линзы до конца счетной области.

Введем операторы поворота на угол ϕ вокруг оси OZ и на угол θ вокруг оси OY , задаваемые

$$\text{соответственно матрицами } A(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } B(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Оператор поворота $U(\phi)$ на угол ϕ вокруг оси симметрии пучка выражается через эти два оператора:

$$U(\phi) = B(-\theta) A(\phi) B(\theta).$$

Теперь направляющий вектор $\mathbf{u}(\alpha, \phi, s)$ можно выразить через направляющий вектор $\mathbf{u}(\alpha, 0, s)$: $\mathbf{u}(\alpha, \phi, s) = U(\phi) \mathbf{u}(\alpha, 0, s)$.

Для оператора $A(\phi)$ справедливы равенства

$$A(\phi_1 + \phi_2) = A(\phi_1) A(\phi_2); \quad A(n\phi) = A^n(\phi); \quad A^{-1}(\phi) = A(-\phi) = A^*(\phi).$$

Такие же равенства справедливы и для оператора $B(\theta)$.

Для того чтобы определить траекторию луча, введем обозначения

$$\mathbf{r}_f = (r_f, 0, z_f); \quad \mathbf{e}_\theta = (\sin \theta, 0, \cos \theta), \quad \mathbf{e}_{\theta+\pi/2} = (\cos \theta, 0, -\sin \theta); \quad \mathbf{e}_y = (0, 1, 0).$$

Определим вспомогательные векторы (концы векторов находятся в точках излома луча, изображенных на рис. 1, 2):

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_0(\alpha, \phi) &= \mathbf{r}_f + R_0 \cos \alpha \mathbf{e}_\theta + R_0 \sin \alpha (\mathbf{e}_{\theta+\pi/2} \cos \phi - \mathbf{e}_y \sin \phi); \\ \mathbf{r}_1(\alpha, \phi) &= \mathbf{r}_f + R_1 \cos \alpha \mathbf{e}_\theta + R_1 \sin \alpha (\mathbf{e}_{\theta+\pi/2} \cos \phi - \mathbf{e}_y \sin \phi); \\ \mathbf{r}_2(\alpha, \phi) &= \mathbf{r}_f - R_1 \cos \alpha \mathbf{e}_\theta + R_1 \sin \alpha (\mathbf{e}_{\theta+\pi/2} \cos \phi - \mathbf{e}_y \sin \phi). \end{aligned}$$

Координаты этих векторов:

$$\begin{aligned} x_0(\alpha, \phi) &= r_f + R_0 \cos \alpha \sin \theta + R_0 \sin \alpha \cos \theta \cos \phi; \\ y_0(\alpha, \phi) &= -R_0 \sin \alpha \sin \phi; \\ z_0(\alpha, \phi) &= z_f + R_0 \cos \alpha \cos \theta - R_0 \sin \alpha \sin \theta \cos \phi; \\ x_1(\alpha, \phi) &= r_f + R_1 \cos \alpha \sin \theta + R_1 \sin \alpha \cos \theta \cos \phi; \\ y_1(\alpha, \phi) &= -R_1 \sin \alpha \sin \phi; \\ z_1(\alpha, \phi) &= z_f + R_1 \cos \alpha \cos \theta - R_1 \sin \alpha \sin \theta \cos \phi; \\ x_2(\alpha, \phi) &= r_f - R_1 \cos \alpha \sin \theta + R_1 \sin \alpha \cos \theta \cos \phi; \\ y_2(\alpha, \phi) &= -R_1 \sin \alpha \sin \phi; \\ z_2(\alpha, \phi) &= z_f - R_1 \cos \alpha \cos \theta - R_1 \sin \alpha \sin \theta \cos \phi. \end{aligned}$$

Теперь можно определить траекторию луча:

$$\mathbf{r}(\alpha, \phi, s) = \begin{cases} \mathbf{r}_0(\alpha, \phi) + s\mathbf{u}_1(\alpha, \phi), & s \in [0, s_1]; \\ \mathbf{r}_1(\alpha, \phi) + (s - s_1)\mathbf{u}_2(\alpha, \phi), & s \in (s_1, s_2]; \\ \mathbf{r}_2(\alpha, \phi) + (s - s_2)\mathbf{u}_3(\alpha, \phi), & s \in (s_2, s_\infty), \end{cases}$$

где $\mathbf{u}_1(\alpha, \phi) = (u_{x1}, u_{y1}, u_{z1})$; $\mathbf{u}_2(\alpha, \phi) = (u_{x2}, u_{y2}, u_{z2})$; $\mathbf{u}_3(\alpha, \phi) = (u_{x3}, u_{y3}, u_{z3})$.

Опишем, как выглядит траектория луча в координатах (z, r) .

Если $s \in [0, s_1]$, то уравнение траектории

$$z = z_0 + su_{z1}; \quad r^2 = x_0^2 + y_0^2 + 2s(x_0u_{x1} + y_0u_{y1}) + s^2(u_{x1}^2 + u_{y1}^2). \quad (4)$$

При этом $\frac{ds}{dz} = -\frac{1}{u_{z1}} = \text{const.}$

Аналогично, если $s \in (s_1, s_2]$, то

$$\begin{aligned} z &= z_1 + (s - s_1)u_{z2}; \quad r^2 = x_1^2 + y_1^2 + 2(s - s_1)x_1u_{x2} + (s - s_1)^2 u_{x2}^2; \\ \frac{ds}{dz} &= -\frac{1}{u_{z2}} = \text{const.} \end{aligned} \quad (5)$$

И наконец, если $s \in (s_2, s_\infty)$, то

$$\begin{aligned} z &= z_2 + (s - s_2)u_{z3}; \quad r^2 = x_2^2 + y_2^2 + 2(s - s_2)(x_2u_{x3} + y_2u_{y3}) + (s - s_2)^2 (u_{x3}^2 + u_{y3}^2); \\ \frac{ds}{dz} &= -\frac{1}{u_{z3}} = \text{const.} \end{aligned} \quad (6)$$

Расчет энерговыделения. Покажем, как проводить вычисления с лучом, задаваемым уравнениями (4)–(6). Если исключить из этих уравнений расстояние s , то получим уравнения

$$f_1(\alpha, \phi, z, r) = u_{z1}^2 (x_0^2 + y_0^2 - r^2) + 2(z - z_0)u_{z1}(x_0u_{x1} + y_0u_{y1}) + (z - z_0)^2 (u_{x1}^2 + u_{y1}^2) = 0; \quad (7)$$

$$f_2(\alpha, \phi, z, r) = u_{z2}^2 (x_1^2 + y_1^2 - r^2) + 2u_{x2}u_{z2}x_0(z - z_1) + (z - z_1)^2 u_{x2}^2 = 0; \quad (8)$$

$$f_3(\alpha, \phi, z, r) = u_{z3}^2 (x_2^2 + y_2^2 - r^2) + 2(z - z_2)u_{z3}(x_2u_{x3} + y_2u_{y3}) + (z - z_2)^2 (u_{x3}^2 + u_{y3}^2) = 0. \quad (9)$$

Чтобы проверить, пересекает ли луч заданную ячейку, нужно подставить координаты вершин ячейки в то из уравнений (7)–(9), которое задает текущий участок луча. Если функция принимает в этих вершинах значения разных знаков, то рассматриваемый луч пересекает данную ячейку. Это условие только достаточное, так как вблизи вершины гиперболы возможно двойное пересечение какого-либо ребра ячейки. Тогда рассматриваемая функция будет принимать в вершинах ячейки один знак. Такое anomальное поведение возможно только вблизи оси симметрии задачи, более точно, при значениях r , близких к

$$r_{1 \min} = \sqrt{x_0^2 + y_0^2 - \frac{(x_0 u_{x1} + y_0 u_{y1})^2}{u_{x1}^2 + u_{y1}^2}}; \quad r_{2 \min} = |y_1|; \quad r_{3 \min} = \sqrt{x_2^2 + y_2^2 - \frac{(x_2 u_{x3} + y_2 u_{y3})^2}{u_{x3}^2 + u_{y3}^2}},$$

тогда как трассировка луча начинается с больших значений r и в каждую следующую ячейку переход осуществляется из предыдущей. Сами пересечения надо находить, подставляя параметрическое представление ребра ячейки в то из уравнений (7)–(9), которое описывает текущий участок луча, и решая затем квадратное уравнение.

Действуя по указанному принципу, можно получить последовательно точки пересечения луча с сеткой, упорядоченные вдоль траектории луча. Пусть это будет последовательность $(z_1, r_1), \dots, (z_n, r_n), (z_{n+1}, r_{n+1}), \dots, (z_N, r_N)$.

Длина отрезка луча, соединяющего соседние точки этой последовательности, вычисляется как

$$\delta s_{n+1/2} = s_{n+1} - s_n = -\frac{z_{n+1} - z_n}{u_z}.$$

Отсюда и из соотношения (3) следует рекуррентное соотношение для значений потоков энергии в двух соседних точках вдоль лучевой трубки:

$$R^2(s_{n+1}) I(s_{n+1}, \alpha, \phi, t) = R^2(s_n) I(s_n, \alpha, \phi, t) \exp(-\kappa_{n+1/2} \delta s_{n+1/2}).$$

Следовательно, энергия, выделившаяся на этом участке лучевой трубки, равна

$$\delta Q_{n+1/2} = R^2(s_n) I(s_n, \alpha, \phi, t) (1 - \exp(-\kappa_{n+1/2} \delta s_{n+1/2})).$$

Теперь, когда известно, как работать с каждым отдельно взятым лучом, опишем, как разбивается лучевой пучок на лучи (лучевые трубки).

Построим в области $[0, \alpha_{\max}] \times [0, \pi]$ сетку. Лучам в пучке будут соответствовать ее $K \times M$ ячеек. По переменной ϕ сетку возьмем равномерной. Тогда, если лучу отвечает параметр $(\alpha_{k+1/2}, \phi_{m+1/2})$, то

$$I(0, \alpha_{k+1/2}, t) = I_0(t) \bar{A}(\alpha_{k+1/2}) (\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k+1}) \frac{\pi}{M}.$$

Сетку по переменной α нужно строить так, чтобы значение $(\cos \alpha_k - \cos \alpha_{k+1}) \bar{A}(\alpha_{k+1/2})$ в каждом интервале было одним и тем же.

Обработывая последовательно лучи из каждого пучка, определим энерговыделение в каждой ячейке: $Q_{lazer}(t^n, i, j)$, где i, j — индексы ячеек регулярной двумерной разностной сетки ($i = 1, \dots, I$; $j = 1, \dots, J$). Указанная обработка выполняется на всех счетных шагах по времени.

Балансировка энерговыделения. Вычисленные значения энерговыделения в ячейках сетки не обеспечивают баланса энергии. Для того чтобы этот баланс был выполнен, произведем следующие действия. Вычислим сумму по всем ячейкам

$$Q_0 = \sum_{j=1}^J \sum_{i=1}^I Q_{lazer}(t, i, j) V(i, j),$$

где $V(i, j)$ — объем ячейки.

Получив коэффициент $d_{balance} = W(t)/Q_0$, где $W(t)$ — заданная мощность в точке начала пучка, далее получаем окончательное значение энергосвыделения в единицу времени для единицы массы ($\rho(i, j)$ — плотность в ячейке):

$$Q(t, i, j) = \frac{d_{balance} Q_{laser}(t, i, j)}{\rho(i, j)}.$$

Отсюда следует выполнение уравнения баланса $P(t) = \sum_{j=1}^J \sum_{i=1}^I Q(t, i, j) \rho(i, j) V(i, j)$.

Вычисление коэффициента поглощения лазерного излучения. Кулоновский логарифм для вычисления коэффициента поглощения вычисляется по формуле

$$\Lambda = \ln \left(2 + \frac{4000T\lambda}{1 + 1,5 \cdot \sqrt{0,0136 \langle z^2 \rangle T^{-1}}} \right) - 0,577,$$

где λ — длина волны лазерного излучения; T — температура вещества; $\langle z \rangle$ — среднее значение заряда ионов плазмы. Для среднего значения квадрата заряда $\langle z^2 \rangle$ полагаем $\langle z^2 \rangle = \langle z \rangle^2$ для *легких* веществ, $\langle z^2 \rangle = \langle z \rangle^2 + 1$ — для *тяжелых*.

Для всех веществ вычисляется значение критической плотности

$$\rho_c = 1,85 \cdot 10^{-3} \frac{\langle A \rangle}{\langle z \rangle} \frac{1}{\lambda^2}$$

($\langle A \rangle$ — атомный вес) и проверяется условие $\rho < \rho_c \cos^2 \Theta$, где Θ — угол между лазерным лучом и нормалью к поверхности вещества (при разностной аппроксимации берется нормаль к соответствующей грани ячейки).

Если условие $\rho < \rho_c \cos^2 \Theta$ выполнено, то вычисляем коэффициент лазерного поглощения (коэффициент обратно-тормозного поглощения)

$$\kappa = 0,03 \frac{\langle z^2 \rangle}{\langle z \rangle} \Lambda \left(\frac{\rho}{\rho_c \lambda} \right)^2 T^{-3/2} \frac{1}{n_0}, \quad n_0 = \frac{\sqrt{\cos^2 \Theta - \frac{\rho}{\rho_c}}}{|\cos \Theta|}. \quad (10)$$

В противном случае полагаем $\kappa = 10^5$. В первой формуле (10) взят заниженный множитель 0,03, чтобы учесть эффект прогрева стенок золотого цилиндра (хольраума) за счет электронной теплопроводности.

Сглаживание значений энергосвыделения вторыми разностями. После вычисления значений энергосвыделения $Q_{i,j} = Q(t, i, j)$ в ячейках для всех областей сглаживаем их вторыми разностями.

Для каждого $j = 1, \dots, J$

$$\begin{aligned} Q_{i,j}^* &= Q_{i,j} + \lambda_q (Q_{i-1,j} - 2Q_{i,j} + Q_{i+1,j}), \quad i = 2, \dots, I-1; \\ Q_{1,j}^* &= Q_{1,j} + \lambda_q (Q_{2,j} - 2Q_{1,j} + Q_{2,j}); \quad Q_{I,j}^* = Q_{I,j} + \lambda_q (Q_{I,j} - 2Q_{I-1,j} + Q_{I,j}), \end{aligned}$$

где λ_q — параметр, который в программе LAZER равен 0,01.

Затем для каждого $i = 1, \dots, I$ получаем

$$\begin{aligned} Q_{i,j}^{**} &= Q_{i,j}^* + \lambda_q (Q_{i,j-1}^* - 2Q_{i,j}^* + Q_{i,j+1}^*), \quad j = 2, \dots, J-1; \\ Q_{i,1}^{**} &= Q_{i,1}^* + \lambda_q (Q_{i,2}^* - 2Q_{i,1}^* + Q_{i,2}^*); \quad Q_{i,J}^{**} = Q_{i,J}^* + \lambda_q (Q_{i,J}^* - 2Q_{i,J-1}^* + Q_{i,J}^*) \end{aligned}$$

с этим же значением λ_q .

Влияние сглаживания на точность вычислений можно показать разложением сглаженных значений энергосвыделения в рамках ячейки разностной сетки. Значения Q^{**} для ортогональной сетки можно представить как

$$Q^{**} = Q + \lambda_q h_x^2 \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + \lambda_q h_y^2 \frac{\partial^2 Q}{\partial y^2} + \lambda_q^2 h_x^2 h_y^2 \frac{\partial^4 Q}{\partial x^2 \partial y^2} + O(h^4).$$

Результаты расчетов

В ряде работ (см., например, [2, 4–6, 15, 16]) рассматривается возможность термоядерного зажигания криогенных микромишеней непрямого облучения на лазерных установках с энергией в импульсе до 2 МДж. Криогенные микромишени представляют собой сферическую оболочку из легированного пластика или сплава бериллия с медью диаметром около 2 мм с замороженным на внутренней поверхности слоем DT-льда массой до 300 мкг. Сферическая мишень помещается внутрь конвертора (хольраума), который представляет собой тонкостенный золотой цилиндр диаметром около 6 мм и длиной около 10 мм. На торцах цилиндра есть окна для ввода лазерного излучения. Для обжата сферических мишеней с непрямым воздействием используется рентгеновское излучение, которое возникает при поглощении лазерного излучения на стенках конвертора.

В данной работе рассмотрена задача переноса рентгеновского излучения в *сером* приближении с учетом поглощения лазерного излучения и газодинамического движения в системе *конвертор–мишень*, предложенной для лазерной установки NIF в работе [15].

Рассматриваемая система представляет собой золотой цилиндр с внутренним радиусом $R_H = 0,275$ см и внутренней длиной $L_H = 0,95$ см. Торцы и боковая поверхность сопрягаются тороидальной поверхностью радиусом 0,1 см. Толщина стенок из золота составляет 0,006 см. На каждом торце цилиндра имеется окно радиусом $R_{LEH} = 0,138$ см, закрытое пленкой из CH толщиной 0,006 см. Внутренняя полость конвертора наполнена газом He + H₂ с начальной плотностью $8 \cdot 10^{-4}$ г/см³. В данной задаче конвертор помещен в дополнительную область, наполненную разреженным газом плотностью $1,3 \cdot 10^{-4}$ г/см³ с пробегом и уравнением состояния воздуха.

Сферическая мишень находится в центре конвертора. Она имеет оболочку из легированного полистирола (C_{0,47375}H_{0,47375}O_{0,05}Br_{0,0025}) с внешним радиусом 0,111 см и толщиной 0,016 см. На внутреннюю поверхность оболочки нанесен слой DT-льда толщиной 0,008 см. Полость в центральной части мишени заполнена DT-газом с начальной плотностью $3 \cdot 10^{-4}$ г/см³.

Лазерное излучение вводится в конвертор через окна с CH-пленкой в виде четырех лазерных пучков, по два через каждое окно, и освещает стенку конвертора. При поглощении лазерное излучение конвертируется в рентгеновское, которое, попадая на сферическую мишень, приводит к испарению с ее поверхности вещества и движению неиспаренного вещества внутрь мишени. Окна из CH-пленки нагреваются и начинают разлетаться, при этом испаренное золото начинает их "закрывать". От точности моделирования испаренного золота зависят количество лазерных лучей, продолжающих попадать в хольраум, и выбор расположения лазерных источников. Проблеме конструкций окон для уменьшения перекрытия лазерного излучения испаренным золотом посвящены работы [17, 18].

Параметры системы приведены в табл. 1.

Лазерное излучение с полной энергией $E_L \approx 1,4$ МДж вводится в виде пучков под углами $\pm 24,7^\circ$ и $\pm 50,7^\circ$. Характеристики двух пучков представлены в табл. 2. Два других пучка симметричны указанным относительно плоскости $z = 0$.

Зависимость лазерной мощности от времени берется для каждого пучка в виде

$$P_i = \frac{dE_L^i}{dt} = E_i f(t), \quad f(t) = \frac{F(t)}{\int_0^\infty F(t) dt}, \quad i = 1, 2;$$

$E_1 = 4,55 \cdot 10^5$ Дж; $E_2 = 2,45 \cdot 10^5$ Дж. Функция $F(t)$ взята из работы [15].

Функция $P(t)$ представлена на рис. 3 (1 ТВт = 10^3 Дж/нс). На этом рисунке также приведена зависимость от времени фотонной температуры в хольрауме на экваторе мишени из работы [15], сдвинутая по времени на 1 нс*. Атомный вес, средний заряд и среднее значение квадрата заряда ионов плазмы берутся согласно табл. 3. Длина волны лазерного излучения $\lambda = 0,35$ мкм.

На рис. 4 показана начальная геометрия задачи.

Перенос излучения рассчитывался в сером кинетическом приближении с квадратурой ES_{16} в пространстве полета фотонов. В расчетах использовались табличные пробеги излучения, рассчитанные

* В работе [15] за начало лазерного импульса принят момент $t = -1$ нс, по-видимому, для моделирования прогресса CH-пленки, закрывающей отверстия для ввода лазерного излучения внутрь хольраума.

Таблица 1

Параметры системы

Номер области	Вещество	ρ_0 (г/см ³)
1	DT-газ	$3 \cdot 10^{-4}$
2	DT-лед	0,25
3	СНОВr	1,05
4	He _{0,34} H _{0,66}	$8 \cdot 10^{-4}$
5	Au	19,3
5	СН(окна)	0,0175
6	воздух	$1,3 \cdot 10^{-4}$

Таблица 2

Характеристики лучей

Конус	Θ_{RAY} , град	α_{max} , град	r_f , см	z_f , см	r_0 , см
Внутренний	24,7	10	-0,106	0,299	0,032
Внешний	50,7	10	-0,002	0,47	0,032

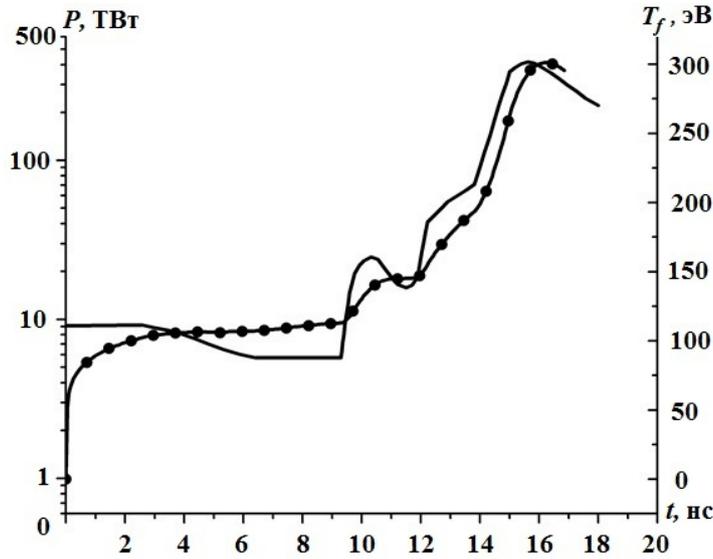


Рис. 3. Зависимость от времени лазерной мощности (—) и фотонной температуры (—●—) на экваторе мишени из работы [15]

Таблица 3

Атомный вес, средний заряд и среднее значение квадрата заряда ионов плазмы

Величина	Au	He _{0,34} H _{0,66}	СН(окна)	СНОВr	DT
$\langle A \rangle$	197	2	6,5	7,2	2,5
$\langle z^2 \rangle$	50	1,34	3,5	3,8	1
$\langle z \rangle$	2500	2,02	18,5	23,8	1

по модели среднего атома [19], и интерполяционные уравнения состояния в форме из работы [20]. Расчеты проводились без учета электронной теплопроводности. Размер пространственной сетки — 120 интервалов по углу и 215 интервалов по радиусу. Число лучей в каждом пучке — 16×16 .

На рис. 5 представлен ход лазерных лучей внутри полости хольраума на начальный момент времени. Видно, что все лазерные лучи входят в полость через СН-окна.

Поглощение части лазерных лучей в результате разрушения СН-пленки и перекрытия окон испаренным золотом к концу задачи хорошо видно из рис. 6 и 7.

На рис. 7 показаны распределения веществ и плотности на конечный момент времени $t = 16,9$ нс. На этот момент DT-газ мишени сжимается примерно в 3,54 раза (с 0,0870 до 0,0246 см), а газ He + H₂ в верхней части полости хольраума — более чем в 50 раз (с 0,164 до 0,003 см).

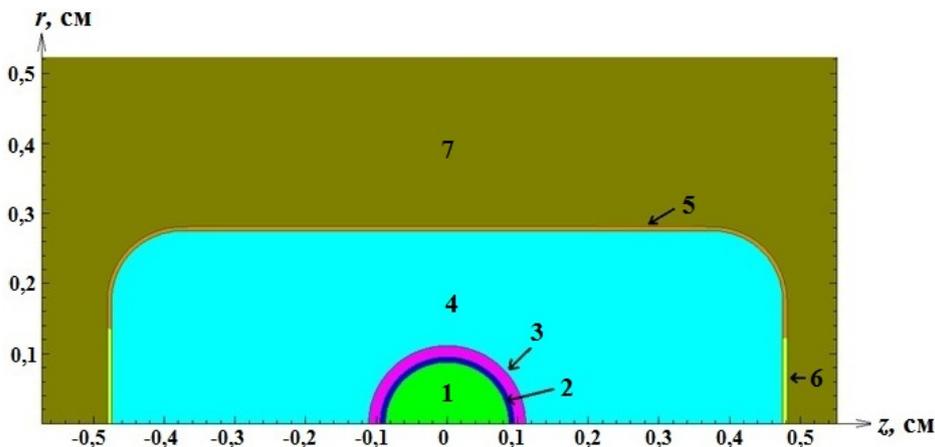


Рис. 4. Геометрия задачи: 1 — DT-газ; 2 — DT-лед; 3 — полистирол; 4 — газ He + H₂; 5 — золото; 6 — окна из CH; 7 — воздух

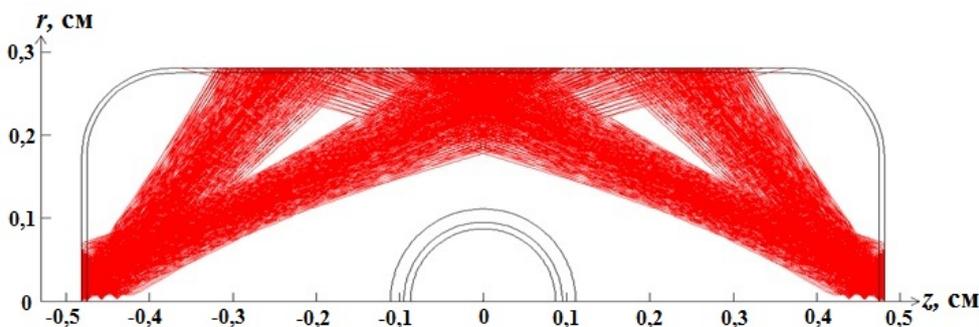


Рис. 5. Ход лазерных лучей внутри хольраума на начальный момент времени

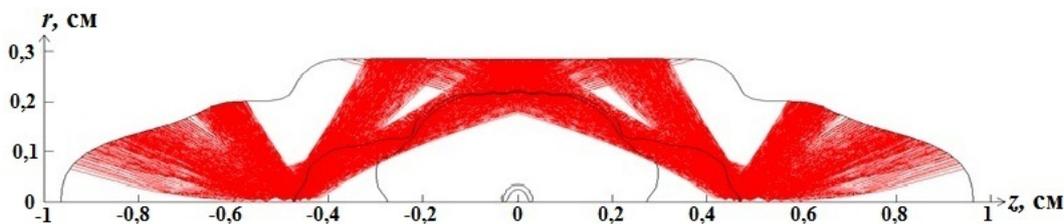


Рис. 6. Ход лазерных лучей внутри хольраума на конечный момент времени $t = 16,9$ нс

На рис. 8, 9 представлены распределения температур вещества, излучения и давления, а также разностная сетка на момент времени $t = 16,9$ нс. Видно, что распределение температуры излучения достаточно однородно в полости хольраума и достигает значений 300 эВ, что согласуется с данными работы [15]. Распределение температуры вещества существенно неоднородно и достигает максимальных значений у оси симметрии, где лазерные лучи максимально сконцентрированы.

Одной из основных характеристик при непрямом облучении термоядерных мишеней является температура излучения в полости хольраума. На рис. 10 показана полученная в расчетах зависимость фотонной температуры от времени на поверхности мишени в точке $z = 0$ вертикального канала, изображенного на рис. 9.

Как видно из сравнения рис. 3 и 10, зависимость фотонной температуры от времени на экваторе мишени, полученная в расчете с использованием программы LAZER, находится в качественном согласии с расчетом из работы [15], а ее максимальные значения близки к данным из этой работы.

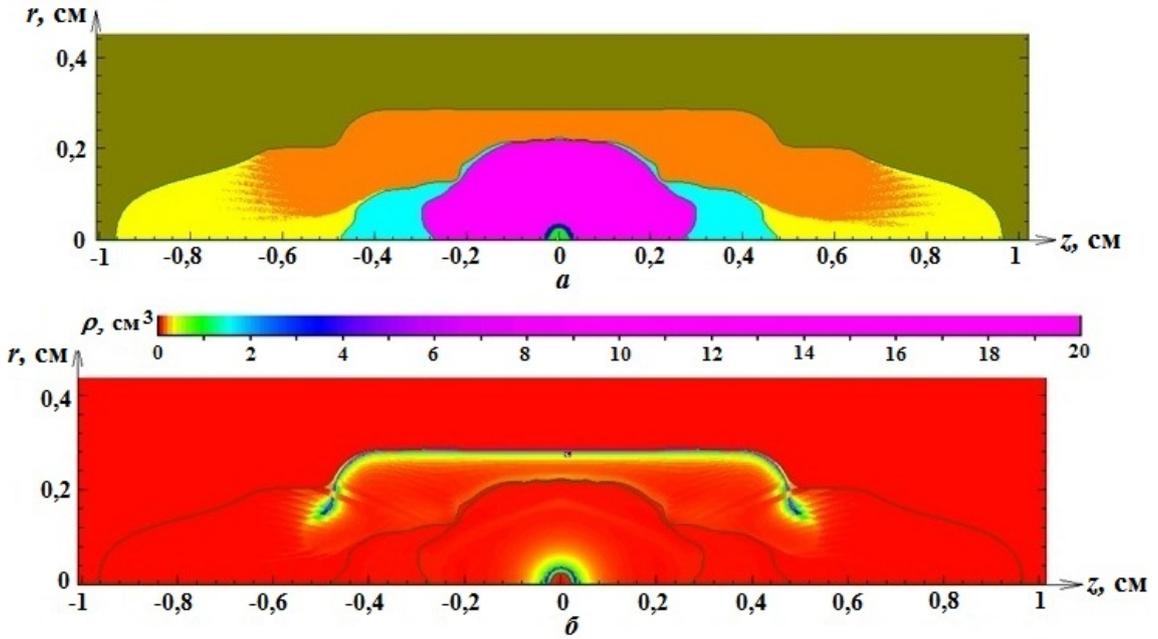


Рис. 7. Распределения веществ (а) и плотности (б) на конечный момент времени

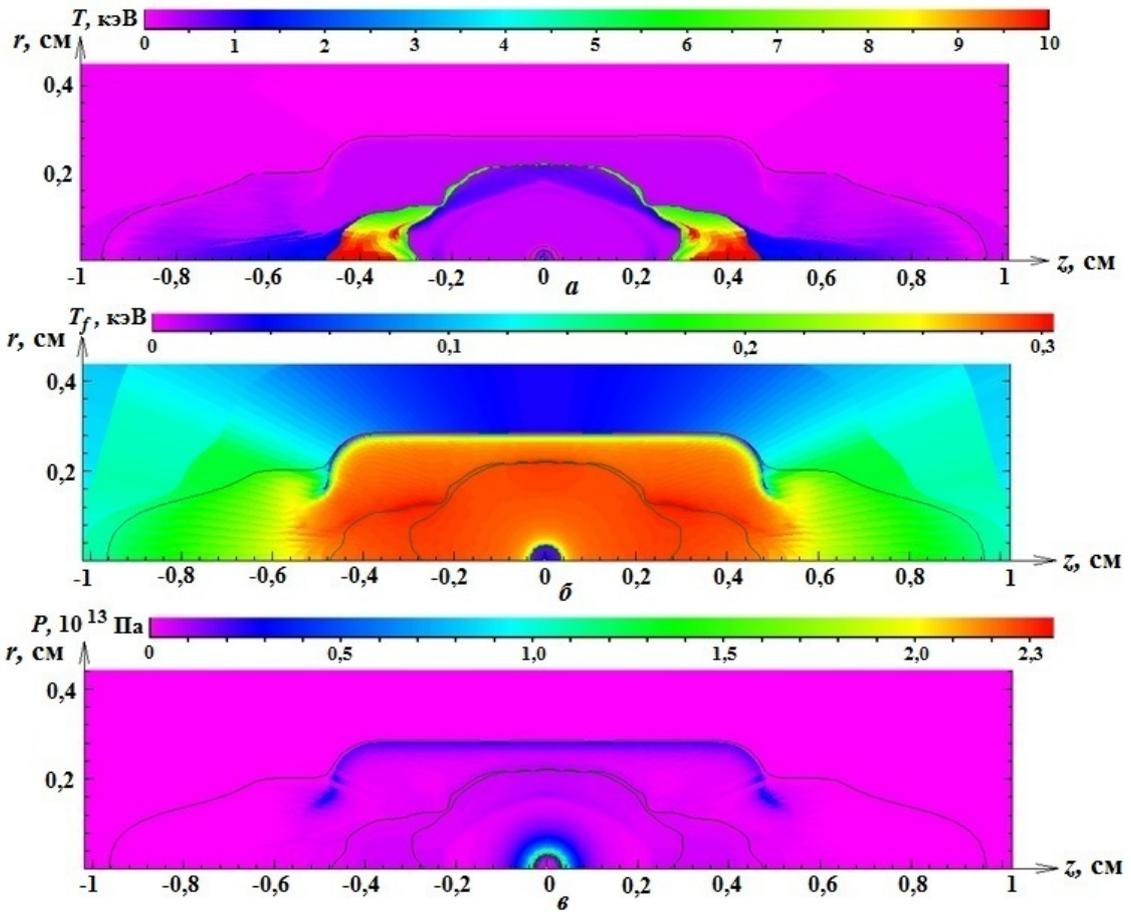


Рис. 8. Распределения температур вещества (а) и излучения (б), а также давления (в) на конечный момент времени

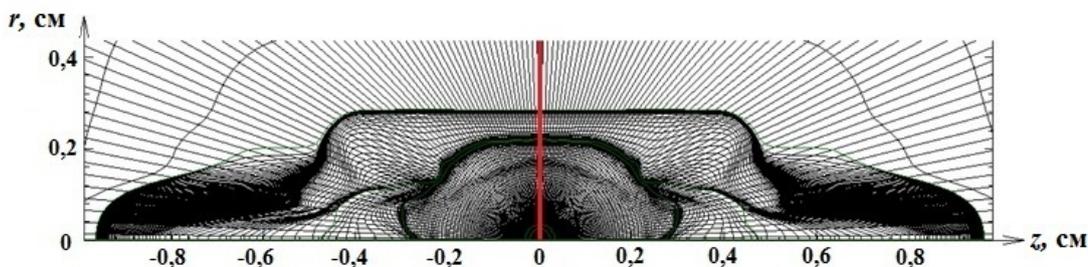


Рис. 9. Разностная сетка на конечный момент времени

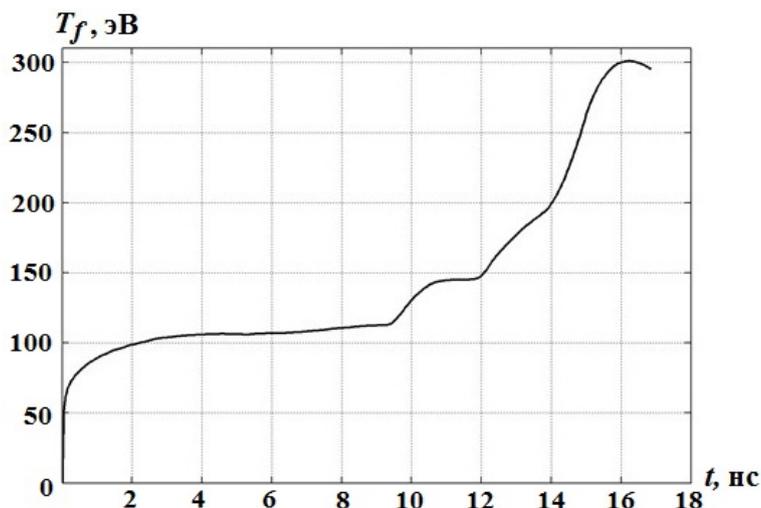


Рис. 10. Зависимость фотонной температуры от времени на экваторе мишени

Заключение

В данной работе рассмотрена задача двумерного кинетического переноса рентгеновского излучения в хольрауме с учетом поглощения лазерного излучения и газодинамического движения вещества. Подробно излагается трехмерная модель переноса и поглощения лазерного излучения, реализованная в программе LAZER. Согласно расчетам, проведенным по этой программе с уменьшенным коэффициентом поглощения лазерного излучения, полученная температура излучения в хольрауме находится в качественном согласии с расчетами Ливерморской лаборатории [15].

Поскольку в данных расчетах не учитывается электронная теплопроводность, вопросы, связанные со сжатием мишени, помещенной внутрь хольраума, и возможностью ее термоядерного зажигания, не обсуждаются. В дальнейшем планируется в используемой двумерной газодинамической программе учесть электронную теплопроводность и отличие температур ионов и электронов по методике [21].

Список литературы

1. Craxton R. S., Anderson K. S., Boehly T. R., Goncharov V. N., Harding D. R., Knauer J. P., McCrory R. L., McKenty P. W., Meyerhofer D. D., Myatt J. F., Schmitt A. J., Sethian J. D., Short R. W., Skupsky S., Theobald W., Kruer W. L., Tanaka K., Betti R., Collins T. J. B., Delettrez J. A., Hu S. X., Marozas J. A., Maximov A. V., Michel D. T., Radha P. B., Regan S. P., Sangster T. C., Seka W., Solodov A. A., Soures J. M., Stoeckl C., Zuegel Craxton J. D. Direct-drive inertial confinement fusion // Phys. Plasmas. A Review. 2015. Vol. 22. P. 110501.
2. Lindl J., Landen Ot., Edwards J., Moses Ed., Team N. Review of the National Ignition Campaign 2009–2012 // Ibid. 2014. Vol. 21. P. 020501.

3. *Ji Yan, Xing Zhang, Jiwei Li, Zhensheng Dai, Bolun Chen, Longfei Jing, Zhongjing Chen, Tianxuan Huang, Wei Jiang, Bo Yu, Yudong Pu, Zifeng Song, Keli Deng, Zhurong Cao, Feng Wang, Shao'en Jiang, Shenye Liu, Jiamin Yang.* Preliminary experiments on hohlraum-driven double-shell implosion at the ShenGuang-III laser facility // Nucl. Fusion. 2018. Vol. 58. P. 076020.
4. *Besnard D.* The megajoule laser program — ignition at hand // Eur. Phys. J. 2007. Vol. D 44. P. 207—213.
5. *Гаранин С. Г.* Мощные лазеры и их применение в исследованиях физики высоких плотностей энергии // УФН. 2011. Т. 181. С. 434.
Garanin S. G. Moshchnye lazery i ikh primenenie v issledovaniyakh fiziki vysokikh plotnostey energii // UFN. 2011. Т. 181. С. 434.
6. *Chizhkov M. N., Kozmanov M. Yu., Lebedev S. N., Lykov V. A., Rykovanova V. V., Seleznev V. N., Selezneva K. I., Stryakhnina O. V., Shestakov A. A., Vronskiy A. V.* Simulation of the hohlraum for a laser facility of megajoule scale // J. Physics: Conference Series. 2010. Vol. 244. P. 60.
7. *Лыков В. А., Лягина Е. Л., Шестаков А. А.* Влияние спектральных эффектов переноса излучения в различных приближениях на развитие коротковолновых возмущений в оболочечных мишенях непрямого облучения для мегаджоульных лазерных установок // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 1. С. 17—28.
Lykov V. A., Lyagina E. L., Shestakov A. A. Vliyanie spektralnykh effektov perenosa izlucheniya v razlichnykh priblizheniyakh na razvitie korotkovolnovykh vozmushcheniy v obolochechnykh mishenyakh nepryamogo oblucheniya dlya megadzhoulnykh lazernykh ustanovok // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2021. Vyp. 1. S. 17—28.
8. *Бисярин А. Ю., Грибов В. М., Zubov A. D., Neuvazhaev V. E., Pervinenko N. V., Frolov V. D.* Комплекс ТИГР для расчета двумерных задач математической физики // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1984. Вып. 3. С. 34—41.
Bisyarin A. Yu., Gribov V. M., Zubov A. D., Neuvazhaev V. E., Pervinenko N. V., Frolov V. D. Kompleks TIGR dlya raschyeta dvumernykh zadach matematicheskoy fiziki // Tam ze. Ser. Metodiki i programmy chislennoogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1984. Vyp. 3. S. 34—41.
9. *Гаджиев А. Д., Селезнёв В. Н., Шестаков А. А.* DS_n -метод с искусственной диссипацией и ВДМ-метод ускорения итераций для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в кинетической модели // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 4. С. 33—46.
Gadzhiyev A. D., Seleznyev V. N., Shestakov A. A. DS_n -metod s iskusstvennoy dissipatsiyey i VDM-metod uskoreniya iteratsiy dlya chislennoogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v kineticheskoy modeli // Tam ze. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2003. Vyp. 4. S. 33—46.
10. *Вронский А. В., Чижков М. Н., Шестаков А. А.* Двумерная модель распространения и поглощения лазерного излучения в мишенях ЛТС с учетом рефракции // Там же. 2017. Вып. 4. С. 14—24.
Vronskiy A. V., Chizhikov M. N., Shestakov A. A. Dvumernaya model rasprostraneniya i pogloshcheniya lazernogo izlucheniya v mishenyakh LTS s uchetom refraktsii // Tam ze. 2017. Vyp. 4. S. 14—24.
11. *Вронский А. В., Козманов М. Ю., Лебедев С. Н., Лыков В. А., Рыкованова В. В., Селезнёв В. Н., Селезнёва К. И., Стряхнина О. В., Чижков М. Н., Шестаков А. А.* Моделирование лазерной сборки для установки мегаджоульного класса // Тез. докл. X Межд. конф. ЗНЧ. Снежинск, 2010. С. 311.
Vronskiy A. V., Kozmanov M. Yu., Lebedev S. N., Lykov V. A., Rykovanova V. V., Seleznyev V. N.,

- Stryakhnina O. V., Chizhikov M. N., Shestakov A. A.* Modelirovanie lazernoy sborki dlya ustanovki megadzhournalnogo klassa // Tez. dokl. X Mezhd. konf. ZNCh. Snezhinsk, 2010. S. 311.
12. *Шестаков А. А.* Исследование скорости сходимости итераций метода ВДЭПФ при совместном решении уравнения энергии и уравнения переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2016. Вып. 2. С. 3–16.
Shestakov A. A. Issledovanie skorosti skhodimosti iteratsiy metoda VDEPF pri sovmestnom reshenii uravneniya energii i uravneniya perenosa izlucheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2016. Вып. 2. С. 3–16.
 13. *Гаджиев А. Д., Кондаков И. А., Писарев В. Н., Стародумов О. И., Шестаков А. А.* Метод дискретных ординат с искусственной диссипацией (DDAD-схема) для численного решения уравнения переноса нейтронов // Там же. 2003. Вып. 4. С. 13–24.
Gadzhiev A. D., Kondakov I. A., Pisarev V. N., Starodumov O. I., Shestakov A. A. Metod diskretnykh ordinat s iskusstvennoy dissipatsiyey (DDAD-skhemay) dlya chislennogo resheniya uravneniya perenosa neytronov // Tam zhe. 2003. Вып. 4. С. 13–24.
 14. *Шестаков А. А.* TVDR-схемы для решения системы уравнений переноса теплового излучения // Там же. 2019. Вып. 2. С. 17–36.
Shestakov A. A. TVDR-skhemyy dlya resheniya sistemy uravneniy perenosa teplovogo izlucheniya // Tam zhe. 2019. Вып. 2. С. 17–36.
 15. *John D. Lindl, Peter Amendt, Richard L. Berger et al.* The physics basis for ignition using indirect-drive targets on the National Ignition Facility // Phys. Plasmas. 2004. Vol 11(2). P. 339–491.
 16. *Holstein P. A., Chaland F., Chaprin C., Dufour J. M., Dumont H., Giorla J., Hallo L., Laffite S., Malinie G., Saillard Y., Schurtz G., Vandenboomgaerde M., Wagon F.* Evolution of the target design for the MJ laser // Laser and Particle Beams. 1999. Vol. 17(3). P. 403–413.
 17. *Eder D. C., Koniges A. E., Jones O. S., Marinak M. M., Tobin M. T., MacGowan B. J.* Late-time simulation of National Ignition Facility hohlraums // Nucl. Fusion. 2004. Vol. 44. P. 709–719.
 18. *Callahan D. A., Amendt P. A., Dewald E. L., Haan S. W., Hinkel D. E., Izurni N., Jones O. S., Landen O. L., Lindl J. D., Pollaine S. M., Suter L. J., Tabak M., Turner R. E.* Using laser entrance hole shields to increase coupling efficiency in indirect drive ignition targets for the National Ignition Facility // Phys. Plasmas. 2006. Vol. 13. P. 056307.
 19. *Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. Методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000.
Nikiforov A. F., Novikov V. G., Uvarov V. B. Kvantovo-statisticheskie modeli vysokotemperaturnoy plazmy. Metody raschyeta rosselandovykh probegov i uravneniy sostoyaniya. M.: Fizmatlit, 2000.
 20. *Елисеев Г. М., Клинишов Г. Е.* Уравнение состояния твердых веществ и его сплайн-аппроксимация: Препринт № 173. М.: ИПМ АН СССР, 1982.
Eliseev G. M., Klinishov G. E. Uravneniye sostoyaniya veshchestv i ego splayn-approksimatsiya: Preprint № 173. M.: IPM AN SSSR, 1982.
 21. *Лыков В. А., Бакуркина Е. С., Карлыханов Н. Г., Рыкованов Г. Н., Соколов Л. В., Черняков В. Е., Шушлебин А. Н.* Численное моделирование гидродинамических неустойчивостей и перемешивания при сжатии газонаполненных оболочек в опытах, проведенных на установке NIF // Тез. докл. XIII Межд. конф. ЗНЧ. Снежинск, 2017. С. 133.
Lykov V. A., Bakurkina E. S., Karlykhanov N. G., Rykovanov G. N., Sokolov L. V., Chernyakov V. E., Shushlebin A. N. Chislennoe modelirovanie gidrodynamichekikh neustoychivostey i peremeshivaniya pri szhatii gazonapolnennykh obolochek v opytakh, provedyennykh na ustanovke NIF // Tez. dokl. XIII Mezhd. konf. ZNCh. Snezhinsk, 2017. S. 133.

УДК 621.039

ОЦЕНКА ВРЕМЕННОЙ ПОСТОЯННОЙ ПРИ УЧЕТЕ ЗАПАЗДЫВАЮЩИХ НЕЙТРОНОВ

Д. Г. Модестов
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

Рассматривается адаптация методики расчета временной постоянной, представленной в ранее опубликованной статье, к задачам переноса нейтронов. В реализации эта методика близка к методу поколений с присущими ему погрешностями. Собственно расчет временной постоянной в нейтронных системах не во многом отличается от аналогичной задачи для частиц произвольной природы. Особенностью является учет влияния запаздывающих нейтронов, обычно использующий приближение, в котором перенос ядер-предшественников рассматривается в упрощенном виде. Для этого случая представлена методика моделирования такого переноса в указанном приближении. Для нее получены асимптотические зависимости систематической погрешности, связанной с размером поколения. В частности, показано, что для надкритических и несильно подкритических систем данная погрешность ведет себя так же, как в методе поколений. Для иллюстрации возможностей методики приводятся результаты расчета временной постоянной для двух систем — цельнометаллической критической сборки и ядерного реактора ВВЭР-1 000. При этом рассматривались как подкритические, так и надкритические состояния. Расчеты проводились с учетом и без учета запаздывающих нейтронов. Результаты расчетов подтверждают асимптотическое поведение погрешности, а при сравнении с результатами расчетов нестационарной задачи — корректность предлагаемой методики.

Ключевые слова: уравнение переноса нейтронов, нейтронная кинетика, временная постоянная, критическая сборка, ВВЭР.

Введение

В работе [1] предложена методика оценки временной постоянной в задачах переноса частиц методами статистического моделирования. Подобно условно-критической задаче [2] эта методика использует выделение оператора размножения, в качестве которого в нейтронных задачах обычно рассматривается оператор рождения частиц на делении, из оператора переноса [3], представляемого в виде суммы

$$\hat{P} = \hat{Q}_p + \hat{P}_0.$$

Для нахождения временной постоянной определяется оператор вспомогательной реакции $\hat{R}_\alpha(t)$, параметризованный пробным значением α . В работе [1] показано, что при равенстве

единице ведущего собственного значения оператора

$$\hat{K}_\alpha = \int_0^{t_0} (\hat{Q}_p - \hat{R}_\alpha(t) - \alpha) \hat{U}_\alpha(t) dt + \hat{U}_\alpha(t_0), \quad (1)$$

где $\hat{U}_\alpha(t)$ является решением задачи Коши

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_\alpha(t) = (\hat{P}_0 + \hat{R}_\alpha(t)) \hat{U}_\alpha(t), \quad \hat{U}_\alpha(0) = 1,$$

параметр α равен временной постоянной. Параметр t_0 в (1) в большинстве случаев можно положить равным бесконечности. Таким образом, разные варианты методики, в том числе связанные с рассмотрением разных типов частиц, в первую очередь определяются оператором $\hat{R}_\alpha(t)$.

С учетом того, что для практических приложений наиболее важен перенос нейтронов, здесь будет рассмотрен оператор вспомогательной реакции для этих частиц, а также задачи, решаемые с использованием этого оператора.

Оператор вспомогательной реакции

Вид оператора вспомогательной реакции, допустимого при любых значениях α , рассматривался в работе [1]. Этот оператор в общем случае представляет собой умножение на функцию от времени:

$$\hat{R}_\alpha(t) = \begin{cases} -\frac{\alpha}{1 - \alpha t}, & \alpha < 0; \\ -\alpha, & \alpha \geq 0, \end{cases} \quad (2)$$

где c — некоторая произвольная положительная постоянная, равная, например, единице.

Необходимо отметить, что при рассмотрении переноса только нейтронов использование (2) позволяет оценивать значение временной постоянной. Однако такое приближение не всегда применимо. В частности, нередко в прикладных задачах нужен учет запаздывающих нейтронов. Для этого рассматривается перенос их предшественников. Под предшественниками, как это обычно принято, далее будут пониматься источники запаздывающих нейтронов — нестабильные ядра, образующиеся на реакциях деления. При этом для указанных ядер используется модель, в рамках которой рождающееся ядро мгновенно тормозится, а далее в конце случайного промежутка времени распадается с испусканием нейтрона (а также других частиц).

Уравнения совместного переноса нейтронов и предшественников без учета влияния других частиц приводятся, например, в работе [4]. Принимая, что верхний индекс 0 (т. е. тип частицы $\theta = 0$) относится к нейтрону, а остальные m — к предшественникам, эти уравнения определяются следующими операторами:

$$\hat{P}_0 = \begin{pmatrix} \hat{P}_0^0 & \lambda^1 & \dots & \lambda^{m-1} & \lambda^m \\ 0 & -\lambda^1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -\lambda^{m-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -\lambda^m \end{pmatrix};$$

$$\hat{Q}_p = \begin{pmatrix} \hat{Q}_p^0 & 0 & \dots & 0 \\ \hat{Q}_p^1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_p^{m-1} & 0 & \dots & 0 \\ \hat{Q}_p^m & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где λ^i — постоянная распада i -го предшественника, а \hat{Q}_p^θ представляет собой оператор рождения частиц типа θ при делении.

При построении алгоритма моделирования предшественники объединяются в группы, в каждой из которых определяются множественность, а также временное и энергетическое распределения испускаемых частиц (направление вылета считается изотропным в системе покоя среды). В соответствии с представленной выше моделью из указанных распределений и множественности в точке реакции выбирают характеристики вторичных частиц, опуская стадию жизни порождающего ядра. В рамках данной модели наиболее оптимальным решением представляется следующий вид оператора вспомогательной реакции:

$$\hat{R}_\alpha = \begin{pmatrix} \hat{R}_\alpha^0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -\alpha & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -\alpha \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где \hat{R}_α^0 — оператор вспомогательной реакции для переноса нейтронов вида (2). Поскольку согласно (3) в модели переноса ядер физические реакции, отличные от распада, отсутствуют, такой подход позволяет построить аналитическое решение на временном интервале от рождения ядра до распада. Данное решение представляет зависимость количества ядер от времени:

$$\nu(\Delta t) = \exp^{-\alpha \Delta t}, \quad (5)$$

где Δt — время, прошедшее с момента образования ядра. При этом в первом приближении вклад в собственное значение условно-критической задачи пропорционален данному выражению.

Однако, как было отмечено в [1], прямое использование оператора (4) может привести к

нарушению условия положительности условно-критического оператора и, как следствие, экспоненциальному росту количества запаздывающих частиц в редких событиях выборки большого времени жизни предшественника.

Поскольку запаздывающие нейтроны играют хотя и важную, но не определяющую роль в развитии цепной реакции, представляется разумным использовать вместо (5) регуляризованное решение уравнения переноса предшественников. Для его построения следует отметить, что согласно [2] метод поколений характеризуется систематическим смещением результатов, обратно пропорциональным размеру поколения. С учетом этого свойства для регуляризации предлагается использовать следующую зависимость:

$$\nu_R(\Delta t) = \begin{cases} \exp^{-\alpha\Delta t}, & \exp^{-\alpha\Delta t} < N; \\ N, & \exp^{-\alpha\Delta t} \geq N, \end{cases} \quad (6)$$

где N — размер поколения. Необходимо отметить, что в силу условия $N \geq 1$ ν_R будет отличаться от ν только при $\alpha < 0$. Поэтому далее будет рассматриваться только этот случай.

Полезно оценить погрешность, вносимую (6). Указанная погрешность определяется и математическими ожиданиями ν и ν_R , которые несложно вычислить для экспоненциального временного распределения. Обозначив, аналогично (3), через λ постоянную распада, указанные математические ожидания можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \nu \rangle &= \lambda \int_0^{\infty} \exp^{-\lambda t} \nu(t) dt = \frac{\lambda}{\lambda + \alpha}; \\ \langle \nu_R \rangle &= \frac{\lambda}{\lambda + \alpha} + \frac{\alpha}{\lambda + \alpha} N^{\frac{\lambda + \alpha}{\alpha}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь можно рассмотреть два случая. Если $\alpha \geq -\lambda/2$, то $\langle \nu_R \rangle \rightarrow \langle \nu \rangle$ не медленнее, чем N^{-1} . То есть регуляризация (6) не ухудшает скорости сходимости метода поколений (хотя коэффициент перед членом N^{-1} , вероятно, увеличивается). В противном случае, т. е. при $\alpha < -\lambda/2$, $\langle \nu_R \rangle$ также сходится к $\langle \nu \rangle$, хотя и медленнее, чем метод поколений. С учетом того, что $\alpha_0 > -\lambda^i$ для любого i , можно предположить, что последний случай реализуется в глубоко подкритических системах.

Определенный интерес представляет оценка трудоемкости расчетов при использовании (6).

Следует отметить, что пробное значение α может принимать сколь угодно малые значения, в том числе ниже предельно допустимого $\alpha = -\lambda$. При этом

$$\langle \nu \rangle \xrightarrow{\alpha \rightarrow -\lambda} \infty; \quad \langle \nu_R \rangle \xrightarrow{\alpha \rightarrow -\lambda} \ln N + 1.$$

Как можно видеть, $\langle \nu_R \rangle$, в отличие от $\langle \nu \rangle$, остается конечным и относительно небольшим при реалистичных размерах поколения. При $\alpha < -\lambda$ значение $\langle \nu_R \rangle$ также конечно и ограничено сверху размером поколения, что можно видеть из соотношения

$$\langle \nu_R \rangle \xrightarrow{\alpha \rightarrow -\infty} N.$$

Впрочем, слишком малые значения α представляются экзотическими.

Выражение (5) определяет изменение во времени количества предшественников запаздывающих нейтронов за счет вспомогательной реакции. Далее при моделировании траектории таких нейтронов происходит изменение их количества, а также при $\alpha < 0$ — пополнение следующего поколения. Как следствие, при малых значениях α в следующем поколении происходит накопление *долгоживущих* нейтронов. Под последними понимаются те частицы, математическое ожидание времени траектории которых намного больше среднего по распределению параметров значения этой величины. При этом за счет временного размножения с уменьшением α вклад этих частиц в эффективный коэффициент размножения растет и при использовании методов с фиксированным размером поколения фактически реализуется регуляризация, аналогичная (6).

Хотя траектории нейтронов существенно сложнее траекторий ядер, представляется, что в некотором приближении зависимость эффективного коэффициента размножения от размера поколения можно рассматривать в виде, аналогичном (7):

$$k_\alpha(N) \approx k_\alpha + \delta N^{-\gamma}, \quad (8)$$

где учтено и влияние вклада запаздывающих нейтронов. В соотношении (8) δ и γ — некоторые положительные константы. При заданном значении α вычислительная схема будет сходиться к решению уравнения

$$k_\alpha(N) = 1, \quad (9)$$

которое будет обозначаться как $\alpha_0(N)$. С учетом того, что

$$\alpha_0(N) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \alpha_0,$$

а также того, что вблизи α_0 справедливо разложение

$$k_\alpha \approx 1 - \tau(\alpha - \alpha_0),$$

где τ — среднее время жизни, решение уравнения (9) можно приблизить следующим соотношением:

$$\alpha_0(N) = \alpha_0 + \frac{\delta}{\tau_{\alpha_0}} N^{-\gamma} = \alpha_0 (1 + \Delta N^{-\gamma}). \quad (10)$$

При этом необходимо помнить, что асимптотическое представление (10) — приближенное и зависимость оцененного собственного значения от размера поколения может несколько отличаться от (10). Также согласно [2] следует ожидать, что в случае $\alpha \geq 0$ из-за отсутствия временного размножения параметр γ в соотношении (8) будет равен единице.

Цельнометаллическая урановая сборка типа Godiva

Для оценки асимптотических зависимостей и применимости предлагаемой методики при расчете характеристик реальных установок на основе программы ПРИЗМА [5] была реализована программа расчета временной постоянной в задачах переноса нейтронов. С ее использованием были проведены методические расчеты ряда систем, в частности модели сборки Godiva, характеризующей жестким нейтронным спектром.

Критическая сборка Godiva, сконструированная из обогащенного урана, использовалась для экспериментального определения ряда нейтронно-физических характеристик, в том числе параметров Росси α (см., например, [4]). Подробное описание сборки содержится в справочнике [6]. Для расчетов же использовалась упрощенная модель в виде однородного уранового шара. Ядерный состав урана приведен в табл. 1. При проведении расчетов варьировались размер шара и его окружение. Для описания взаимодействия нейтронов с веществом использовались данные библиотеки ENDF/B-VII.1.

Результаты расчетов временной постоянной, полученные путем моделирования 10^9 точек деления для нескольких радиусов сборки типа

Ядерный состав урана

Ядро	Концентрация, $\text{б}^{-1}\text{см}^{-1}$
^{235}U	$4,499 \cdot 10^{-2}$
^{238}U	$2,4984 \cdot 10^{-3}$
^{234}U	$4,91184 \cdot 10^{-4}$

Godiva, представлены в табл. 2. Здесь через α_0^M обозначена временная постоянная для мгновенных нейтронов, а через α_0^3 — при учете запаздывающих; σ_α^M и σ_α^3 обозначают относительные погрешности этих величин. Все расчеты проводились с параметром вспомогательной реакции $s = 1$ в выражении (2) и размером поколения 10^5 точек деления. Кроме того, в табл. 2 приведены оценки предельных значений (при $N \rightarrow \infty$), полученные по формуле (10) методом наименьших квадратов. Значение γ оценивалось визуально из условия наилучшего совпадения с набором расчетных точек. При этом для $R = 8$ см при учете запаздывающих нейтронов получилось значение $\gamma = 0,4$. В остальных случаях зависимость (10) хорошо описывается при $\gamma = 1$. Для наглядности зависимости α от размера поколения приведены на рис. 1–3.

По результатам, приведенным в табл. 2 и на рис. 1–3, можно видеть, что наиболее сильная зависимость от обратного размера поколения характерна для сильно подкритических систем. При этом в соответствии с (10) при учете запаздывающих нейтронов эта зависимость нелинейная. Следует также отметить, что максимальная погрешность оценки временной постоянной получается вблизи мгновенной критичности, в том числе при учете запаздывающих нейтронов.

Для проверки значений величин, приведенных в табл. 2, можно использовать оценку асимптотического (при $t \rightarrow \infty$) поведения какой-либо характеристики нейтронного поля. При существовании собственной функции такое поведение всех характеристик подобно. В данном случае для оценки было выбрано число нейтронов в системе с мгновенным источником единичной интенсивности. Результаты расчетов зависимости от времени этой величины в сравнении с асимптотикой приведены на рис. 4–7.

В частности, на рис. 4, 5 приводятся результаты расчетов системы радиусом 8 см. Так как при выходе на асимптотику значения характеристик "падают", уменьшаясь более чем на десять

Временная постоянная для сборки типа Godiva с разными значениями радиуса

R	$\alpha_0^M, \text{мкс}^{-1}, N \rightarrow \infty$	$\alpha_0^M, \text{мкс}^{-1}$	σ_α^M	$\alpha_0^3, \text{мкс}^{-1}, N \rightarrow \infty$	$\alpha_0^3, \text{мкс}^{-1}$	σ_α^3
8,90	1,705	1,707	0,2	1,706	1,703	0,2
8,80	0,07820	0,08520	5,8	0,07865	0,07544	6,4
8,79	-0,08880	-0,08454	6,5	$5,089 \cdot 10^{-6}$	$4,793 \cdot 10^{-6}$	8,0
8,78	-0,2499	-0,2517	1,3	$1,113 \cdot 10^{-6}$	$1,100 \cdot 10^{-6}$	2,0
8,75	-0,7405	-0,7453]	0,5	$9,342 \cdot 10^{-8}$	$9,598 \cdot 10^{-8}$	1,2
8,50	-1,399	-1,411	0,4	$-1,643 \cdot 10^{-8}$	$-1,704 \cdot 10^{-8}$	0,1
8,00	-1,406	-1,410	0,1	$-1,847 \cdot 10^{-8}$	$-2,318 \cdot 10^{-8}$	0,2

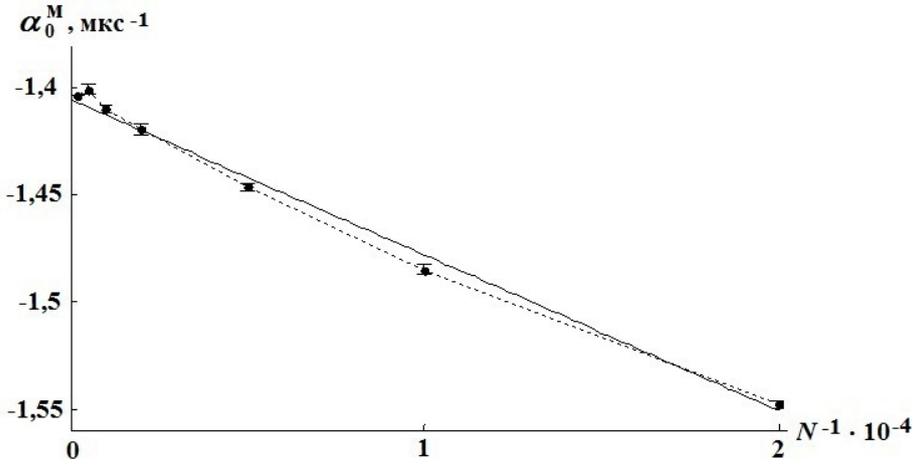


Рис. 1. Зависимость временной постоянной без учета запаздывающих нейтронов от обратного размера поколения для $R = 8$ см ($\gamma = 1$): ---●--- α^M ; — — $\alpha_0^M \approx -1,406 - 723,813/N$

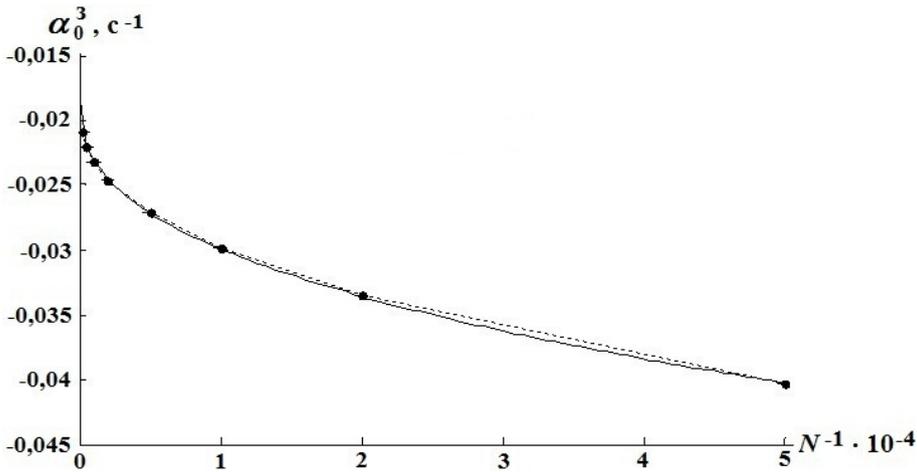


Рис. 2. Зависимость временной постоянной с учетом запаздывающих нейтронов от обратного размера поколения для $R = 8$ см ($\gamma = 0,4$): ---●--- α_0^3 ; — — $\alpha_0^3 \approx -0,01847 - 0,4554/N^{0,4}$

порядков, результаты получаются с большой статистической погрешностью. Однако можно утверждать, что они не противоречат представленным в табл. 2 значениям.

При уменьшении подкритичности уменьшаются падение значений характеристик и, как следствие, статистическая погрешность, что позволяет проводить более корректное сравнение. В качестве примера на рис. 6, 7 приведены результа-

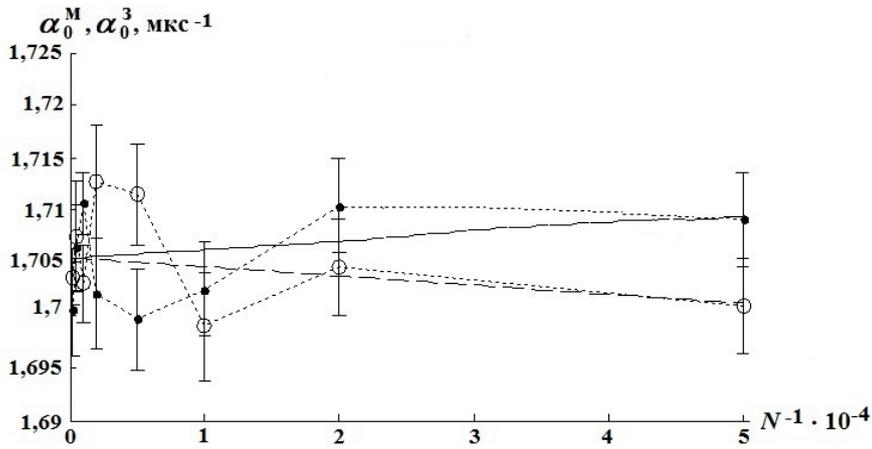


Рис. 3. Зависимость временной постоянной от обратного размера поколения для $R = 8,9$ см ($\gamma = 1$):
 ---●--- α_0^M ; — $\alpha_0^M \approx 1,705 + 7,88992/N$; ---○--- α_0^3 ; - - - - $\alpha_0^3 \approx 1,706 - 8,68009/N$

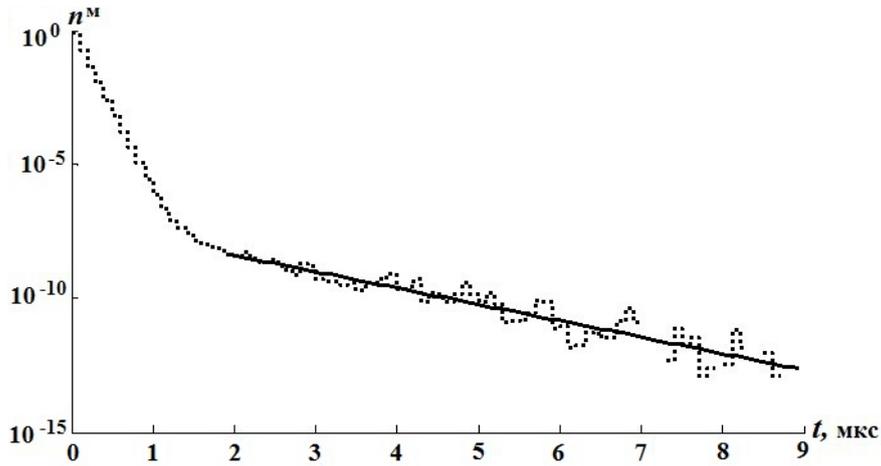


Рис. 4. Зависимость числа мгновенных нейтронов от времени для $R = 8$ см: - - - - - расчет; — — — $n^M \sim \exp(-1,406t)$

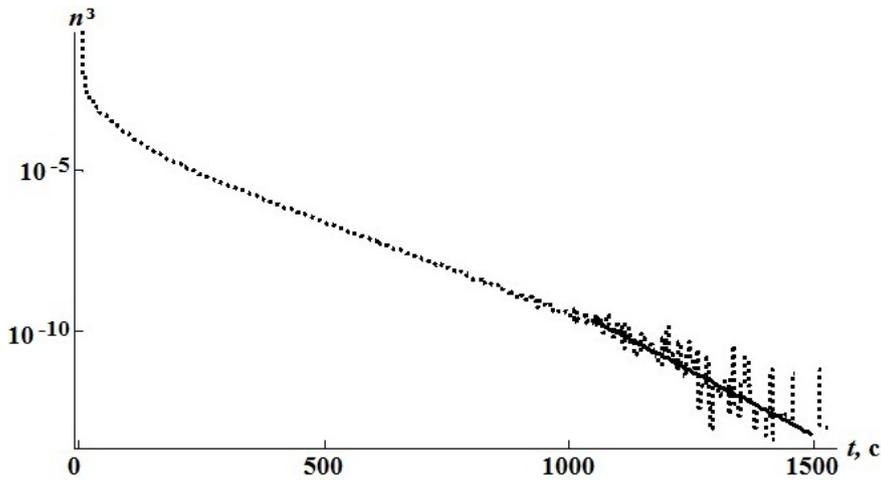


Рис. 5. Зависимость полного числа нейтронов от времени для $R = 8$ см: - - - - - расчет; — — — $n^3 \sim \exp(-0,01847t)$

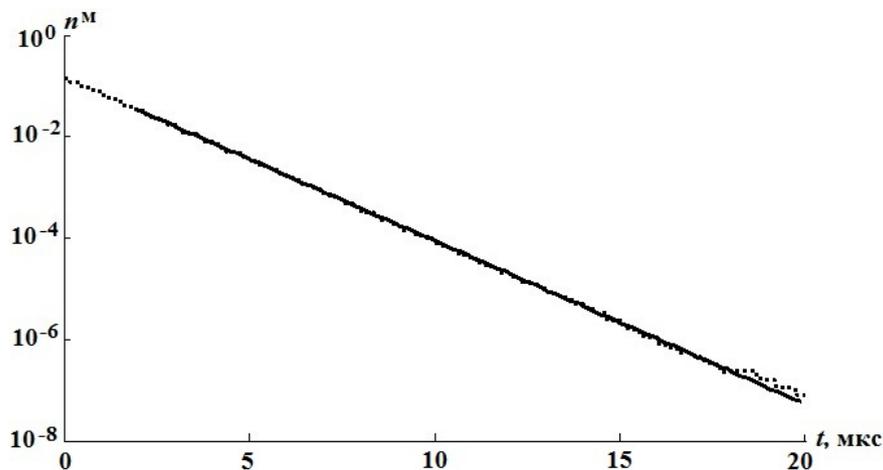


Рис. 6. Зависимость числа мгновенных нейтронов от времени для $R = 8,75$ см: ----- — расчет; — — $n^M \sim \exp(-0,7405t)$

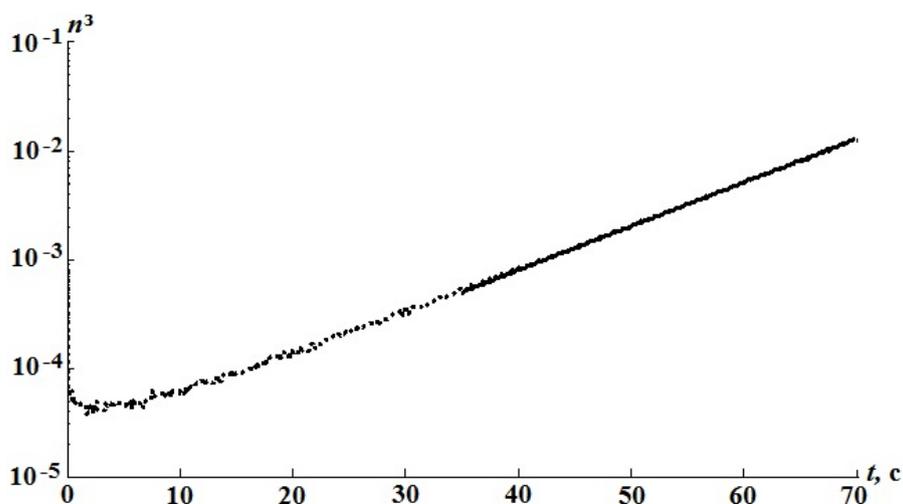


Рис. 7. Зависимость полного числа нейтронов от времени для $R = 8,75$ см: ----- — расчет; — — $n^3 \sim \exp(0,09342t)$

ты расчетов системы радиусом 8,75 см совместно с временной зависимостью, построенной по значениям из табл. 2. Можно видеть их хорошее согласие. Для больших значений радиуса сравнение не приводится, так как в этом случае согласие не ухудшается.

Расчет характеристик ВВЭР-1 000

Ядерный реактор ВВЭР-1 000, широко применяемый в энергетике, характеризуется мягким нейтронным спектром. Поэтому проверка корректности расчета характеристик такого реактора представляется важной для оценки применимости рассматриваемой методики. Для описания активной зоны здесь использовалась та же

математическая модель, что и в работе [5]. При этом все регулирующие стержни были извлечены из активной зоны, а для изменения критичности варьировалось содержание борной кислоты в теплоносителе (c_B). Для этого были выбраны три значения этой величины: $c_B = 3,0; 3,7; 4,0$ г/кг. При первом из них реактор надкритичен на мгновенных нейтронах, при втором — подкритичен на мгновенных нейтронах и надкритичен на запаздывающих, а при третьем — подкритичен на запаздывающих нейтронах.

Результаты расчетов нейтронно-физических характеристик представлены в табл. 3. Здесь в дополнение к временной постоянной для оценки отклонения от критичности представлены значения эффективного коэффициента размножения

Нейтронно-физические характеристики ВВЭР-1 000 для разного содержания борной кислоты

$c_B, \text{Г/КГ}$	$k_{\text{эф}}^M$	$\alpha_0^M, \text{МС}^{-1}$	σ_α^M	$k_{\text{эф}}^3$	$\alpha_0^3, \text{МС}^{-1}$	σ_α^3
3,0	1,0062	0,2420	0,18	1,0135	0,2419	0,18
3,7	0,9934	-0,2642	0,17	1,0005	$9,334 \cdot 10^{-6}$	2,5
4,0	0,9881	-0,4795	0,09	0,9952	$-1,489 \cdot 10^{-5}$	0,13

мгновенных и всех нейтронов ($k_{\text{эф}}^M$ и $k_{\text{эф}}^3$ соответственно). Относительные погрешности их расчета не превышают 0,001%. Можно отметить совпадение значений временной постоянной для $c_B = 3 \text{ Г/КГ}$ при заметном различии $k_{\text{эф}}^M$ и $k_{\text{эф}}^3$.

Для подтверждения корректности расчета временной постоянной были проведены расче-

ты нестационарной задачи, аналогичной той, что решалась для рассмотренной ранее сборки типа Godiva. Результаты расчетов в сравнении с асимптотикой представлены на рис. 8–12. Для всех вариантов можно видеть их хорошее согласие.

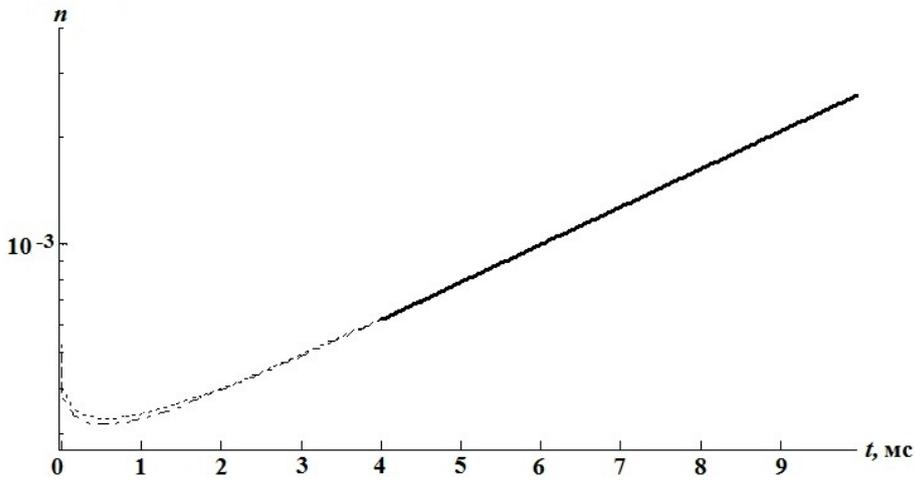


Рис. 8. Зависимость от времени числа нейтронов в ВВЭР-1 000 для $c_B = 3,0 \text{ Г/КГ}$: — только мгновенные нейтроны; - - - - - все нейтроны; — — — — — $n \sim \exp(-0,242t)$

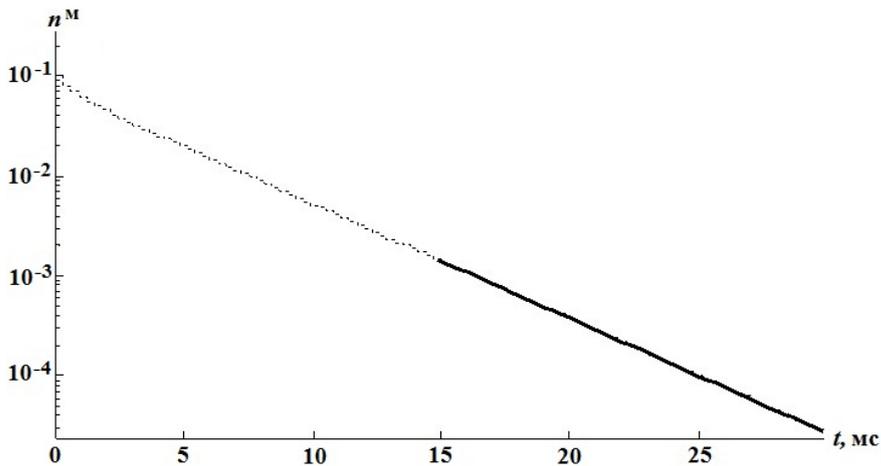


Рис. 9. Зависимость от времени числа мгновенных нейтронов без учета запаздывающих нейтронов в ВВЭР-1 000 для $c_B = 3,7 \text{ Г/КГ}$: — расчет; — — — — — $n^M \sim \exp(-0,2642t)$

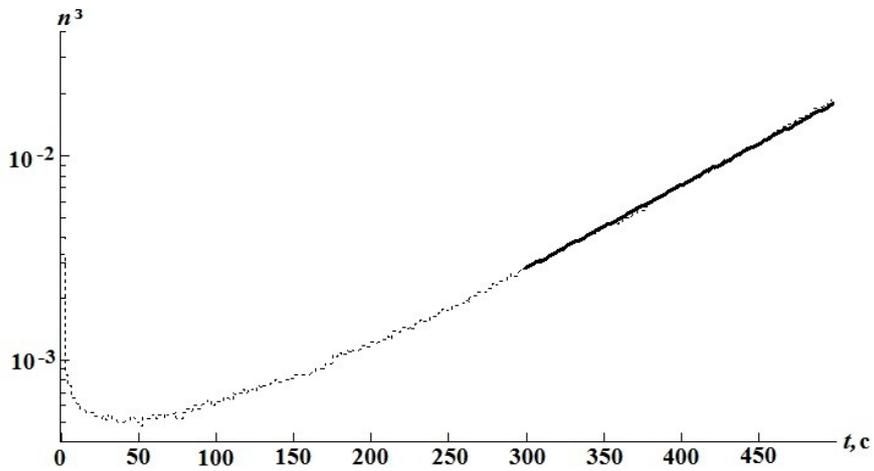


Рис. 10. Зависимость от времени числа нейтронов в ВВЭР-1000 для $c_B = 3,7$ г/кг: — расчет; — — $n^3 \sim \exp(0,009334t)$

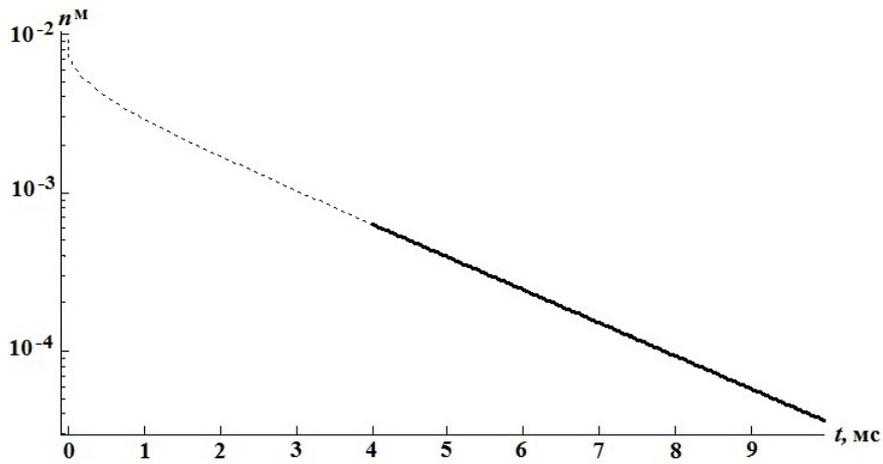


Рис. 11. Зависимость от времени числа мгновенных нейтронов в ВВЭР-1000 для $c_B = 4,0$ г/кг: — расчет; — — $n^M \sim \exp(-0,4795t)$

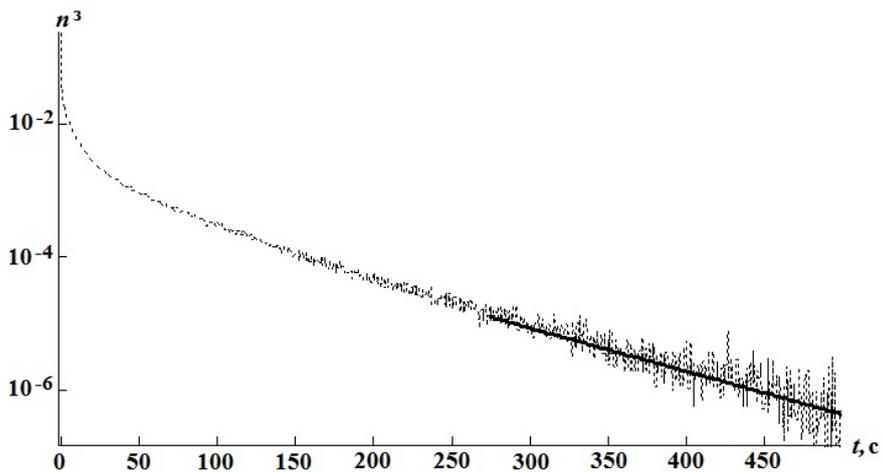


Рис. 12. Зависимость от времени числа нейтронов в ВВЭР-1000 для $c_B = 4,0$ г/кг: — расчет; — — $n^3 \sim \exp(-0,01489t)$

Некоторый вопрос вызывает случай запаздывающей подкритичности, показанный на рис. 12. Для него за приемлемое время не удалось получить решение нестационарной задачи с достаточной точностью. Однако можно видеть, что значение временной постоянной, приведенное в табл. 3, не противоречит асимптотическому поведению временной зависимости.

Заключение

Рассмотрена методика оценки временной постоянной методами статистического моделирования применительно к задачам переноса нейтронов, основанная на результатах работы [1]. Основные ее отличия от [1] связаны с приближенным учетом вторичных ядер — предшественников запаздывающих нейтронов. В случае подкритичности результаты расчетов, полученные по указанной методике, характеризуются систематической погрешностью, зависящей от размера поколения. В сильно подкритических системах эта погрешность может вносить основной вклад в погрешность результатов. При приближении к критичности она уменьшается и асимптотически не превышает систематической погрешности метода поколений.

Для иллюстрации корректности методики приведены результаты расчетов временной постоянной двух систем — критической сборки типа Godiva и модели реактора ВВЭР-1000 — по программе, реализованной на основе программы ПРИЗМА [5]. Полученные значения согласуются с асимптотическим поведением нейтронно-физических характеристик нестационарной задачи, полученных по программе ПРИЗМА, что подтверждает корректность предлагаемой методики и ее применимость к подобным системам, причем вне зависимости от критичности системы и учета влияния запаздывающих нейтронов. Также показана корректность оценки зависимости систематической погрешности от размера поколения и ее слабое влияние на погрешность расчета слабо подкритических систем.

Список литературы

1. Модестов Д. Г. Оценка временной постоянной в задачах переноса частиц методами

статистического моделирования // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 3. С. 59–69.

Modestov D. G. Otsenka vremennoy postoyannoy v zadachakh perenosa chastits metodami statisticheskogo modelirovaniya // Voprosy atomnoy nauki i tehniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2021. Vyp. 3. S. 59–69.

2. Золотухин В. Г., Майоров Л. В. Оценки параметров критичности реакторов методом Монте-Карло. М.: Энергоатомиздат, 1984.
Zolotukhin V. G., Mayorov L. V. Otsenki parametrov kritichnosti reaktorov metodom Monte-Karlo. M.: Energoatomizdat, 1984.
3. Белл Д., Глестон С. Теория атомных реакторов. М.: Атомиздат, 1974.
Bell D., Glesston S. Teoriya atomnykh reaktorov. M.: Atomizdat, 1974.
4. Кипин Д. Физические основы кинетики ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1974.
Kipin D. Fizicheskie osnovy kinetiki yadernykh reaktorov. M.: Atomizdat, 1974.
5. Зацепин О. В., Кандиев Я. З., Кашаева Е. А., Малышкин Г. Н., Модестов Д. Г. Расчеты методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА нейтронно-физических характеристик активной зоны ВВЭР-1000 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2011. Вып. 4. С. 64–74.
Zatsepin O. V., Kandiev Ya. Z., Kashaeva E. A., Malyshkin G. N., Modestov D. G. Raschyety metodom Monte-Karlo po programme PRIZMA neytronno-fizicheskikh kharakteristik aktivnoy zony VVER-1000 // Voprosy atomnoy nauki i tehniki. Ser. Fizika atomnykh reaktorov. 2011. Vyp. 4. S. 64–74.
6. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments. NEA/NSC/DOC (95)03, 2012.

Статья поступила в редакцию 12.01.21.

УДК 004.428, 004.032.24

БИБЛИОТЕКА ПРОГРАММ "УРС-ОФ" РАСЧЕТА СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ, АДАПТИРОВАННАЯ ДЛЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ С ВОЗМОЖНОСТЬЮ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ И ВЕКТОРИЗОВАННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Д. Г. Гордеев, Н. Н. Жильникова, Д. Н. Кидямкина, В. Г. Куделькин,
М. В. Куликова, О. Н. Шумилина
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлены описание структур данных, организация программ и вычислений в векторизованной версии библиотеки УРС-ОФ, позволяющей проводить параллельные вычисления теплофизических функций на общей памяти с использованием стандарта OpenMP. Описаны порядок взаимодействия библиотеки УРС-ОФ с прикладной программой, приемы распараллеливания вычислений. Приведены примеры, иллюстрирующие особенности распараллеливания условных конструкций и итерационных циклов с использованием массивов-масок, а также распараллеливание программ типа СуперУРС. Результаты исследований производительности представлены в виде метрики ускорения от оптимизации; результаты исследования масштабируемости, проведенного методом дробления задачи, представлены в виде метрики эффективности распараллеливания.

Ключевые слова: библиотека программ УРС-ОФ, распараллеливание на общей памяти, стандарт OpenMP, автовекторизация, ширина векторного регистра, условные конструкции, итерационные циклы, ускорение от оптимизации, эффективность распараллеливания.

Введение

В РФЯЦ-ВНИИЭФ функционирует и развивается пакет УРС-ОФ (**У**равнения **С**остояния **О**бщего **Ф**онда) [1]. Пакет УРС-ОФ состоит из двух взаимосвязанных частей: библиотеки программ на языке FORTRAN и интерактивной справочной системы, реализующей информационную поддержку библиотеки.

Библиотека УРС-ОФ используется в разработанных в РФЯЦ-ВНИИЭФ прикладных программах (ПП) численного решения задач математической физики для вычисления различных свойств веществ. Она включает в себя структуры данных, сервисные программы, определяющие правила взаимодействия с ПП, и набор компьютерных моделей. Компьютерные модели [2] представляют собой расчетные модули с отдельно хранящимися наборами параметров, реализующие математические модели различных свойств веществ. Программы библиоте-

ки в соответствии с их назначением разделены на группы: уравнения состояния, пробеги фотонов, уравнения для расчета упругоэластических свойств, электро- и теплопроводности, средних степеней ионизации.

История создания пакета УРС-ОФ во ВНИИЭФ насчитывает более четырех десятилетий и подробно описана в работах [1, 3–9].

До 2010 года расчетные модули в составе библиотеки УРС-ОФ были ориентированы на работу с универсальными процессорами MIMD (Multiple Instruction Multiple Data) архитектуры. Такие программы в вычислениях и при обмене данными с ПП использовали отдельные переменные и структуры из них. Версию библиотеки, включающую в себя только такие расчетные модули, далее будем называть не векторизованной библиотекой.

Появление вычислительных систем, содержащих процессоры с SIMD (Single Instruction Multi-

ple Data) архитектурой вычислителей и с поддержкой векторных операций открыло новые возможности по ускорению вычислений. Для таких вычислительных систем был разработан способ адаптации расчетных модулей к параллельным векторизованным вычислениям свойств веществ на массивах исходных данных. Версию библиотеки, включающую в себя и не векторизованные, и адаптированные (векторизованные) расчетные модули, далее будем называть векторизованной библиотекой.

Следует отметить, что результаты разработки в 2012–2015 годах расчетных модулей библиотеки УРС-ОФ для выполнения на графических ускорителях GPU [10–12] во многом определили рассмотренные в настоящей работе структуры данных, логику построения векторизованной библиотеки УРС-ОФ и схему ее взаимодействия с ПП, организацию расчетных модулей и параллельных вычислений.

Организация параллельных вычислений с использованием автовекторизации и стандарта OpenMP

На рис. 1 схематически изображен порядок взаимодействия ПП с расчетными модулями не векторизованной версии библиотеки УРС-ОФ. До начала вычислений проводится инициализация библиотеки — подготовка служебной информации, используемой в сервисных программах и расчетных модулях. Расчет свойств веществ в ПП производится в цикле по счетным ячейкам задачи вызовом программы-переключателя, которая обращается к расчетному модулю, реализующему компьютерную модель, заданную для вещества ячейки. Для обмена информацией с ПП разработаны типы данных в виде структур. Для завершения работы с библиотекой УРС-ОФ вызывается процедура освобождения памяти.

Для использования векторизованных вычислений внутри расчетных модулей библиотеки

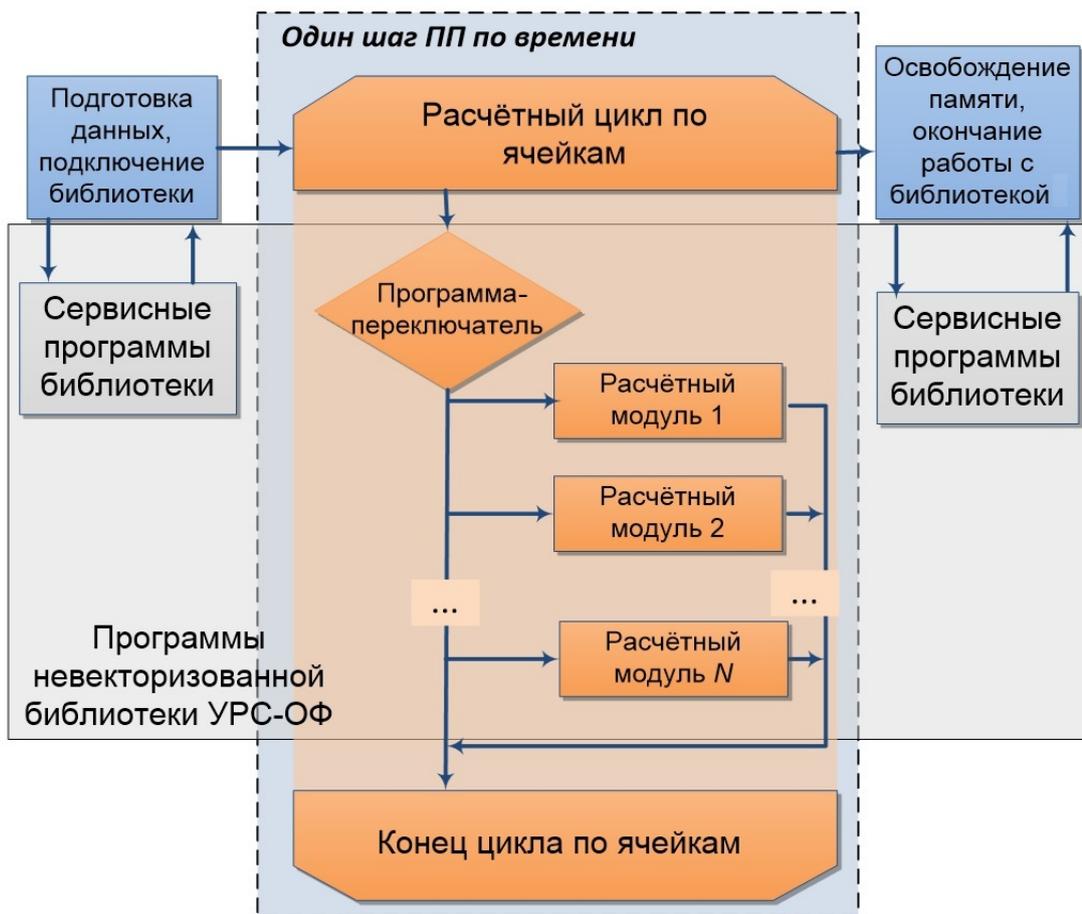


Рис. 1. Порядок взаимодействия ПП с расчетными модулями не векторизованной библиотеки УРС-ОФ

требуется непрерывный поток данных, с которыми выполняются однотипные операции. Поэтому в первую очередь реализована возможность обмена исходными и расчетными данными с ПП с использованием массивов. Для этого используются *обменные* структуры данных, содержащие адреса массивов исходных данных и результатов. Обменные структуры были разработаны ранее, при создании библиотеки для параллельных вычислений на GPU [10–12]. На рис. 2 приведен фрагмент описания одной из таких структур, используемой при расчете термодинамических свойств.

Использование структуры данных [10–12] позволяет перенести цикл по счетным ячейкам внутрь программ расчета свойств веществ, что делает возможными распараллеливание в модели общей памяти и векторизацию вычислений.

Для оптимального использования возможностей компиляторов по векторизации вычисления выполняются в цикле с шагом, соответствующим ширине N_v векторных регистров используемого вычислителя или кратным ей. Локальные переменные объявляются как массивы фиксированного размера N_v . Внутри цикла во вложенных циклах организована передача данных из локальных массивов в массив ПП и обратно. Внутри цикла отсутствуют зависимости по данным, что позволяет автоматически векторизовать средствами компилятора большинство вы-

числений. На рис. 3 показана структурная схема векторизованного расчетного модуля.

Для векторизации вычислений должно обеспечиваться выполнение следующих условий: границы локальных массивов выровнены, данные расположены в памяти непрерывно. Выравнивание адресов локальных массивов размером N_v обеспечивается автоматически указанием соответствующего ключа компиляции. При выбранных в ПП порядках хранения данных и обхода счетной сетки задачи данные, относящиеся к разным веществам, для которых заданы разные модели свойств, могут располагаться в памяти в произвольном порядке. Поэтому перед обращением к векторизованным расчетным модулям с использованием сервисных программ библиотеки УРС-ОФ выполняется сортировка индексов массивов по номеру вещества. Результаты сортировки запоминаются в служебном массиве. Этот массив затем применяется для группировки исходных данных по номеру вещества в отдельные непрерывные блоки памяти и обратной расстановки после вычислений. На рис. 4 схематично приведен процесс группировки, где цвет квадрата (ячейки) соответствует номеру вещества, номер ячейки — порядковый номер в негруппированном массиве данных.

Описанный подход направлен на эффективное использование возможностей векторизованных вычислений единичного ядра вычислитель-

! iS_OF — 4 или 8 байт, в зависимости от разрядности операционной системы

```

type urs_type_PA
  integer(kind = 4) L           ! номер заказа
  integer(kind = 4) num_prog   ! идентификатор программы
  integer(kind = iS_OF) RO     ! адрес массива плотностей
  integer(kind = iS_OF) T      ! адрес массива температур ...
  integer(kind = iS_OF) P      ! адрес массива полного давления
  integer(kind = iS_OF) E      ! адрес массива полной энергии
  integer(kind = iS_OF) DPDT    ! адрес массива производных от P по T при го-константа
  integer(kind = iS_OF) DEDT    ! адрес массива производных от E по T при го-константа
  integer(kind = iS_OF) DPDR    ! адрес массива производных от P по го при T-константа
  integer(kind = iS_OF) DEDR    ! адрес массива производных от E по го при T-константа
  integer(kind = iS_OF) CC      ! адрес массива квадратов скорости звука
  ...
  real(kind = 8) EPSA          ! константа абсолютной сходимости итераций в УРС
  real(kind = 8) EPS0         ! константа относительной сходимости итераций в УРС
  real(kind = 8) TF           ! "фоновая" температура

  integer(kind = iS_OF) ko     ! адрес массива кодов ответа
end type urs_type_PA

```

Рис. 2. Фрагмент описания структуры, используемой при расчете термодинамических свойств

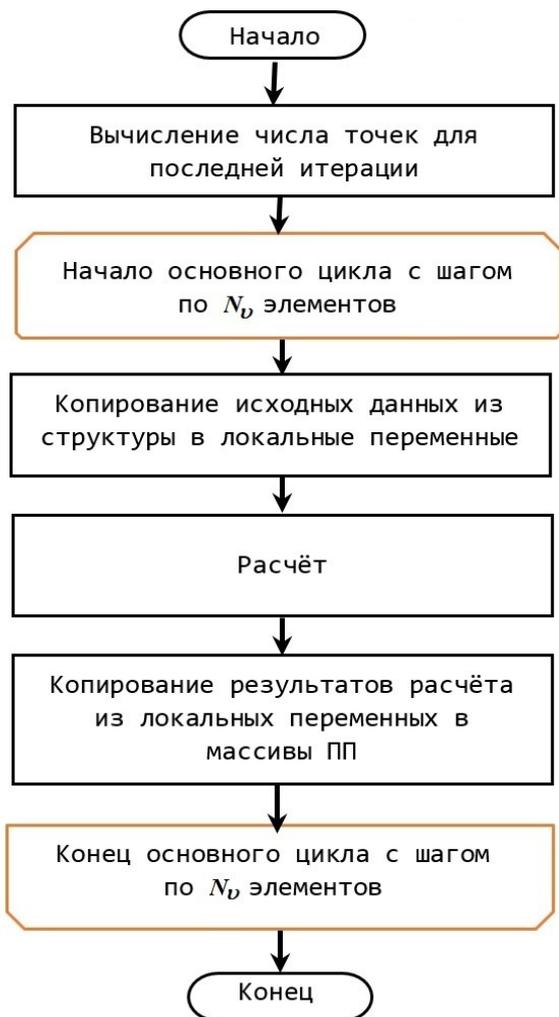


Рис. 3. Структурная схема векторизованного расчетного модуля

ного узла. Для проведения расчета с использованием всего узла дополнительно реализована возможность распараллеливания вычислений

на общей памяти с использованием стандарта OpenMP [13]. Для этого разработаны служебные программы — omp-ядра, обеспечивающие разделение вычислений по нитям OpenMP. Структурная схема omp-ядра показана на рис. 5. Квадраты зеленого цвета соответствуют вычислениям, выполняемым в отдельных omp-нитях. Отметим, что способ организации параллельных вычислений с использованием служебных программ — GPU-ядер — применялся ранее при создании библиотеки для параллельных вычислений с использованием GPU [10–12].

Пусть для i -го вещества есть N_i исходных расчетных точек. Для их вычисления организуется omp-параллельный цикл по числу нитей nt , которое определяется ПП. Группированные массивы данных разбиваются на интервалы по числу нитей. Для каждой нити вычисляются индекс начала расчетного интервала в общем массиве и число расчетных точек на нити. В нитях с первой по предпоследнюю вычисляются N_i/nt точек, а в последней — либо N_i/nt , либо меньший остаток точек. После определения границ расчетного интервала вызывается векторизованный расчетный модуль.

Теперь рассмотрим схему взаимодействия ПП с векторизованной версией библиотеки УРС-ОФ, изображенную на рис. 6. Стрелками показан обмен данными с ПП.

После инициализации библиотеки УРС-ОФ до начала вычислений в ПП проводятся выделение памяти под массивы исходных данных и результатов, заполнение обменных структур адресами этих массивов. Процесс дальнейшей работы с библиотекой УРС-ОФ можно разделить на три этапа, которые выполняются в ПП на каждом шаге по времени.

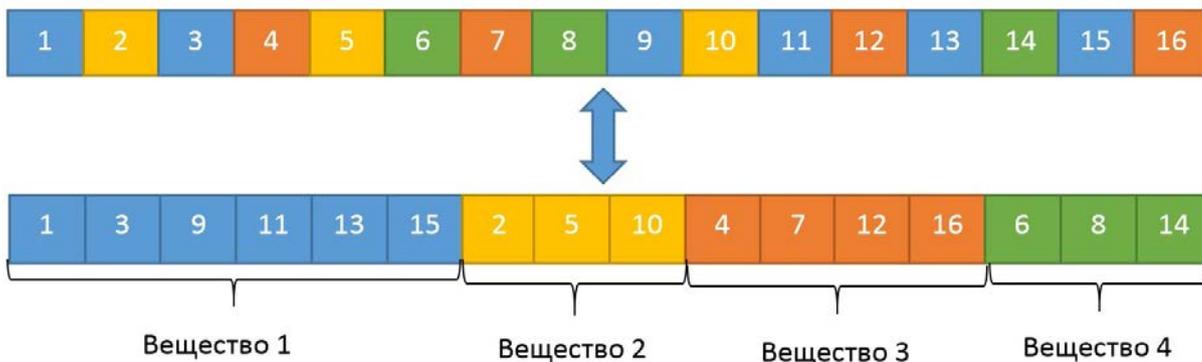


Рис. 4. Процесс группировки данных по веществам

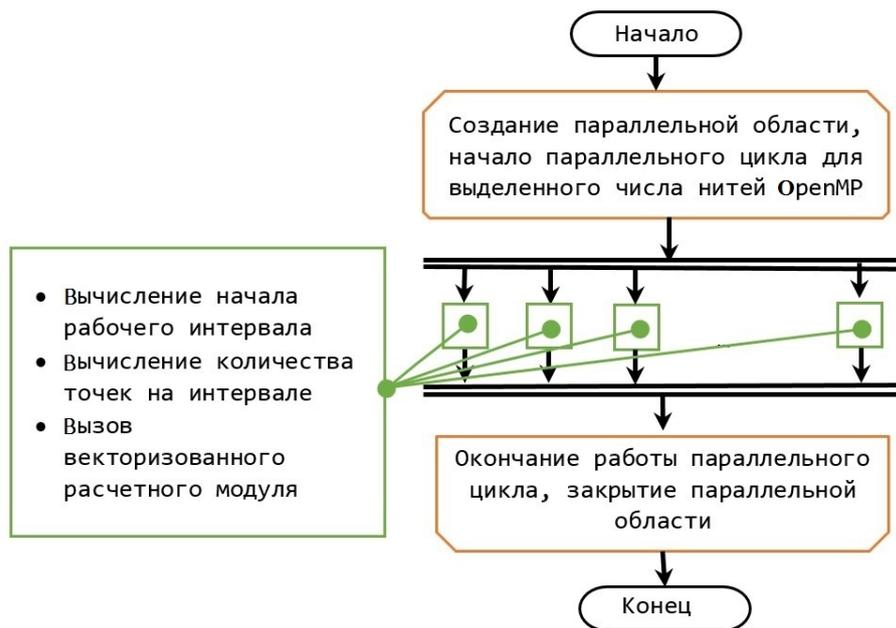


Рис. 5. Структурная схема отп-ядра

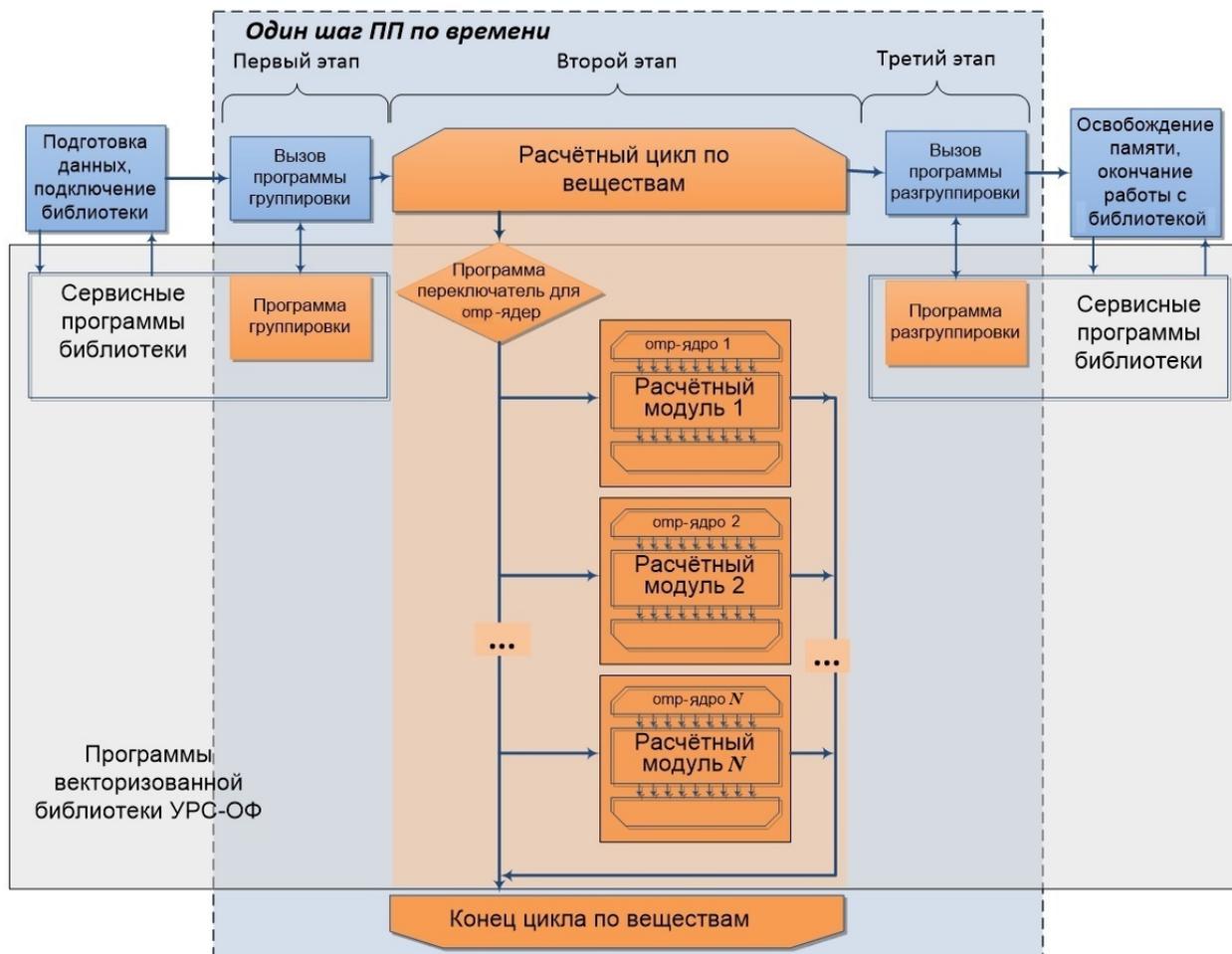


Рис. 6. Порядок взаимодействия ПП с расчетными модулями векторизованной версии библиотеки УРС-ОФ

На первом этапе каждого счетного шага при необходимости вызываются программы группировки исходных данных.

На втором этапе для каждого вещества вызывается одна из двух служебных программ-переключателей, разработанных для универсальности обращения к векторизованным расчетным модулям. Программы-переключатели организуют либо непосредственный вызов векторизованных расчетных модулей, либо вызов отпр-ядер.

На третьем этапе ПП проводит процедуру разгруппировки полученных результатов, т. е. возвращает данные в исходное расположение в массиве.

Особенности векторизации логических конструкций и итерационных процедур

В пакете программ УРС-ОФ реализован широкий набор моделей для расчета свойств веществ. При реализации данных моделей в расчетных модулях библиотеки отдельно или в комбинации используются вычисления по аналитическим формулам, интерполяционным табличным зависимостям данных на одно- и многомерных сетках, итерационные методы решения нелинейных уравнений, разностные методы решения дифференциальных уравнений. Организация кода заметно отличается в различных расчетных модулях.

Векторизация вычислений в расчетных модулях проводилась автоматически средствами компилятора и контролировалась по специальному отчету компилятора по векторизации. После анализа отчета были определены конструкции языка и части алгоритмов, не поддающиеся автовекторизации: это циклы, содержащие логические конструкции, итерационные процедуры. Для них разработаны специальные векторизуемые версии.

В качестве примера векторизации цикла с логическими конструкциями рассмотрим расчет по аппроксимации значений функции Дебая и ее первой производной [14].

При построении аппроксимации область определения функции была разбита на пять участков. Результат разбиения приведен на рис. 7.

На участках 1, 3–5 для вычисления функции Дебая и ее первой производной используются разные аналитические выражения, а на участке 2 используется сплайн-аппроксимация с равномерной расстановкой узлов. Для организации вычислений на участках в не векторизованном режиме используются пять условных конструкций. На рис. 8 показана структурная схема не векторизованной программы аппроксимации функции Дебая.

Первоначально при векторизации этой программы вещественные аргументы были заменены массивами размером N_v и организован цикл от 1 до N_v , внутри которого осуществлялись проверка попадания текущего элемента массива на один из участков и вычисление значения функции Дебая и ее первой производной. Из отчета компилятора по векторизации стало ясно, что такой цикл не автовекторизуется и не дает ускорения в расчете.

Для решения этой проблемы был введен специальный массив-маска. Каждый элемент массива-маски — это номер участка, к которому относится соответствующий элемент массива-аргумента. Далее используется конструкция маскированного присваивания *where*, заменяющая условный оператор для массивов. Она осуществляет фильтрацию исходных данных и результатов вычислений, выбирая среди них элементы, удовлетворяющие заданному условию. Таким образом, векторизованные вычисления производятся только для тех участков, номера которых содержатся в массиве-маске. На рис. 9, где показана схема выполнения векторизованной программы аппроксимации функции Дебая, приведены также пример массива-аргумента, выражение для вычисления массива-маски и сам массив-маска.

К конструкциям, которые не автовекторизуются компилятором, относятся и циклы, реализующие итерационные процедуры. На рис. 10 представлена структурная схема векторизованного итерационного цикла, исполняемого внутри основного цикла расчетного модуля.

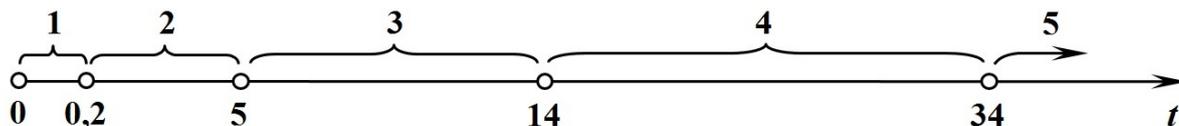


Рис. 7. Разбиение области определения функции Дебая

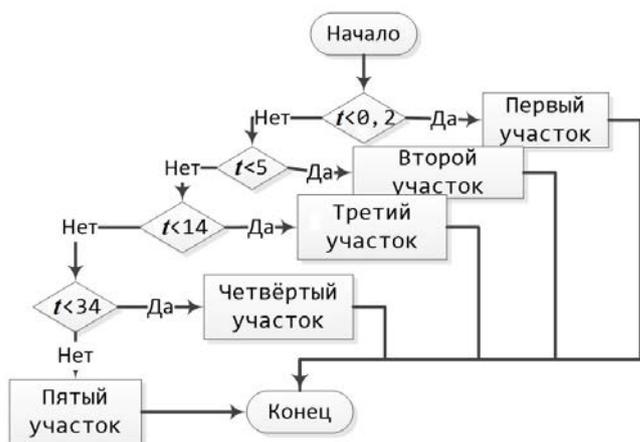


Рис. 8. Структурная схема не векторизованной программы аппроксимации функции Дебая

В рамках выполнения основного цикла по точкам с шагом N_v происходит заполнение локальных массивов исходной информацией. С их использованием производятся вычисления, необходимые для расчета начального приближения для порции точек размером N_v , рассчитывается первоначальное значение массива-маски.

На каждом шаге цикла с использованием массива-маски выполняется проверка выполнения условий выхода: сходимости итераций для всех точек порции размером N_v (стрелка с номером 1 на рис. 10) или достижения максимального числа итераций (стрелка с номером 2 на рис. 10). Далее внутри цикла для элементов, итерации для которых не сошлись, вычисляется новое приближение и пересчитывается массив-маска. На этом текущий шаг цикла заканчивается и выполняется переход на следующий шаг.

По окончании итерационного цикла с использованием найденного решения проводятся остальные вычисления и копирование результатов вычислений из локальных массивов в массивы ПП.

Как правило, число итераций, необходимое для определения искомой величины, для разных входных данных различно, т. е. для каждого элемента массива до достижения решения надо сделать различное число итерационных шагов. Для успешной векторизации вычислений необходимо, чтобы для всех точек локального массива выполнялась однотипная последовательность операций. С этой целью в векторизованных моду-

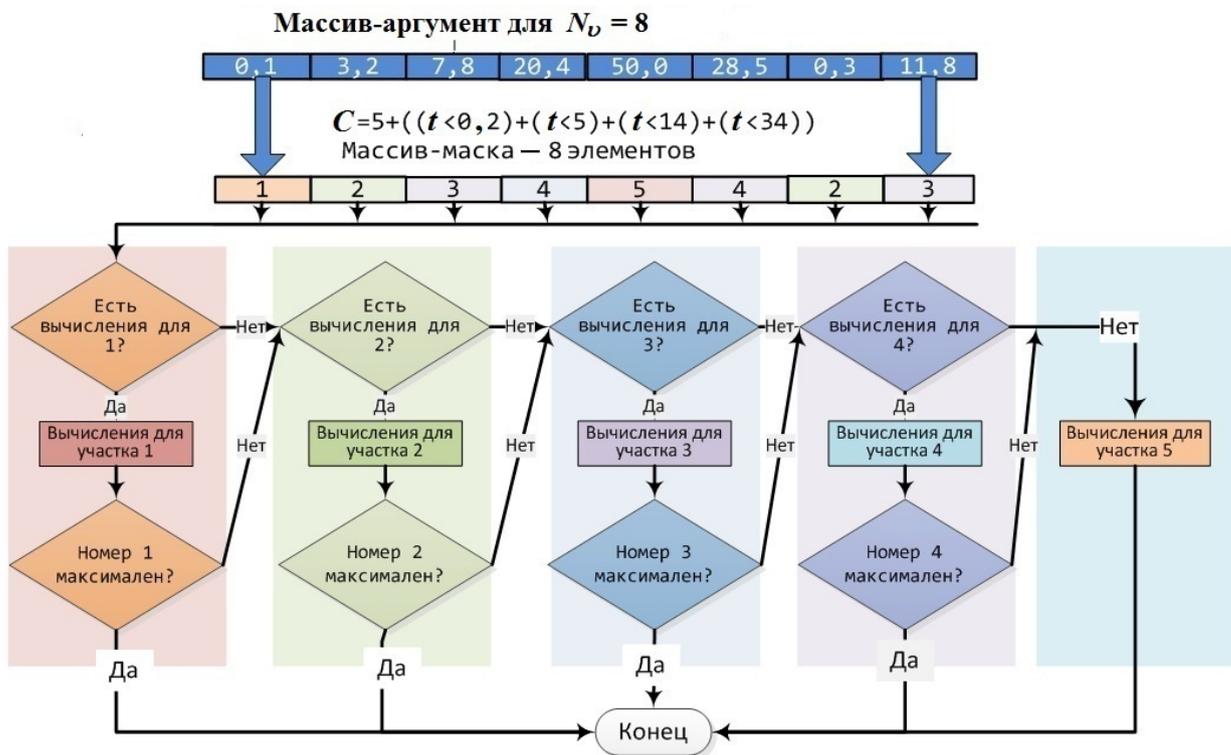


Рис. 9. Схема выполнения векторизованной программы аппроксимации функции Дебая*

* На рис. 9 принято, что выражения вида $(t < A)$ принимают значение -1 , если условие выполнено, и 0 , если условие не выполняется.

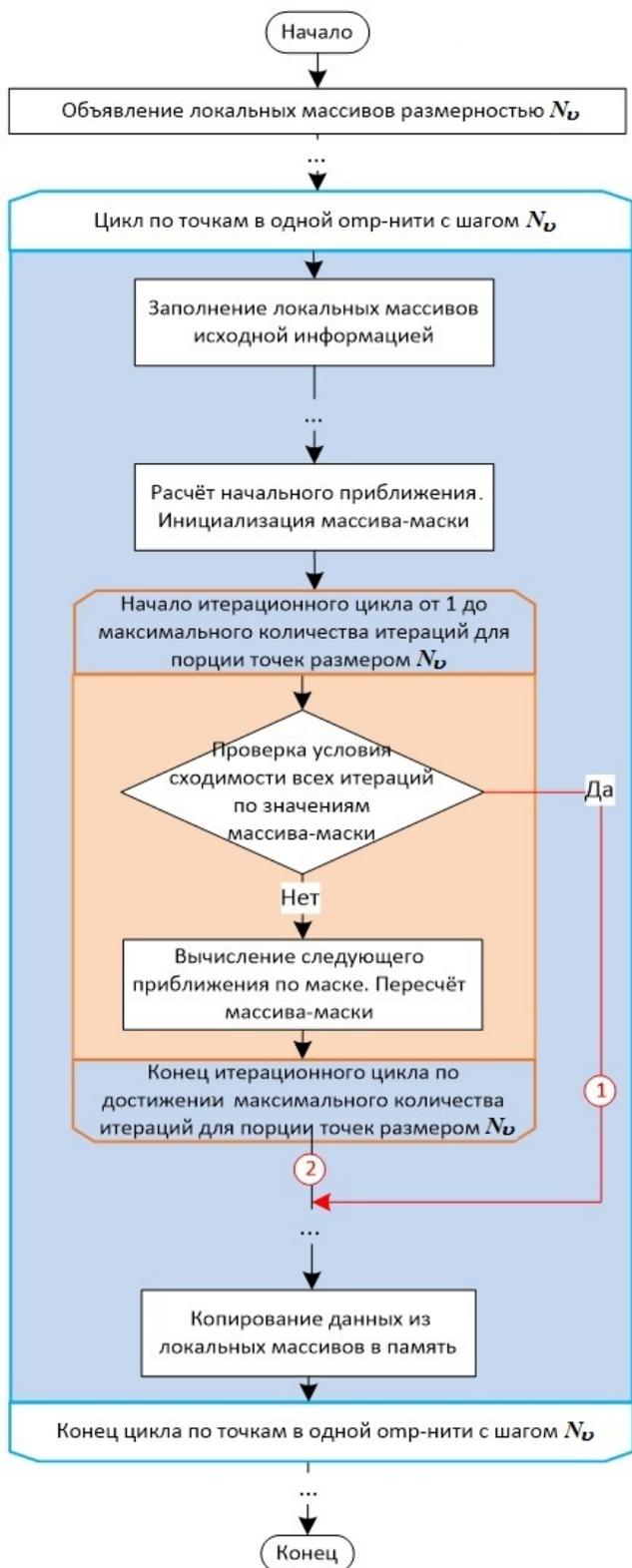


Рис. 10. Принципиальная структурная схема основного и итерационного циклов в векторизованном расчетном модуле

лях итерационные циклы выполняются для всех точек, пока итерации не сойдутся в каждой точке. Отметим, что такой подход ранее был применен при разработке версии методики Д на GPU [10].

Но если выполнить для всех точек максимальное число итераций, то результаты вычислений не совпадут с результатами расчета по версии программы без использования векторизации. Для устранения различия результатов введен специальный массив-маска (см. рис. 10), элементы которого принимают два значения: 1 — итерации не сошлись, 0 — итерации сошлись. Поправка к решению для новой итерации умножается на значения элементов массива-маски, что позволяет продолжать уточнять решение только для тех элементов, решение для которых еще не найдено. В то же время элементы с найденным решением не изменяются.

На рис. 11 для массива размером $N_v = 8$ приведен пример изменения значений массива-маски (цифры на оранжевом и синем фонах) в итерационном цикле. Номера итераций указаны в белых квадратах по вертикали. В белых квадратах по горизонтали — номера элементов массива-маски.

Общее число итераций на рис. 11 равно четырем. За одну итерацию найдены с заданной точностью значения для первого и шестого элементов, за две итерации — для третьего и пятого, за три итерации — для второго и восьмого, за четыре — для четвертого и седьмого.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	0	1	1	1	1	0	1	1
3	0	1	0	1	0	0	1	1
4	0	0	0	1	0	0	1	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0

Рис. 11. Пример изменения значений элементов массива-маски в итерационном цикле

Следует отметить, что ускорение от векторизации вычислений при такой организации итерационных процедур может быть получено, если только количество итераций для разных областей фазовой диаграммы не слишком отличается. Для расчетных модулей библиотеки УРС-ОФ выполнение этого условия в целом обеспечивается выбором начальных приближений, как можно более близких к решению.

Распараллеливание вычислений при одновременном использовании нескольких компьютерных моделей

В составе библиотеки УРС-ОФ есть компьютерные модели, реализующие вычисления свойств смесей веществ (см., например, [15]). Свойства смеси рассчитываются как функции свойств ее компонентов. Свойства каждого компонента описываются отдельной компьютерной моделью в библиотеке УРС-ОФ. Расчетные модули, реализующие модели смесей в пакете УРС-ОФ, называются СуперУРС.

Отличия в организации вычислений векторизованных расчетных модулей СуперУРС от остальных модулей библиотеки УРС-ОФ обусловлены необходимостью вызова различных векторизованных модулей компонентов смесей в логических конструкциях и итерационных циклах.

Для векторизации СуперУРС применен такой же подход, что и для обычных расчетных модулей. При вызове СуперУРС ПП обращается к одной из программ-переключателей, которые вызывают либо векторизованный модуль СуперУРС, либо его omr-ядро. Векторизованный модуль СуперУРС, в свою очередь, вызывает непосредственно векторизованные расчетные модули компонентов, а не их omr-ядра, поскольку параллельная область уже создана в omr-ядре СуперУРС.

Использование векторизованных расчетных модулей СуперУРС со значением шага цикла N_v , заданного для обычных программ, показало малое ускорение расчетов, объясняемое недозагруженностью циклов в расчетных модулях компонентов. Поэтому для моделей СуперУРС для получения ускорения от векторизации шаг цикла подобран исходя из условий кратности ширине машинного регистра и достаточной загрузки циклов в расчетных модулях компонентов СуперУРС. Например, при $N_v = 8$ для СуперУРС оптимальным является $N_{vSuper} = 32$.

Описание процедуры и результатов тестирования векторизованных расчетных модулей

Для верификации расчетов по векторным счетным модулям разработана и программно реализована процедура расчета теплофизических функций на специализированных верификационных сетках контрольных точек с последующим сравнением всех результатов расчетов по соответствующим векторизованным и не векторизованным программам. Расхождения в результатах расчетов записываются в специальный файл-отчет для их анализа и устранения разработчиками расчетных модулей. Процедура тестирования автоматизирована с использованием кроссплатформенной утилиты CMake [16].

Для обеспечения надежности расчета с использованием программ тестирования и средств компилятора проведены проверки отсутствия ситуаций деления на ноль и переполнений, отсутствия гонки данных (data race) и нарушений распараллеливания (deadlocks) на общей памяти.

Для оценки коэффициентов ускорения и эффективности распараллеливания вычислений на общей памяти с использованием стандарта OpenMP разработана и программно реализована процедура расчета теплофизических функций на специализированных расчетных сетках контрольных точек с получением оценок временных затрат на вычисления. На гибридном узле кластера ООО "Центр компетенций и обучения" [17], содержащем сегмент с пятью узлами, каждый из которых содержит 2 CPU Intel Xeon E5-2680v2 + 2 Intel Xeon Phi Coprocessor 7120P, на примере моделей УРС идеального газа [18], ОСА [19] и РОСА-МИ [20], отличающихся сложностью вычислений, было проведено сравнительное тестирование не векторизованных и векторизованных расчетных модулей разработанных программ.

На одном ядре вычислителей были получены коэффициенты ускорения $Sp_{opt} = t_{nvec}/t_{vec}$, где t_{nvec} и t_{vec} — время вычислений на массиве точек не векторизованного и векторизованного расчетного модуля. Результаты расчетов коэффициентов ускорения Sp_{opt} для входных переменных *плотность*, *температура* приведены в таблице. Для УРС РОСА-МИ [20] дополнительно в скобках приведены значения Sp_{opt} для входных переменных *плотность*, *удельная внутренняя энер-*

Результаты расчетов Sp_{opt} для входных переменных *плотность, температура*

УРС	Вычислитель	
	Intel Xeon E5-2680v2	Intel Xeon Phi 7120P
Идеальный газ [18]	4,0	7,3
ОСА [19]	2,8	4,3
РОСА-МИ [20]	3,6 (3,0)	7,0 (6,1)

гия, при которых температура находится итерационным методом Ньютона.

По результатам тестирования при расчете на вычислителе Intel Xeon E5-2680v2 с шириной векторного регистра, равной четырем числам двойной точности, получено сокращение времени от 2,8 до 4 раз; при расчете на вычислителе Intel Xeon Phi 7120P с шириной векторного регистра, равной восьми числам двойной точности, — сокращение времени от 4 до 7 раз по сравнению с не векторизованной версией в зависимости от сложности компьютерных моделей. При этом на обоих вычислителях размеры локальных массивов и шаг счетного цикла N_v задавались равными восьми.

На рис. 12 приведены характерные зависимости коэффициента ускорения Sp_{opt} на одном ядре

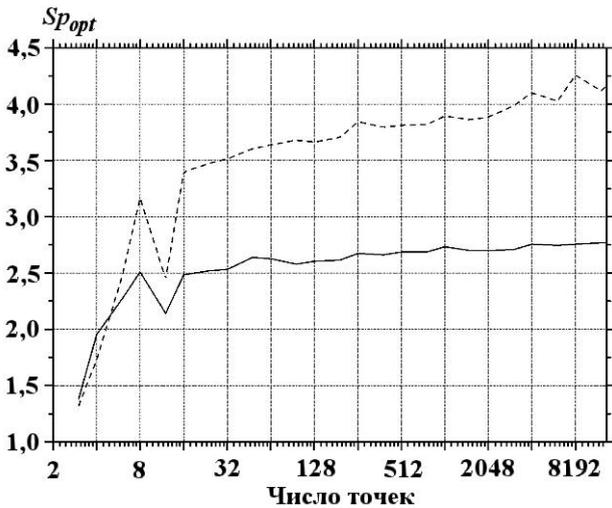


Рис. 12. Зависимости коэффициента ускорения Sp_{opt} на одном ядре вычислителя от количества элементов в массиве исходных данных при $N_v = 8$: — — Intel Xeon E5-2680v2; - - - — Intel Xeon Phi 7120P

ре вычислителя от количества элементов в массиве исходных данных для УРС ОСА [19].

Отметим, что при оптимальном числе точек использование программ группировки и разгруппировки данных снижает показатели ускорения от векторизации на 10–40 % в зависимости от времени работы расчетных модулей.

На рис. 13 приведена характерная зависимость эффективности распараллеливания от числа омп-нитей. С увеличением числа нитей эффективность распараллеливания снижается до 70 %.

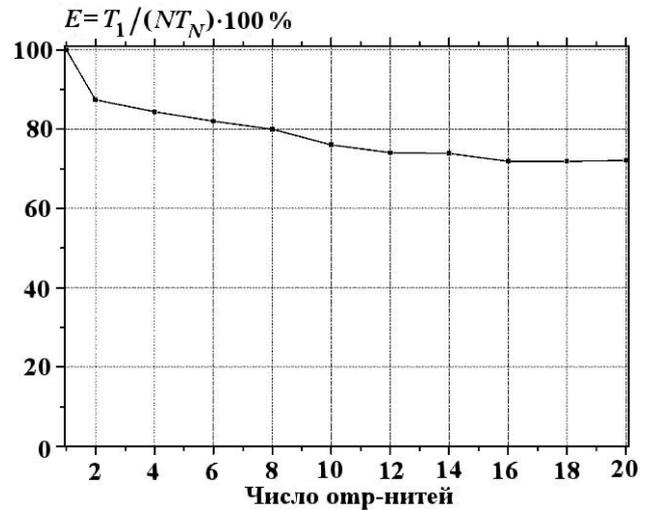


Рис. 13. Характерная зависимость эффективности распараллеливания от числа омп-нитей N (T_1 — время работы одной нити; T_N — время работы N нитей)

Заклучение

Для адаптации к вычислительным системам с SIMD-архитектурой вычислителей разработан подход к организации параллельных векторизованных вычислений с использованием автовекторизации и стандарта OpenMP в программах библиотеки УРС-ОФ, предназначенной для расчета свойств веществ в составе ПП. Подход включает в себя способ адаптации расчетных модулей к параллельным и векторизованным вычислениям свойств веществ на массивах исходных данных, организацию структур данных, правила взаимодействия библиотеки с ПП. Расчетные модули, разработанные с использованием предложенного подхода, введены в состав библиотеки УРС-ОФ.

Список литературы

1. Гордеев Д. Г., Голубкова Е. Ф., Гударенко Л. Ф., Куделькин В. Г., Сапронова О. В. Современное состояние пакета программ УРС-ОФ для расчета термодинамических и механических свойств веществ // XII Межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование": сб. науч. тр. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2010. С. 115–118.
Gordeev D. G., Golubkova E. F., Gudarenko L. F., Kudelkin V. G., Sapronova O. V. Sovremennoe sostoyanie paketa programm URS-OF dlya raschyeta termodinamicheskikh i mekhanicheskikh svoystv veshchestv // XII Mezhd. konf. "Supervychisleniya i matematicheskoe modelirovanie ": sb. nauch. tr. Sarov: RFYaTs-VNIEEF, 2010. S. 115–118.
2. Компьютерные модели в процессах разработки, производства и эксплуатации изделий. ГОСТ Р 57412-2017.
Kompyuternye modeli v protsessakh razrabotki, proizvodstva i ekspluatatsii izdeliy. GOST R 57412-2017.
3. Забелина Т. В., Леонова Н. И., Сураева З. В., Тимонькина А. В. Организация программ уравнений состояния в одномерном комплексе // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1979. Вып. 4(6). С. 13–15.
Zabelina T. V., Leonova N. I., Suraeva Z. V., Timonkina A. V. Organizatsiya programm uravneniy sostoyaniya v odnomernom komplekse // Voprosy atomnoy nauli i tekhniki. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1979. Vyp. 4(6). S. 13–15.
4. Софронов И. Д. Пакет программ для решения одномерных задач математической физики "Одномерный комплекс" // Там же. 1978. Вып 1(1). С. 3–6.
Sofronov I. D. Paket programm dlya resheniya odnomernykh zadach matematicheskoy fiziki "Odnomernyy kompleks " // Tam zhe. 1978. Vyp 1(1). S. 3–6.
5. Воронов Е. Г., Каплунов М. И., Подвальный В. Г., Ребров С. В., Филатов В. И. Сервисная система одномерного комплекса // Там же. Вып. 2(2). С. 3–12.
Voronov E. G., Kaplunov M. I., Podvalnyy V. G., Rebrov S. V., Filatov V. I. Servisnaya sistema odnomernogo kompleksa // Tam zhe. Vyp. 2(2). S. 3–12.
6. Леонова Н. И., Софронов И. Д., Сураева З. В., Тимонькина А. В. Пакет программ расчета термодинамических функций уравнений состояния УРС-ЕС-ОК // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. Вып. 2(13). С. 3–8.
Leonova N. I., Sofronov I. D., Suraeva Z. V., Timonkina A. V. Paket programm raschyeta termodinamicheskikh funktsiy uravneniy sostoyaniya URS-ES-OK // Voprosy atomnoy nauli i tekhniki. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1983. Vyp. 2(13). S. 3–8.
7. Воронов Г. И., Каплунов М. И., Кленова В. И., Легоньков В. И., Леонова Н. И., Мурашкина В. А., Сапожников А. Т., Соколов В. П., Сураева З. В. Единая унифицированная система расчета термодинамических функций уравнений состояний // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 1. С. 44–47.
Voronov G. I., Kaplunov M. I., Klyenova V. I., Legonkov V. I., Leonova N. I., Murashkina V. A., Sapozhnikov A. T., Sokolov V. P., Suraeva Z. V. Edinaya unifitsirovannaya sistema raschyeta termodinamicheskikh funktsiy uravneniy sostoyaniya // Tam zhe. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1993. Vyp. 1. S. 44–47.
8. Гударенко Л. Ф., Елисеев Г. М., Жеребцов В. А., Леонова Н. И., Сураева З. В., Тимонькина А. В. Обеспечение уравнениями состояния программ математического отделения ВНИИЭФ // Химическая физика. 1995. Т. 14, № 1. С. 40–46.
Gudarenko L. F., Eliseev G. M., Zherebtsov V. A., Leonova N. I., Suraeva Z. V., Timonkina A. V. Obespechenie uravneniyami sostoyaniya programm matematicheskogo otdeleniya VNIEEF // Khimicheskaya fizika. 1995. T. 14, № 1. S. 40–46.
9. Воронов Г. И., Горев И. В., Леонова Н. И., Осенкова Г. С., Сураева З. В. Программное обеспечение функционирования пакета

- УРС-ОФ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 3. С. 56–58.
- Voronov G. I., Gorev I. V., Leonova N. I., Osenkova G. S., Suraeva Z. V. Программное обеспечение функционирования пакета URS-OF // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 3. С. 56–58.
10. Быков А. Н., Гордеев Д. Г., Куделькин В. Г., Сизов Е. А., Куликова М. В., Чупраков Е. Е. Организация взаимодействия прикладных программ и библиотеки УРС-ОФ расчета теплофизических свойств веществ на ЭВМ с арифметическими ускорителями // XIV Межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование": сб. науч. тр. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 120–128. Bykov A. N., Gordeev D. G., Kudelkin V. G., Sizov E. A., Kulikova M. V., Chuprakov E. E. Organizatsiya vzaimodeystviya prikladnykh programm i biblioteki URS-OF raschyeta teplofizicheskikh svoystv veshchestv na EVM s arifmeticheskimi uskoritelyami // XIV Mezhd. konf. "Supervychisleniya i matematicheskoe modelirovanie": sb. nauch. tr. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2012. S. 120–128.
 11. Гордеев Д. Г., Фёдоров А. А., Быков А. Н., Сизов Е. А., Куделькин В. Г., Жильникова Н. Н. Адаптация комплекса программ RAMZES-KP для решения задач газовой динамики и теплопроводности на гибридных параллельных ЭВМ // XV Межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование": сб. науч. тр. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015. С. 169–175. Gordeev D. G., Fyedorov A. A., Bykov A. N., Sizov E. A., Kudelkin V. G., Zhilnikova N. N. Adaptatsiya kompleksa programm RAMZES-KP dlya resheniya zadach gazovoy dinamiki i teploprovodnosti na gibridnykh parallelnykh EVM // XV Mezhd. konf. "Supervychisleniya i matematicheskoe modelirovanie": sb. nauch. tr. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2015. S. 169–175.
 12. Быков А. Н., Гордеев Д. Г., Куделькин В. Г., Сизов Е. А., Фёдоров А. А. Методика RAMZES-KP на гибридных параллельных ЭВМ с графическими ускорителями // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2017. Вып. 3. С. 70–76. Bykov A. N., Gordeev D. G., Kudelkin V. G., Sizov E. A., Fyedorov A. A. Metodika RAMZES-KP na gibridnykh parallelnykh EVM s graficheskimi uskoritelyami // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2017. Vyp. 3. S. 70–76.
 13. OpenMP Specification. <http://openmp.org/wp/openmp-specification>.
 14. Гордеев Д. Г., Ломайкин А. И. Аппроксимация функции Дебая $D_3(x)$ в области $0 \leq x < \infty$ функцией класса C^2 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 1. С. 42–50. Gordeev D. G., Lomaykin A. I. Approksimatsiya funktsii Debaya $D_3(x)$ v oblasti $0 \leq x < \infty$ funktsiy klassa C^2 // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2008. Vyp. 1. S. 42–50.
 15. Гударенко Л. Ф., Куделькин В. Г. Расчет уравнения состояния многокомпонентных смесей в гетерогенном приближении // Тр. XIV сессии Межд. школы по моделям механики сплошной среды (г. Жуковский, 17–24 августа 1997 г.). М.: МФТИ, 1998. С. 56–60. Gudarenko L. F., Kudelkin V. G. Raschet uravneniya sostoyaniya mnogokomponentnykh smesey v geterogennom priblizhenii // Tr. XIV sessii Mezhd. shkoly po modelyam mekhaniki sploshnoy sredy (g. Zhukovskiy, 17–24 avgusta 1997 g.). M.: MFTI, 1998. S. 56–60.
 16. Martin K., Hoffman B. Mastering CMake. USA: Kitware Inc., 2013.
 17. ООО ЦКО. <https://compcenter.org/>. ООО "TsKO". <https://compcenter.org/>.
 18. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. Zeldovich Ya. B., Rayzer Yu. P. Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy. M.: Nauka, 1966.

19. Глушак Б. Л., Гударенко Л. Ф., Стяжкин Ю. М., Жеребцов В. А. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов с переменной электронной теплоемкостью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 1. С. 32–37.
Glushak B. L., Gudarenko L. F., Styazhkin Yu. M., Zherebtsov V. A. Poluempiricheskoe uravnenie sostoyaniya metallov s peremennoy elektronnoy teployemkostyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1991. Vyp. 1. S. 32–37.
20. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Каякин А. А., Куделькин В. Г. Модель урав-

нения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Уравнения состояния Ta, W, Al, Be // ФГВ. 2013. № 1. С. 106–120.

Gordeev D. G., Gudarenko L. F., Kayakin A. A., Kudelkin V. G. Model uravneniya sostoyaniya metallov s effektivnym uchyetom ionizatsii. Uravneniya sostoyaniya Ta, W, Al, Be // FGV. 2013. № 1. S. 106–120.

Статья поступила в редакцию 24.08.21.

УДК 536.2+539.3

МЕТОД ПЕРЕСЧЕТА ТРЕХМЕРНОГО ПОЛЯ ТЕМПЕРАТУР ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРОЧНОСТИ

В. И. Романов, Е. Е. Маслов, С. Ю. Гулаков
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Часто при проведении расчетных исследований прочности возникает необходимость учитывать неравномерные тепловые поля, в условиях которых происходит деформирование. Целью работы является описание метода передачи информации о пространственном распределении температуры в расчетную прочностную модель конструкции. На языке программирования Python реализована процедура интерполирования температуры в узлы конечно-элементной сетки для решения задач прочности по известным значениям температуры в точках упорядоченного множества, являющихся, например, узлами или центрами ячеек сетки для решения тепловой задачи. Процедура основывается на решении задачи о поиске нескольких ближайших соседей. Для осуществления эффективного поиска информация о точках-узлах интерполирования представлена в виде октодеревя. В произвольной пространственной точке неизвестное значение температуры восстанавливается по известным значениям в точках-соседах с помощью пространственной линейной интерполяции, основанной на использовании метода наименьших квадратов.

Приводятся результаты тестирования описываемого метода на модельной задаче. Показана высокая точность интерполирования. Описанный метод успешно применяется авторами для учета теплового состояния транспортных упаковочных комплектов, предназначенных для перевозки и хранения отработавшего ядерного топлива, при обосновании их безопасности. Намечены направления дальнейшего развития метода.

Ключевые слова: множество точек, задача о поиске ближайшего соседа, октодерево, интерполяция, метод наименьших квадратов.

Введение

В связи с постоянным развитием вычислительной техники и программных комплексов все чаще в расчетной практике используются большие сложные модели, которые без особых упрощений учитывают мелкие детали конструкций и нюансы описываемых процессов. Минимизация упрощений позволяет уйти от излишнего консерватизма, закладываемого при расчетном обосновании безопасности изделий, что, в конечном итоге, приводит к уменьшению материалоемкости и стоимости конструкций, повышению удобства обращения.

При расчетном обосновании безопасности контейнеров для перевозки отработавшего ядерного топлива одним из шагов к снижению консерватизма является учет трехмерного распределения температур в прочностной задаче и соответ-

ствующее изменение механических свойств материалов. Также учет теплового поля позволяет проследить эволюцию зазоров при температурном расширении элементов конструкции и точно определить их контактирующие поверхности в разогретом состоянии, что может повлиять на пространственное распределение температуры и снизить консерватизм уже в тепловой задаче.

Поле температур определяется по результатам исследований теплового состояния конструкции и представляет собой таблицу с координатами точек и соответствующими им значениями температур. Для тепловой и прочностной задач счетные сетки, покрывающие одну и ту же конструкцию, не совпадают, так как основываются на ячейках разной топологии. Ячейки *тепловой сетки* являются произвольными многогранниками. В *прочностной сетке* могут исполь-

зоваться четырех-, шести-, восьмиузловые объемные конечные элементы (гексаэдры, пентаэдры и тетраэдры) и трех-, четырех-, восьмиузловые — оболочечные. Сетка для тепловой задачи является более подробной по сравнению с прочностной. В настоящее время тепловое состояние контейнеров может исследоваться на сетке, состоящей из нескольких десятков миллионов ячеек. Прочностная сетка для той же конструкции обладает на порядок меньшим числом конечных элементов — несколько миллионов — из-за более сложной системы решаемых дифференциальных уравнений, большего числа неизвестных. Поэтому возникает необходимость создания метода, который позволяет без упрощений пересчитать трехмерное температурное поле, полученное на тепловой сетке, на сетку для решения прочностных задач. Инструментом для реализации такого метода авторами выбран свободно распространяемый язык программирования Python.

Суть метода заключается в следующем. В первую очередь необходимо убедиться, что тепловая и прочностная сетки совмещены в пространстве. Затем для каждого узла конечно-элементной прочностной сетки определяется ближайшая точка (или ближайший набор точек) тепловой сетки. Для *прочностной точки* значение температуры устанавливается то же, что в найденной ближайшей *тепловой точке*, или находится интерполяцией по значениям для найденного набора ближайших тепловых точек. Таким образом, задача о пересчете поля температур сводится к задаче о нахождении ближайших соседей и к трехмерной интерполяции по найденному набору точек.

Постановка задачи и подход к ее решению

Пусть в трехмерном пространстве имеется упорядоченное множество точек Q , для которых известны значения температуры. Необходимо получить неизвестное значение температуры в произвольной точке \mathbf{p} , являющейся, например, узлом конечно-элементной сетки для решения задачи прочности. Для этого необходимо определить для точки \mathbf{p} ближайшую точку из множества точек Q или набор из нескольких ближайших точек.

Самым простейшим способом нахождения ближайших соседей является метод прямого поиска. Согласно этому методу для точки \mathbf{p} следует вычислить расстояние до всех точек \mathbf{q}_i и вы-

брать из них такую, для которой оно минимально. В случае, когда количество точек во множестве Q составляет несколько десятков миллионов и подобный поисковый запрос необходимо выполнить миллионы раз, время выполнения данной процедуры становится несоизмеримым со сроками выполнения расчетных исследований. Поэтому целесообразно расположить информацию о точках множества Q в соответствии с некоторой структурой данных, облегчающей поиск. Такие структуры позволяют не рассматривать в качестве ближайших соседей заведомо далекие точки.

Существует несколько видов подобных структур данных, таких как Z -кривые, kd -деревья или двоичные деревья поиска, R -деревья, деревья покрытий [1–4]. В настоящей статье описывается способ поиска, основанный на использовании октодеревя, каждый внутренний узел которого имеет ровно восемь потомков.

Структура октодеревя

Узел дерева содержит информацию о некоторой пространственной области в форме прямоугольного параллелепипеда (*кодирует* эту область). В данном случае это минимальные и максимальные координаты вершин параллелепипеда или минимальные координаты вершин и длина ребра, если это куб. С точки зрения экономии оперативной памяти, кубические области предпочтительнее: тогда вместо шести чисел можно хранить только четыре. Далее будет рассматриваться именно этот случай.

Узел хранит признак того, является он крайним или нет. Крайним узлом, или листом, называется узел дерева, не имеющий потомков. Признаком того, что узел дерева является листом, служит номер точки из множества Q , находящейся внутри кодируемого им куба. Узел-лист кодирует куб, в котором находится только одна точка множества Q . В случае, если узел не является листом, значение признака полагается равным -1 .

Каждый куб, закодированный узлом дерева, делится на восемь частей плоскостями, проходящими через его центр и параллельными его граням. Порядок нумерации октантов куба для всех узлов дерева принимается единым. Полученные восемь октантов кодируются дочерними узлами, принадлежащими следующему, большему уровню дерева. Поэтому в узле должен храниться

список из восьми номеров его дочерних узлов. Если в списке дочерних узлов вместо положительного номера указывается -1 , это означает, что в соответствующем октанте не содержится ни одной точки множества Q , он пуст и потомков в этом направлении нет.

Пример октодеревя, опирающегося на множество из четырех точек, представлен на рис. 1.

Создание дерева

Создание октодеревя начинается с корневого узла. В качестве кодируемого им куба определяется габаритный куб, охватывающий все множество пространственных точек Q .

Развитие дерева происходит в результате "заселения" точек q_i множества Q в кубы, кодируемые узлами дерева. В габаритный куб, кодируемый корневым узлом, заселяется точка q_1 , и корневой узел становится листом.

Заселение следующих точек из множества Q в кубы, кодируемые узлами дерева, выполняется в соответствии со следующей рекурсивной процедурой.

Если узел дерева является листом, то его куб делится на восемь октантов и точка, уже находящаяся в кубе текущего узла, вытесняется в новый узел с уровнем на единицу больше. Для текущего узла устанавливается признак, что он не является листом, и обновляется список его дочерних узлов. Процедура заселения точки в текущий узел повторяется.

Если узел дерева — не лист, то определяется дочерний узел, в куб которого попадает заселяемая точка. Если такой узел существует, то производится попытка заселить точку в куб этого дочернего узла. Если узла не существует, то строится новый узел дерева на этом же уровне для нового куба, содержащего заселяемую точку.

При заселении новой точки в куб узла-листа можно анализировать расстояние до уже имеющейся там точки и значения температуры. Если различия в расстоянии и температуре небольшие, то можно новую точку не заселять. Тем самым экономится оперативная память, уменьшается количество уровней дерева.

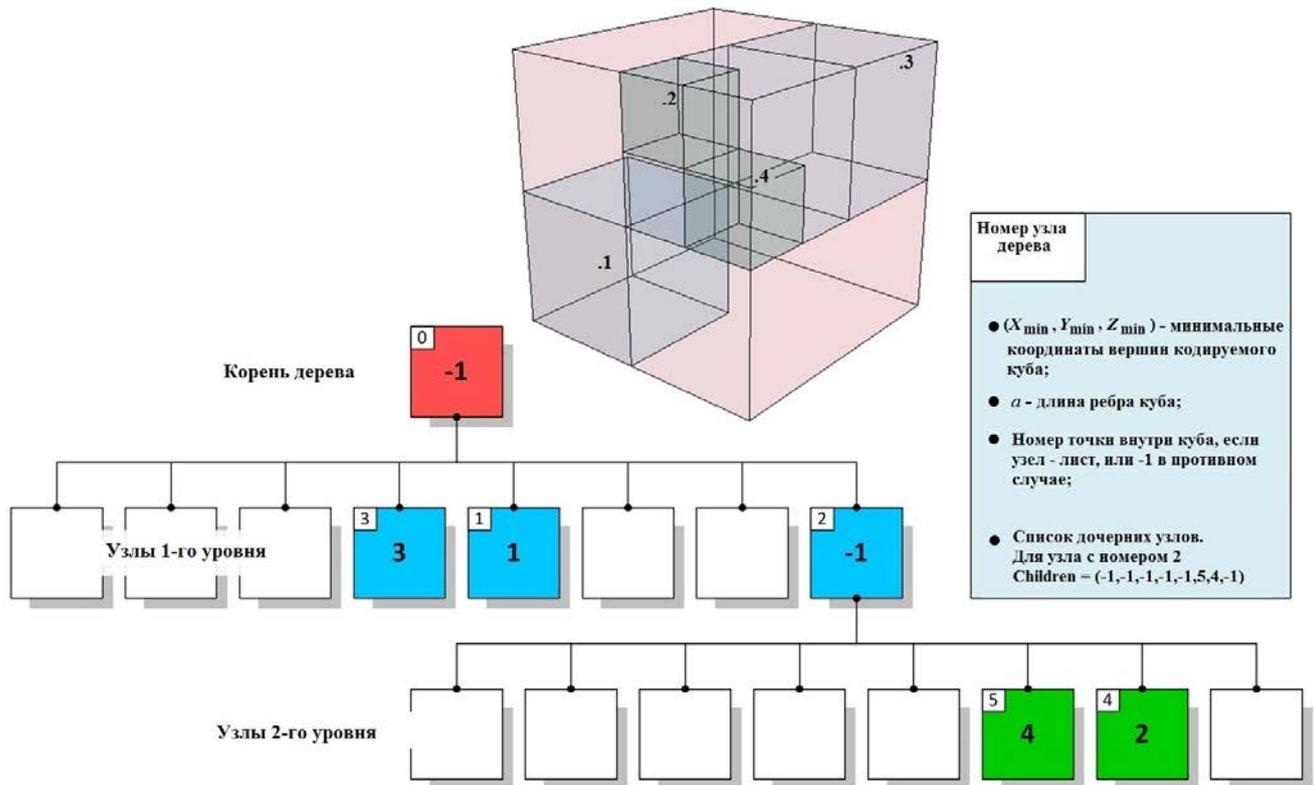


Рис. 1. Пример октодеревя и данные, хранимые в узле

Процедура поиска ближайшего соседа

При нахождении ближайшего соседа для произвольной точки \mathbf{p} в первую очередь необходимо пройти по дереву, чтобы определить узел максимального уровня, в куб которого она попадает. Этот узел совсем необязательно будет листом. В таком случае составляется список точек множества Q , попадающих внутрь куба, кодируемого этим узлом. Методом прямого поиска из этого списка определяется точка, ближайшая к \mathbf{p} . Так как тепловая и прочностная сетки совмещены в пространстве, то, как правило, список получается короткий и прямой поиск выполняется довольно быстро.

Найденная точка является только кандидатом на звание ближайшей, расстояние от точки \mathbf{p} до точки-кандидата объявляется радиусом поиска. Необходимо еще раз пройти по дереву, начиная от корневого узла и рассматривая те узлы, для которых расстояние от кодируемого куба до точки \mathbf{p} меньше радиуса поиска.

Расстояние между кубом и точкой определяется следующим образом. Если точка находится внутри куба, то расстояние нулевое. В противном случае вычисляется расстояние от точки до ближайшей грани куба.

Если расстояние от точки \mathbf{p} до точки \mathbf{q} из текущего рассматриваемого листа дерева меньше радиуса поиска, то точка \mathbf{q} принимается ближайшей, а значение радиуса поиска обновляется. В результате второго обхода дерева определяется ближайший сосед.

Для поиска нескольких ближайших соседей можно модифицировать описываемую процедуру путем исключения ранее найденных ближайших точек из рассмотрения.

Интерполяция

Для вычисления значения поля в новой точке по известным значениям в нескольких соседних точках авторами используется метод наименьших квадратов [5].

Пусть для точки \mathbf{p} определен набор ближайших точек из множества Q . В окрестности точки \mathbf{p} зависимость поля от координат можно представить в виде разложения в ряд Тейлора и заменить суммой первых двух членов ряда:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{p}) + (\mathbf{x} - \mathbf{p}) \cdot \nabla f(\mathbf{p}).$$

Будет удобно ввести локальную систему координат с началом в точке \mathbf{p} , для которой нужно вос-

становить неизвестное значение поля. Тогда в новой системе координат для i -й точки из набора соседей формулу можно записать как

$$f_i \approx f + x_i \nabla f_x + y_i \nabla f_y + z_i \nabla f_z,$$

где f_i — известное значение температуры в точке \mathbf{q}_i с координатами x_i, y_i, z_i в новой локальной системе координат с началом в точке \mathbf{p} ; f — неизвестное значение температуры в точке \mathbf{p} , которое нужно восстановить; $\nabla f_x, \nabla f_y, \nabla f_z$ — неизвестные значения координат вектора градиента поля.

Неизвестные значения температуры и компонент градиента определяются из условия, что для всего набора соседей сумма квадратов невязок должна принять минимальное значение:

$$\sum_{i=1}^n (f_i - f - x_i \nabla f_x - y_i \nabla f_y - z_i \nabla f_z)^2 \xrightarrow{f, \nabla f} \min$$

(n — количество точек-соседей). Минимизация приведенного функционала сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ с матрицей

$$A = \begin{pmatrix} n & \sum_i x_i & \sum_i y_i & \sum_i z_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i x_i & \sum_i x_i y_i & \sum_i x_i z_i \\ \sum_i y_i & \sum_i y_i x_i & \sum_i y_i y_i & \sum_i y_i z_i \\ \sum_i z_i & \sum_i z_i x_i & \sum_i z_i y_i & \sum_i z_i z_i \end{pmatrix},$$

вектором неизвестных переменных

$$\mathbf{x} = \left(f, \nabla f_x, \nabla f_y, \nabla f_z \right)^T$$

и вектором правой части

$$\mathbf{b} = \left(\sum_i f_i, \sum_i f_i x_i, \sum_i f_i y_i, \sum_i f_i z_i \right)^T.$$

Такой метод удобен, так как заранее неизвестно, сколько будет соседей в окрестности точки интерполирования, и точки-соседи могут располагаться хаотично, не в узлах регулярной сетки, удобной для лагранжевой интерполяции.

Вид матрицы A также "подсказывает" стратегию поиска ближайших соседей. Для решения системы необходимо, чтобы определитель матрицы отличался от нуля. Численные эксперименты показывают, что определитель такой матрицы принимает ненулевые значения в случае, если точки \mathbf{q}_i не лежат вблизи какой-либо плоскости или прямой. Поэтому искать ближайших

соседей необходимо до тех пор, пока определитель системы не примет достаточно большое значение. Набор ближайших соседей должен содержать как минимум четыре точки.

Тестирование метода

Для демонстрации применимости предлагаемого метода пересчета рассматривается распределение температуры в стенках однородной трубы. Тепловое поле в данном случае обладает осевой симметрией и не зависит от осевой и угловой координат. Зависимость температуры от радиуса является нелинейной и имеет следующий вид [6]:

$$T(r) = T_1 - \frac{T_1 - T_2}{\ln \frac{R_2}{R_1}} \ln \frac{r}{R_1}, \quad (1)$$

где $T_1 = 0$, $T_2 = 400^\circ\text{C}$ — значения температуры на внутренней и внешней поверхностях трубы соответственно; $R_1 = 300$ мм, $R_2 = 600$ мм — внутренний и внешний радиусы.

Подготовлены две сетки, покрывающие один и тот же фрагмент трубы. Первая сетка — регулярная опорная, для которой узловые значения температуры определены по формуле (1) (рис. 2). Вторая сетка — произвольная тетраэдрическая (рис. 3, а), для которой значения поля в узлах определяются с помощью интерполяции.

На рис. 3, б представлено поле температур во фрагменте трубы, получаемое не интерполированием, а переносом значений температуры в узлы произвольной сетки из ближайших узлов опорной сетки. Видно, что поле имеет неглад-

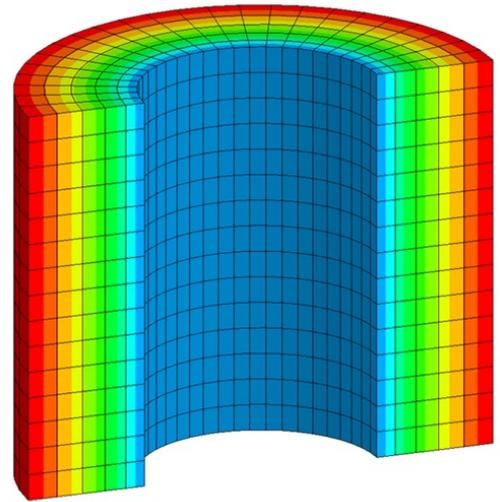


Рис. 2. Опорная сетка и тепловое поле

кий характер, заметно отличающийся от действительного. В случае использования процедуры интерполирования (рис. 3, в) распределение температуры совпадает с заданным. Анализ различий показывает, что максимальная разница между значениями, получаемыми с помощью интерполяции, и аналитическими значениями составляет 9°C , или 2,25%.

Применение

Представленный метод пересчета трехмерного поля температур успешно применяется в расчетной практике. Один из результатов применения метода показан на рис. 4. На данном рисунке для транспортного упаковочного комплекта ТУК [7], разработанного

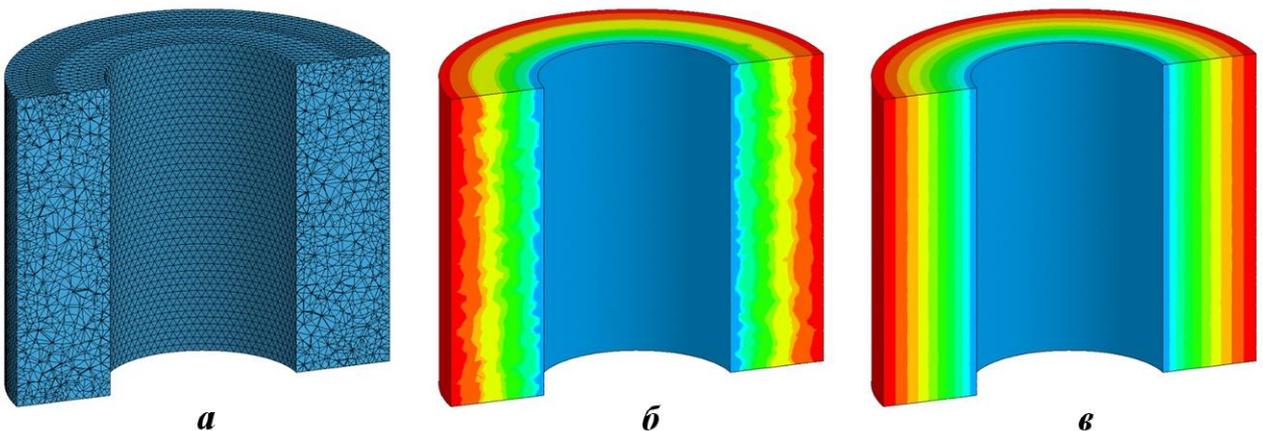


Рис. 3. Произвольная тетраэдрическая сетка (а) и поля температур, полученные переносом значений из узлов опорной сетки (б) и в результате интерполяции (в)

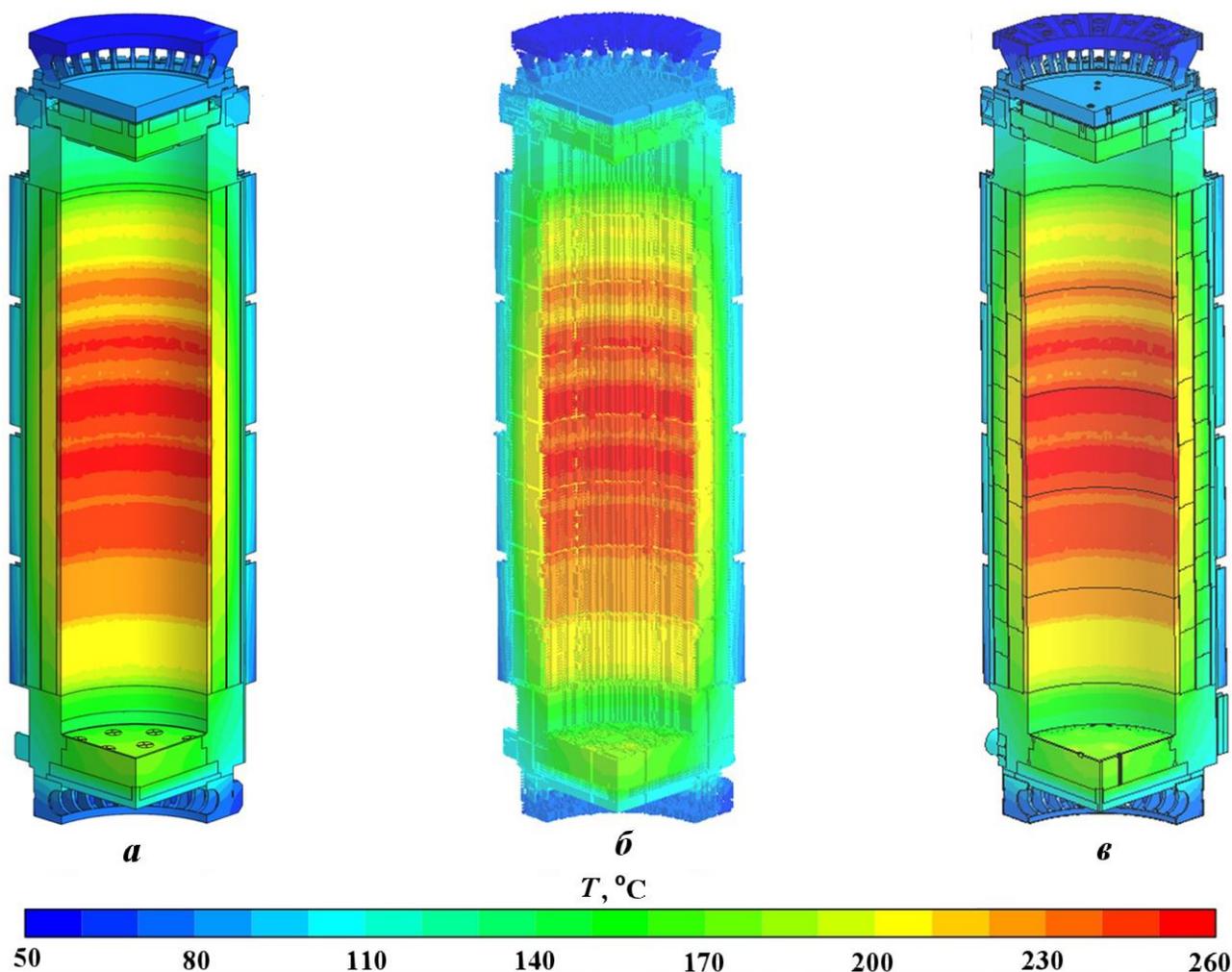


Рис. 4. Распределение температуры в расчетных моделях ТУК: *a* — для тепловых расчетов; *б* — в листьях октодерва; *в* — для прочностных расчетов

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ" и предназначенного для перевозки отработавшего ядерного топлива, показаны поля температур, полученные в результате расчетов тепловых задач и после пересчета на конечно-элементную сетку для прочностных задач. Сеточная модель контейнера для тепловых задач содержит примерно 36 млн ячеек, для прочностных — около 9 млн узлов конечно-элементной сетки. Время выполнения процедуры пересчета теплового поля составляет 1 час.

На рис. 5, 6 показаны укрупненные фрагменты сеточных моделей, из которых видно, что изолинии сгенерированного теплового поля для прочностной задачи распределены идентично их распределению для тепловой задачи.

Дальнейшее развитие метода

Тепловые и прочностные точки упорядочены в пространстве как узлы расчетных сеток. Поэтому имеется возможность получения информации о близости узлов внутри модели через кодировку конечных элементов. Возможно, использование такой дополнительной информации позволит еще больше ускорить передачу тепловых полей в прочностные задачи.

Также видится возможным ускорение процесса пересчета путем использования распараллеливания. Узлы прочностной сетки можно разделить на несколько групп, для каждой из которых запускается свой процесс интерполяции на отдельном ядре процессора.

После получения поля температур в узлах прочностной сетки, возможно, стоит приме-

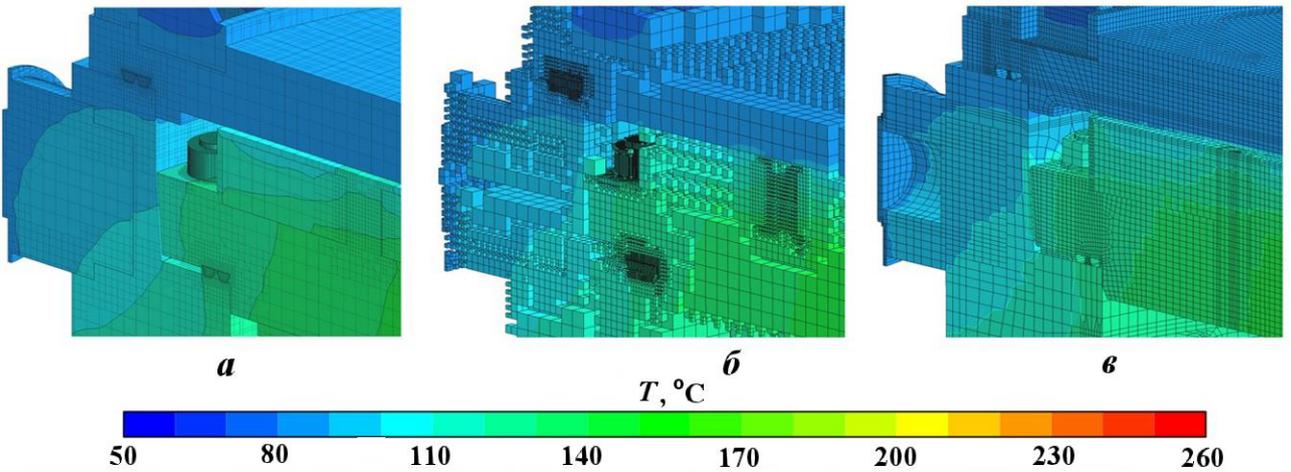


Рис. 5. Поле температур в верхней части контейнера: *a* — для тепловых расчетов; *b* — в листьях октодерва; *v* — для прочностных расчетов

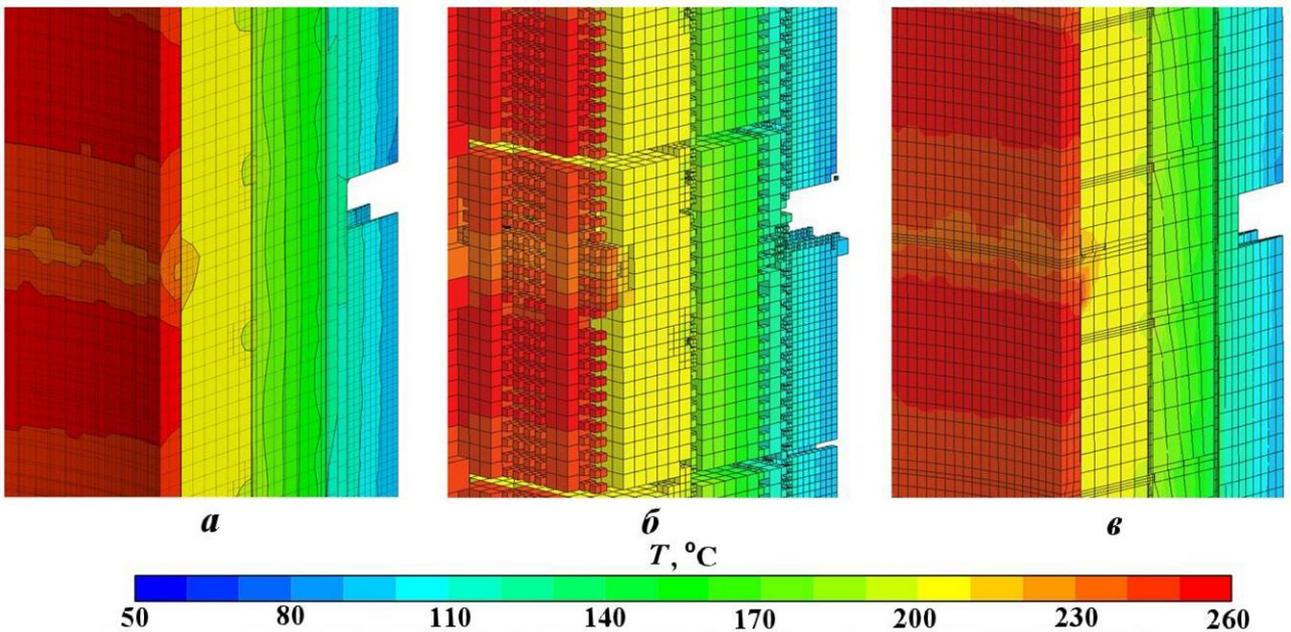


Рис. 6. Поле температур в центральной части контейнера: *a* — для тепловых расчетов; *b* — в листьях октодерва; *v* — для прочностных расчетов

нить сглаживание, например, на основе анализа градиентов температур в каждом конечном элементе.

Список литературы

1. *Препарата Ф., Шеймос М.* Вычислительная геометрия. Введение: Пер. с англ. М.: Мир, 1989.
Preparata F., Sheymos M. Vychislitel'naya geometriya. Vvedenie: Per. s angl. M.: Mir, 1989.
2. *Beygelzimer A., Kakade S., Langford J.* Cover trees for nearest neighbor. http://hunch.net/~jl/projects/cover_tree.
3. *Bentley J. L.* Multidimensional binary search trees used for associative searching // Communications of the ACM. 1975. Vol. 18. P. 509–517.
4. *Dobkin D., Lipton R. J.* Multidimensional searching problems // SIAM J. Comp. 1976. Vol. 5(2). P. 181–186.

5. *Линник Ю. В.* Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений. 2-е изд. М.: Физматгиз, 1962.
Linnik Yu. V. Metod naimenshikh kvadratov i osnovy matematiko-statisticheskoy teorii obrabotki nablyudeniya. 2-e izd. M.: Fizmatgiz, 1962.
6. *Цветков Ф. Ф., Григорьев Б. А.* Тепломассобмен: Учеб. пособие для вузов. 2-е изд., испр. и доп. М.: Изд-во МЭИ, 2005.
Tsvetkov F. F., Grigoryev B. A. Teplomassoobmen: Ucheb. zosobie dlya vuzov. 2-e izd., ispr. i dop. M.: Izd-vo MEI, 2005.
7. Патент на изобретение № 2746959 РФ, МПК G21F 5/00, G21F 5/008. Контейнер для транспортирования и хранения отработавшего ядерного топлива / Л. Н. Кожаяев, И. А. Барченков, С. В. Леонтьев, Д. Ю. Смирнов, В. И. Кечин, Е. Г. Куделькин, В. И. Романов, Ю. А. Вяткин, Е. Е. Маслов, Д. А. Варавин, А. В. Виноградов. 22.04.2021. Бюллетень № 12.
Patent na izobretenie № 2746959 RF, MPK G21F 5/00, G21F 5/008. Konteyner dlya transportirovaniya i khraneniya otrabotavshogo yadernogo topliva / L. N. Kozhayev, I. A. Barchenkov, S. V. Leontyev, D. Yu. Smirnov, V. I. Kechin, E. G. Kudelkin, V. I. Romanov, Yu. A. Vyatkin, E. E. Maslov, D. A. Varavin, A. V. Vinogradov. 22.04.2021. Byulleten № 12.

Статья поступила в редакцию 23.06.2021.



УДК 519.63

MPI+OpenMP РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ С ПРЕДОБУСЛОВЛИВАТЕЛЯМИ БЛОЧНОГО НЕПОЛНОГО ОБРАТНОГО ТРЕУГОЛЬНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ВТОРОГО И ПЕРВОГО ПОРЯДКА

О. Ю. Милюкова
(ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, г. Москва)

Рассматривается новый предобусловливатель для решения систем линейных алгебраических уравнений с симметричной положительно определенной разреженной матрицей — предобусловливатель блочного неполного обратного треугольного разложения первого порядка *по значению*. Предлагается способ применения (MPI+OpenMP)-технологии для построения и обращения предобусловливателей блочного неполного обратного треугольного разложения второго и первого порядка по значению. При применении (MPI+OpenMP)-технологии число блоков в этих предобусловливателяхратно числу используемых процессоров и числу используемых потоков. Проводится сравнение времени решения задач с использованием исходной MPI-технологии и гибридной (MPI+OpenMP)-технологии на примере модельной задачи и ряда задач из коллекции разреженных матриц SuiteSparse. Сравняется время решения этих задач методом сопряженных градиентов с предобусловливателями блочного неполного обратного треугольного разложения второго и первого порядка по значению.

Ключевые слова: разреженные матрицы, неявное блочное предобусловливание, неполное треугольное разложение Холецкого, параллельное предобусловливание, метод сопряженных градиентов.

Введение

Рассмотрим задачу приближенного решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) большого размера

$$Ax = b \tag{1}$$

с симметричной положительно определенной разреженной матрицей общего вида

$$A = A^T > 0.$$

Проблема построения эффективных численных методов решения СЛАУ (1) сохраняет свою актуальность, так как во многих важных прикладных областях продолжают возникать новые постановки таких задач. При этом наблюдается тенденция к росту размера матриц n , увеличению их заполненности ненулевыми элементами, а также ухудшению обусловленности.

В настоящей работе для решения СЛАУ (1) большого размера применяется предобусловленный метод сопряженных градиентов (CG), итерации которого осуществляются до выполнения условия

$$\|b - Ax_k\| \leq \varepsilon \|b - Ax_0\|, \text{ где } 0 < \varepsilon \ll 1. \tag{2}$$

Для предобусловливания используется блочное неполное обратное разложение Холецкого ВПС (Block Incomplete Inverse Cholesky) [1, 2] в сочетании с приближенным стабилизированным треугольным разложением второго порядка *по значению* IC2S (τ) ($0 < \tau \ll 1$) [3] — предобусловливание ВПС-IC2S (τ) [4]. В работе также используется новое предобусловливание — ВПС в сочетании с

приближенным треугольным разложением с отсечением по параметру $0 < \tau \ll 1$ первого порядка IC1 (τ) (см., например, [5]) — предобусловливание ВПС-IC1 (τ) [6]. Предобусловливание IC1 (τ) имеет ограниченную область применимости [7]. Предобусловливание ВПС-IC1 (τ) будем также называть блочным неполным обратным треугольным разложением первого порядка, а предобусловливание ВПС-IC2S (τ) — блочным неполным обратным треугольным разложением второго порядка.

В работе [8] в качестве предобусловливателя предложена и исследована блочная версия неполного обратного разложения Холецкого ВПС в сочетании с приближенным треугольным разложением второго порядка по значению IC2 (τ) [3] — ВПС-IC2 (τ). В ВПС-IC2S (τ) [4], в отличие от ВПС-IC2 (τ), для построения предобусловливателя внутри блока используется IC2S (τ)-разложение. Методы сопряженных градиентов с предобусловливателями ВПС-IC2 (τ) и ВПС-IC2S (τ) были эффективно реализованы на параллельных архитектурах с распределенной памятью [8, 4].

В настоящей работе основное внимание уделяется применению OpenMP-технологии для параллельной реализации алгоритмов метода сопряженных градиентов с предобусловливателями ВПС-IC2S (τ), ВПС-IC1 (τ) при проведении расчетов на многопроцессорной вычислительной системе. Далее параметр τ в названиях этих предобусловливателей может быть опущен.

Проблеме использования высокоуровневого параллелизма (мелкозернистое или распараллеливание алгоритма на потоки) при построении и обращении неявного факторизованного предобусловливателя посвящен ряд работ. Неявный факторизованный предобусловливатель имеет вид $B = LL^T \approx A^{-1}$ или $B = LDL^T \approx A^{-1}$, где L — нижнетреугольная матрица, а D — диагональная матрица. Обращение предобусловливателя $B = LL^T$ сводится к решению двух треугольных систем для нахождения вектора поправки в предобусловленном методе сопряженных градиентов. В работах [9–12] было предложено использование нескольких итераций метода Якоби или блочного метода Якоби для решения треугольных систем при применении предобусловливания неполного треугольного разложения, что позволило использовать высокий уровень параллелизма. В работе [13] предлагается безытерационный способ применения (MPI+OpenMP)-технологии при обращении неявного факторизованного предобусловливателя, т. е. решению двух треугольных систем. В работе [14] предлагается новый итерационный алгоритм неполных IC(0)-, IC(1)-, IC(2)-разложений, в котором все ненулевые элементы треугольных матриц могут быть вычислены асинхронно.

Заметим, что использование явных предобусловливателей позволяет эффективно применять (MPI+OpenMP)-технологию для параллельного решения СЛАУ (1) предобусловленным методом сопряженных градиентов (см., например, [15–17]).

В работах [18, 19] предложены два безытерационных способа применения (MPI+OpenMP)-технологии при построении и обращении неявного факторизованного предобусловливателя блочного метода Якоби в сочетании с IC(0) (неполным треугольным разложением Холецкого без заполнения) и IC1(τ), в которых обращение предобусловливателя сводится к решению двух треугольных систем. Эти способы основаны на переупорядочении узлов сетки типа DDO [20] внутри каждой подобласти или уменьшении шаблона разреженности матрицы A при построении предобусловливателя.

Безытерационный способ применения (MPI+OpenMP)-технологии построения и обращения предобусловливателей ВПС-IC1 и ВПС-IC2S, подробно рассматриваемый в настоящей работе, впервые был предложен в работе [6]. В этой работе был также предложен безытерационный способ применения (MPI+OpenMP)-технологии построения и обращения предобусловливателя ВПС-IC1, основанный на переупорядочении узлов сетки типа DDO внутри каждой подобласти, полученной при разбиении области расчета для параллельной реализации с использованием только MPI, и отсечении по структуре ничтожно малого числа элементов матрицы предобусловливания при ее построении.

В формуле (1) предполагается, что матрица A уже переупорядочена, а вместо $A_P = P\tilde{A}P^T$ (P — матрица перестановки, \tilde{A} — матрица коэффициентов исходной задачи) стоит A . В настоящей работе применяются переупорядочения, уменьшающие среднюю ширину ленты матрицы, а именно предложенные в работах [21, 22], являющиеся обобщением упорядочения [4]. Подход, предложенный в этих работах, позволяет одновременно произвести разбиение области расчета на подобласти. Будем также предполагать, что матрица A отмасштабирована, т. е. ее диагональные элементы равны единице. Это достигается с использованием формулы $A_{SP} = D_{AP}^{-1/2} A_P D_{AP}^{-1/2}$, где D_{AP} — диагональная

часть матрицы A_P . Далее вместо A_{SP} будем использовать обозначение A , предполагая, что переупорядочение и масштабирование уже выполнены.

Итак, в настоящей работе рассматривается безытерационный способ применения (MPI+OpenMP)-технологии для построения и обращения предобусловливателя ВПС-IC2S и нового предобусловливателя ВПС-IC1 для решения СЛАУ с симметричной положительно определенной матрицей. При этом в предобусловливателе ВПС вместо p используется pt блоков, где p — число процессоров, t — число потоков. OpenMP-технологии применяются для всех строк матрицы на этапах построения и обращения предобусловливателей ВПС-IC2S и ВПС-IC1. Проводится сравнение времени решения задач методом сопряженных градиентов с предобусловливателями ВПС-IC2S и ВПС-IC1 с использованием MPI- и (MPI+OpenMP)-подходов на примере модельной задачи и ряда задач из коллекции разреженных матриц SuiteSparse [23]. Время решения этих задач методом сопряженных градиентов с предобусловливателями ВПС-IC2S и ВПС-IC1 также сравнивается между собой.

Предобусловленный метод сопряженных градиентов

Пусть требуется решить СЛАУ (1). Алгоритм 1 предобусловленного метода сопряженных градиентов (см., например, [24]) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_0 &= \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0; & \mathbf{p}_0 &= \mathbf{w}_0 = H\mathbf{r}_0; & \gamma_0 &= \mathbf{r}_0^T \cdot \mathbf{p}_0; \\ \text{для } k &= 0, \dots, & \text{пока } \mathbf{r}_k^T \cdot \mathbf{r}_k &> \varepsilon^2 (\mathbf{r}_0^T \cdot \mathbf{r}_0), & \text{выполнять} \\ \mathbf{q}_k &= A\mathbf{p}_k; & \alpha_k &= \gamma_k / (\mathbf{p}_k^T \cdot \mathbf{q}_k); \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k; & \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{q}_k; & \mathbf{z}_{k+1} &= H\mathbf{r}_{k+1}; \\ \gamma_{k+1} &= \mathbf{r}_{k+1}^T \cdot \mathbf{z}_{k+1}; & \beta_k &= \gamma_{k+1} / \gamma_k; & \mathbf{p}_{k+1} &= \mathbf{z}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k, \end{aligned}$$

где $0 < \varepsilon \ll 1$; H — матрица предобусловливания ($H \approx A^{-1}$). Этот алгоритм использует операции умножения разреженных матриц на вектор, вычисления скалярных произведений, элементарные векторные операции, а также вычисление $\mathbf{z}_{k+1} = H\mathbf{r}_{k+1}$, $\mathbf{p}_0 = \mathbf{w}_0 = H\mathbf{r}_0$. Принципиальная возможность эффективной параллельной реализации всех операций, кроме вычисления $H\mathbf{r}_{k+1}$, $H\mathbf{r}_0$, не вызывает сомнений даже при использовании большого числа процессоров и/или применении OpenMP-технологии.

Предобусловливатели блочного неполного обратного разложения Холецкого в сочетании с IC2S(τ) и IC1(τ)

Приведем краткое описание блочной версии алгоритма неполного обратного разложения Холецкого ВПС [1, 2]. Пусть матрица A размерами $n \times n$ отмасштабирована, переупорядочена и разбита на блоки, причем на блочной диагонали расположены p квадратных блоков размерами $n_s \times n_s$, $1 \leq s \leq p$. Для каждого s -го диагонального блока определим базисное множество индексов как $\{k_{s-1} + 1, \dots, k_s\}$, где $k_s = n_1 + \dots + n_s$ ($k_0 = 0$; $k_p = n$), и введем "перекрывающиеся" множества индексов: $\{j_s(1), \dots, j_s(m_s - n_s)\}$, $j_s(l) \leq k_{s-1}$ ($l = 1, \dots, m_s - n_s$). Для каждого s такое множество включает индексы, не превышающие k_{s-1} , которые оказываются наиболее существенно связанными с s -м базисным множеством индексов, например, в смысле графа смежности разреженной матрицы A . Здесь $m_s \geq n_s$, m_s — размер s -го расширенного блока, причем $m_1 = n_1$. Для каждого s -го диагонального блока определим прямоугольные матрицы

$$V_s = (\mathbf{e}_{j_s(1)} \mid \dots \mid \mathbf{e}_{j_s(m_s - n_s)} \mid \mathbf{e}_{k_{s-1}+1} \mid \dots \mid \mathbf{e}_{k_s}), \quad (3)$$

столбцы которых являются единичными n -векторами. Пусть \bar{U}_s — правый множитель в точном треугольном разложении Холецкого расширенной диагональной ($m_s \times m_s$)-подматрицы:

$$A_s = V_s^T A V_s = \bar{U}_s^T \bar{U}_s, \quad s = 1, \dots, p. \quad (4)$$

Предобусловливатель блочного неполного обратного разложения Холецкого (ВИИС) имеет вид [1, 2]

$$H = \sum_{s=1}^p V_s \bar{U}_s^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_s} \end{pmatrix} \bar{U}_s^{-T} V_s^T. \quad (5)$$

В работах [1, 2] показано, что ВИИС-предобусловливатель обладает свойством K -оптимальности.

В формуле (5) для каждого $s = 1, \dots, p$ для аппроксимации $(m_s \times m_s)$ -подматриц $A_s = V_s^T A V_s$ заменим точное разложение Холецкого (4) соответствующим приближенным стабилизированным треугольным разложением второго порядка по значению IC2S (τ) [3]:

$$V_s^T A V_s = U_s^T U_s + U_s^T R_s + R_s^T U_s - S_s.$$

Здесь U_s — верхнетреугольные матрицы; R_s — строго верхнетреугольные матрицы, $\|R_s\| = O(\tau)$; $\|S_s\| = O(\tau^2)$; $0 < \tau \ll 1$ — порог отсечения; матрицы V_s определены по формуле (3). Напомним, что перед построением матрицы предобусловливания IC2S (τ) необходимо выполнить масштабирование матрицы A (см. выше).

Определим предобусловливатель ВИИС-IC2S формулой [4]

$$\tilde{H} = \sum_{s=1}^p V_s U_s^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_s} \end{pmatrix} U_s^{-T} V_s^T. \quad (6)$$

Алгоритм вычисления элементов матриц U_s и R_s приведен, например, в работах [3, 6]. При вычислении u_{ii} — диагональных элементов матрицы U_s (u_{ii} зависят от s) — необходимо извлекать квадратный корень из числа, которое определяется в процессе вычисления элементов строк этих матриц с номерами, не превышающими i (для каждого s). Доказано, что в случае вычисления предобусловливателя IC2S (τ) не может возникнуть ситуации, когда вычисленное подкоренное выражение отрицательно [3]. То есть метод сопряженных градиентов с предобусловливанием IC2S (τ) является безотказным для любой симметричной положительно определенной матрицы A . Метод сопряженных градиентов с предобусловливанием ВИИС-IC2S (τ) тоже является безотказным.

Теперь в формуле (5) для каждого $s = 1, \dots, p$ для аппроксимации $(m_s \times m_s)$ -подматриц $A_s = V_s^T A V_s$ заменим точное разложение Холецкого (4) соответствующим приближенным треугольным разложением первого порядка по значению IC1 (τ):

$$V_s^T A V_s = \hat{U}_s^T \hat{U}_s - E_s,$$

где \hat{U}_s — верхнетреугольные матрицы; $\|E_s\| = O(\tau)$. Один из первых алгоритмов, в котором за основу построения матрицы предобусловливания берется точный алгоритм треугольной факторизации, а на его определенных этапах вносится отсечение возникающих элементов матриц, малых относительно порога, зависящего от τ , опубликован в работе [5]. Перед построением матрицы предобусловливания IC1 (τ) тоже необходимо обеспечить, чтобы матрицы $A_s = V_s^T A V_s$ были отмасштабированы.

Определим предобусловливатель ВИИС-IC1 формулой

$$\hat{H} = \sum_{s=1}^p V_s \hat{U}_s^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_s} \end{pmatrix} \hat{U}_s^{-T} V_s^T. \quad (7)$$

Алгоритм вычисления элементов матрицы \hat{U}_s приведен, например, в работах [6, 19]. Метод сопряженных градиентов с предобусловливанием ВИИС-IC1 (τ) имеет ограниченную область применимости, в ряде случаев для безотказности требуется чрезмерное уменьшение параметра τ .

Алгоритмы параллельной реализации

Пусть матрица A переупорядочена, отмасштабирована и разбита на p блоков. В настоящей работе, не ограничивая общности, в предобусловливателях ВПС-IC2S и ВПС-IC1 будем использовать перекрытие (*налегание*) с шириной $q = 1$. Перед вычислением матрицы предобусловливания на каждом процессоре с номером s ($1 \leq s \leq p$) строятся матрицы $A_s = V_s^T A V_s$ размерами $m_s \times m_s$; для этого осуществляются необходимые пересылки строк матрицы A .

Параллельная реализация вычисления предобусловливателей ВПС-IC2S, ВПС-IC1, определенных по формулам (6), (7), с использованием только MPI не представляет труда. Для вычисления элементов матриц U_s и \hat{U}_s используются алгоритмы из работ [3] или [19], пересылок не требуется. Так же, как в работе [4], матрицы U_s^T и \hat{U}_s^T не вычисляются.

Обращение предобусловливателя $\mathbf{z} = \hat{H}\mathbf{r}$, где \hat{H} определено по (6), происходит следующим образом [4]. Перед началом вычислений элементы вектора \mathbf{r}_s с индексами $j_s(1), \dots, j_s(m_s - n_s)$ должны быть переданы на процессор с номером s . Затем на каждом процессоре с номером s вычисляются

$$\mathbf{z}_s = U_s^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_s} \end{pmatrix} U_s^{-T} \mathbf{r}_s.$$

Используется способ обращения матриц U_s^T , предложенный в [4]. После вычисления \mathbf{z}_s следует выполнить необходимые пересылки элементов вектора \mathbf{z}_s с индексами $j_s(1), \dots, j_s(m_s - n_s)$ на другие процессоры. Аналогично происходит обращение предобусловливателя ВПС-IC1.

Рассмотрим способ параллельной реализации этапов построения и обращения предобусловливателей с использованием (MPI+OpenMP)-технологии. Разобьем всю область расчета сразу на pm подобластей, где p — число используемых процессоров, m — число используемых потоков. На процессоре с номером s будут производиться вычисления в "большой" подобласти с номером s , состоящей из подобластей с номерами $t = (s - 1)m + 1, \dots, sm$, полученных при разбиении. При использовании (MPI+OpenMP)-технологии число блоков в предобусловливателях ВПС-IC2S и ВПС-IC1 равно pm .

Для построения предобусловливателей ВПС-IC2S, ВПС-IC1 на каждом процессоре с номером s сначала создаются m матриц $A_t = V_t^T A V_t$, где $t = (s - 1)m + 1, \dots, sm$. При этом выполняются необходимые пересылки строк матрицы A . Затем по отмасштабированным матрицам A_t на процессоре с номером s ($s = 1, \dots, p$) с использованием алгоритмов из работ [3] или [19] строятся матрицы U_t или \hat{U}_t ($t = (s - 1)m + 1, \dots, sm$). При этом для каждого t вычисления элементов матриц U_t или \hat{U}_t выполняются в своем потоке, все рекурсивные вычисления при построении матриц U_t или \hat{U}_t выполняются внутри потоков. В программе необходимо задать число *внутренних* блоков с налеганием, равное m , и инициализировать число нитей, совпадающее с числом внутренних блоков. В настоящей работе на этапе построения предобусловливателей для циклов по $t1 = 1, \dots, m$ используется директива `do` с опцией `schedule static`, внутри циклов по $t1$ осуществляется построение матриц U_t или \hat{U}_t .

При построении матриц A_t ($t = (s - 1)m + 1, \dots, sm$) на каждом процессоре с номером s ($s = 1, \dots, p$) тоже используются OpenMP-технологии с числом нитей m . В настоящей работе на этапе построения матриц A_t для внешних циклов по $t1 = 1, \dots, m$ используется директива `do` с опцией `schedule static`.

Обращение предобусловливателя ВПС-IC2S с использованием формулы

$$\mathbf{z}_t = U_t^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_t} \end{pmatrix} U_t^{-T} \mathbf{r}_t, \quad t = (s - 1)m + 1, \dots, sm, \quad s = 1, \dots, p \quad (8)$$

происходит следующим образом. Перед началом вычислений элементы векторов \mathbf{r}_t для $t = (s - 1)m + 1, \dots, sm$, необходимые для расчетов и хранящиеся в памяти других процессоров, должны быть переданы на процессор с номером s . Для каждого $t = (s - 1)m + 1, \dots, sm$ вычисления по формуле (8) выполняются в своем потоке. В настоящей работе при вычислении \mathbf{z}_t

для выполнения циклов по $t1 = 1, \dots, m$ используется директива `do` с опцией `schedule static`. Применяется способ обращения матриц U_t^T , предложенный в [4]. После вычисления \mathbf{z}_t для всех $t = (s - 1)m + 1, \dots, sm$, $s = 1, \dots, p$, следует выполнить необходимые пересылки. Аналогично происходит обращение предобусловливателя ВПС-IC1 с использованием (MPI+OpenMP)-технологии.

Заметим, что для случая $p = 1$ выше описан способ параллельной реализации этапов построения и обращения предобусловливателей ВПС-IC2S и ВПС-IC1 для m блоков с наложением с применением OpenMP-технологии.

Вычисление элементов вектора $\mathbf{q}_k = A\mathbf{p}_k$, где k — номер итерации в алгоритме 1 предобусловленного метода сопряженных градиентов, выполняется следующим образом [15, 16]. Матрица A хранится в памяти в распределенном CRS-формате, содержит верхнюю и нижнюю треугольные матрицы. Сначала производится пересылка значений компонент вектора \mathbf{p}_k , необходимых для вычисления части вектора \mathbf{q}_k на рассматриваемом процессоре с номером s ($s = 1, \dots, p$), хранящихся в памяти других процессоров. В случае применения OpenMP-технологии для вычисления $(\mathbf{q}_k)_i$ (компонент вектора \mathbf{q}_k) на каждом процессоре для своей группы индексов i для выполнения цикла по i в настоящей работе используется директива `do` с опцией `schedule static`. Заметим, что, как показали расчеты задач методом CG с предобусловливанием Якоби в работах [15, 16], использование параметров `dynamic`; `guided`; `guided`, 6 в этой опции, как правило, не позволяет ускорить вычисления по сравнению с использованием параметра `static`.

MPI-реализация вычислений векторных операций и скалярных произведений в алгоритме 1 хорошо известна. При применении (MPI+OpenMP)-подхода для вычислений векторных операций и частичных сумм в скалярных произведениях в настоящей работе использовалась директива `do` с опцией `schedule static`.

Результаты расчетов

В настоящем разделе метод сопряженных градиентов с предобусловливанием ВПС-IC2S будем называть ВПС2S-CG, метод сопряженных градиентов с предобусловливанием ВПС-IC1 будем называть ВПС1-CG. Программы, реализующие применение методов ВПС2S-CG, ВПС1-CG для решения СЛАУ (1), были написаны на языке FORTRAN 90 с использованием (MPI+OpenMP)-технологии. Расчеты проводились на многопроцессорном вычислительном кластере K60, установленном в ЦКП ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. В состав кластера K60 входят 85 вычислительных узлов, содержащих 2380 ядер (по 28 ядер на модуль). Каждый узел представляет собой двухпроцессорный сервер с процессорами Intel Xenon E5-2690 v4. Суммарная пиковая производительность кластера — 80,9 Тфлопс.

Тестирование и сравнение методов производились с помощью решения модельной задачи — разностной задачи Дирихле для уравнения Пуассона в единичном квадрате на ортогональной сетке с $n = 1\,048\,576$. Использовалась стандартная 5-точечная аппроксимация лапласиана (имя матрицы 5_1048576). Для тестирования рассматриваемых параллельных методов использовались также некоторые матрицы из коллекции разреженных матриц SuiteSparse [23]. Перечислим имена используемых тестовых матриц и укажем источники их происхождения:

- `apache2` — трехмерная конечно-разностная схема;
- `parabolic_fem` — уравнение диффузии-конвекции с постоянным переносом;
- `ecology2` — приложение теории электрических цепей к задаче передачи генов;
- `boneS01` — модель трубчатой кости;
- `cfd2` — вычислительная гидродинамика (уравнение давления).

В табл. 1 приведены некоторые свойства этих матриц: NZA — число ненулевых элементов матрицы A ; Id — количество строк без диагонального преобладания; Ip — количество положительных внедиагональных элементов; nz_{\min} , nz_{\max} — минимальное и максимальное число ненулевых элементов в строках матрицы A ; значения $Cond(A_0)$, где $A_0 = (D_A)^{-1/2} A (D_A)^{-1/2}$ — матрица системы уравнений после масштабирования, взяты из работы [25].

Свойства некоторых матриц из коллекции разреженных матриц SuiteSparse

Матрица A	n	NZA	Id	Ip	nz_{min}	nz_{max}	$Cond(A_0)$
apache2	715 176	4 817 870	2	0	4	8	$0,12 \cdot 10^7$
parabolic_fem	525 825	3 674 625	0	1 048 576	3	7	$0,20 \cdot 10^6$
ecology2	999 999	4 995 991	1 124	0	3	5	$0,63 \cdot 10^8$
boneS01	127 224	5 516 602	127 222	2 064 830	12	67	$0,13 \cdot 10^8$
cfid2	123 440	3 085 406	123 440	936 464	8	30	$0,15 \cdot 10^7$

Модельную задачу далее будем называть задачей 1. Задачу с матрицей `parabolic_fem` будем называть задачей 2, задачи с матрицами `apache2`, `ecology2` — соответственно задачами 3, 4, а с матрицами `boneS01`, `cfid2` — задачами 5, 6.

Решалось уравнение $Ax = b$, где A — отмасштабированная матрица ($A = A_0$) с единичной правой частью ($b_i \equiv 1$), начальное приближение $x_0 \equiv 0$, счет продолжался до выполнения условия (2), где $\varepsilon = 10^{-8}$. Для разбиения области расчета на p подобластей, а также на pm подобластей (при применении (MPI+OpenMP)-технологии) применялся алгоритм [21]. Использовалось налегание шириной $q = 1$. В качестве параметра отсечения при решении всех задач методом ВИС2S-CG использовалось значение $\tau = 0,01$. При решении задач 1–4 методом ВИС1-CG использовалось значение $\tau = 0,01$, а задачи 5 — $\tau = 0,005$, что было продиктовано требованием безотказности метода ВИС1-CG при решении этой задачи. При решении задачи 6 методом ВИС1-CG для безотказности метода необходимо использовать чрезмерно малое значение τ , поэтому решение этой задачи данным методом не проводилось.

В табл. 2–6 приведены число итераций и время счета методами ВИС2S-CG и ВИС1-CG тестовых задач 1–5 при применении для параллельной реализации MPI- и (MPI+OpenMP)-технологий. В табл. 7 приводятся результаты расчетов методом ВИС2S-CG тестовой задачи 6 с применением этих же технологий. При применении (MPI+OpenMP)-технологии расчеты проводились с использованием 3, 4, 6, 8, 12, 16 нитей. В табл. 2–7 приведены результаты, оптимальные по числу нитей для каждого числа процессоров p с точки зрения времени вычислений, и соответствующие им значения числа использованных нитей. Приведены также коэффициенты ускорения счета μ благодаря применению OpenMP-технологии на том же числе процессоров. Под временем вычислений в табл. 2–7 подразумевается время счета итерационного процесса в сумме со временем вычисления предобусловливателя.

На рис. 1–6 приведены зависимости времени счета t_p тестовых задач от числа процессоров в логарифмическом масштабе с использованием MPI- и (MPI+OpenMP)-технологий для методов ВИС2S-CG и ВИС1-CG.

Таблица 2

Число итераций и время счета (в секундах) методами ВИС2S-CG и ВИС1-CG задачи с матрицей 5_1048576 на p процессорах без использования и с использованием OpenMP-технологии

p	ВИС2S-CG						ВИС1-CG					
	MPI		MPI+OpenMP		μ	MPI		MPI+OpenMP		μ		
	Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета		Число нитей	Число итераций	Время счета	Число итераций		Время счета	Число нитей
2	342	17,4	421	5,73	12	3,04	401	19,55	469	6,13	12	3,19
4	343	9,93	421	4,62	6	2,15	401	11,02	444	6,33	4	1,74
8	375	5,96	421	3,8	3	1,57	435	6,67	469	4,05	3	1,65
10	374	4,5	414	4,63	3	0,97	427	5,04	493	4,17	3	1,2
16	386	3,52	442	3,9	3	0,9	444	3,86	493	4,16	3	0,93

Таблица 3

Число итераций и время счета (в секундах) методами ВПС2S-CG и ВПС1-CG задачи с матрицей parabolic_fem на p процессорах без использования и с использованием OpenMP-технологии

p	ВПС2S-CG						ВПС1-CG					
	MPI		MPI+OpenMP			μ	MPI		MPI+OpenMP			μ
	Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей		Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей	
2	296	8,79	368	3,22	12	2,73	415	10,98	454	3,19	12	3,44
4	323	5,22	368	2,63	6	1,98	418	5,79	453	3,14	4	1,84
8	346	2,94	368	2,03	3	1,45	440	3,27	454	2,08	3	1,57
10	359	3,24	399	3,06	3	1,05	463	3,09	497	2,66	4	1,16
16	357	1,59	424	2,33	3	0,68	353	1,80	509	2,28	3	0,79

Таблица 4

Число итераций и время счета (в секундах) методами ВПС2S-CG и ВПС1-CG задачи с матрицей apache2 на p процессорах без использования и с использованием OpenMP-технологии

p	ВПС2S-CG						ВПС1-CG					
	MPI		MPI+OpenMP			μ	MPI		MPI+OpenMP			μ
	Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей		Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей	
2	403	15,85	509	5,63	12	2,81	489	16,69	542	6,78	8	2,46
4	418	10,5	509	4,71	6	2,23	501	11,21	611	6,89	8	1,63
8	451	5,17	509	3,86	3	1,34	529	5,36	577	4,3	3	1,25
10	461	4,61	560	5,28	3	0,87	540	4,60	618	5,29	3	0,86
16	481	2,99	581	3,99	3	0,75	542	2,97	645	4,5	3	0,66

Таблица 5

Число итераций и время счета (в секундах) методами ВПС2S-CG и ВПС1-CG задачи с матрицей ecology2 на p процессорах без использования и с использованием OpenMP-технологии

p	ВПС2S-CG						ВПС1-CG					
	MPI		MPI+OpenMP			μ	MPI		MPI+OpenMP			μ
	Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей		Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей	
2	560	27,55	544	7,49	16	3,68	697	31,84	809	10,19	12	3,12
4	608	14,8	698	6,71	6	2,21	721	17,3	790	9,98	4	1,74
8	623	8,32	698	5,45	3	1,53	740	9,87	809	6,68	3	1,48
10	634	7,19	714	7,72	3	0,93	751	8,25	846	8,2	4	1,01
16	677	5,48	737	5,48	3	1,0	790	6,27	854	7,07	3	0,88

Как видно из табл. 2–7 и рис. 1–6, применение (MPI+OpenMP)-технологии позволяет значительно быстрее, чем при применении только MPI, выполнять решение всех тестовых задач методом ВПС2S-CG при $p < 10$. При $p = 10$ и 16 применение OpenMP-технологии для решения тестовых задач методом ВПС2S-CG становится нецелесообразным.

Как видно из табл. 2–6 и рис. 1–5, применение (MPI+OpenMP)-технологии для решения задач 1–5 позволяет значительно ускорить их решение методом ВПС1-CG по сравнению с использованием только MPI при $p < 10$. При $p = 10$ и 16 применение OpenMP-технологии для решения тестовых задач методом ВПС1-CG становится нецелесообразным.

Таблица 6

Число итераций и время счета (в секундах) методами ВПС2S-CG и ВПС1-CG задачи с матрицей boneS01 на p процессорах без использования и с использованием OpenMP-технологии

p	ВПС2S-CG						ВПС1-CG							
	MPI		MPI+OpenMP				μ	MPI		MPI+OpenMP				μ
	Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей	Число итераций		Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей			
2	301	12,28	366	3,62	12	3,39	301	10,09	365	3,4	12	2,96		
4	324	6,89	366	3,26	6	2,11	348	6,19	402	3,2	12	1,93		
8	332	3,91	366	2,69	3	1,45	335	3,28	365	2,44	3	1,34		
10	350	3,27	380	3,21	3	1,02	376	3,02	378	2,99	3	1,01		
16	357	2,19	390	2,5	3	0,88	380	2,04	404	2,32	3	0,88		

Таблица 7

Число итераций и время счета (в секундах) методом ВПС2S-CG задачи с матрицей cfd2 на p процессорах без использования и с использованием OpenMP-технологии

p	MPI		MPI+OpenMP				μ
	Число итераций	Время счета	Число итераций	Время счета	Число нитей		
2	296	8,61	436	3,15	12	2,73	
4	333	5,14	436	2,76	6	1,86	
8	386	3,20	436	2,36	3	1,35	
10	393	2,61	462	2,61	3	1,0	
16	428	2,09	515	2,23	3	0,94	

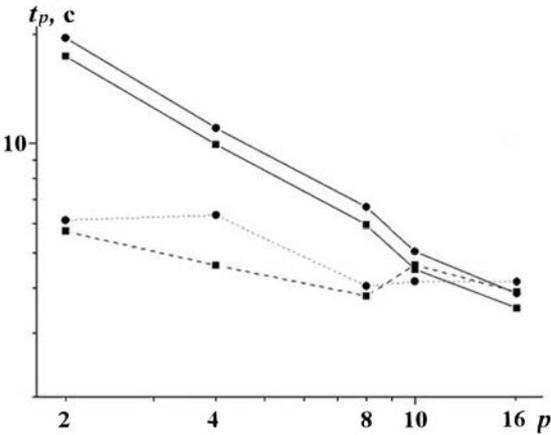


Рис. 1. Времена счета задачи с матрицей 5_1048576 методами ВПС2S-CG и ВПС1-CG с использованием технологий MPI и MPI+OpenMP: —●— — ВПС1-CG, MPI; - -●- - ВПС1-CG, MPI+OpenMP; —■— — ВПС2S-CG, MPI; - -■- - ВПС2S-CG, MPI+OpenMP

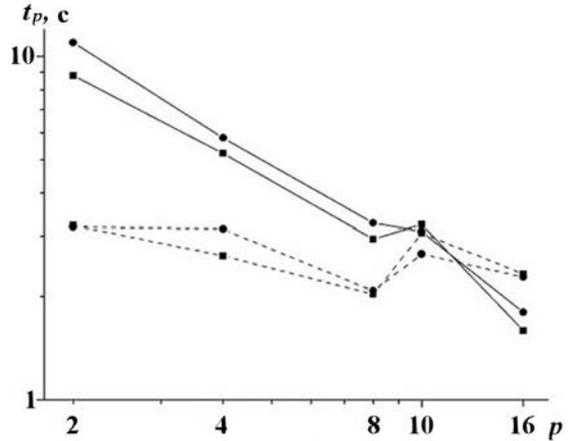


Рис. 2. Времена счета задачи с матрицей parabolic_fem методами ВПС2S-CG и ВПС1-CG с использованием технологий MPI и MPI+OpenMP: —●— — ВПС1-CG, MPI; - -●- - ВПС1-CG, MPI+OpenMP; —■— — ВПС2S-CG, MPI; - -■- - ВПС2S-CG, MPI+OpenMP

Заметим, что алгоритм построения матрицы предобусловливания ВПС-IC1 значительно проще, чем матрицы предобусловливания ВПС-IC2S, и время вычисления предобусловливателя ВПС-IC1, как правило, меньше, чем время вычисления предобусловливателя ВПС-IC2S, особенно для случая не очень сильно разреженных матриц. Однако ожидается, что скорость сходимости итерационного

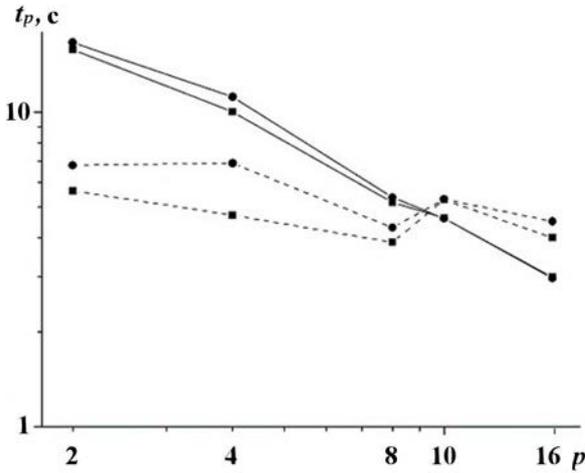


Рис. 3. Времена счета задачи с матрицей `apache2` методами WIIC2S-CG и WIIC1-CG с использованием технологий MPI и MPI+OpenMP: —●— — WIIC1-CG, MPI; - -● - - WIIC1-CG, MPI+OpenMP; —■— — WIIC2S-CG, MPI; - -■ - - WIIC2S-CG, MPI+OpenMP

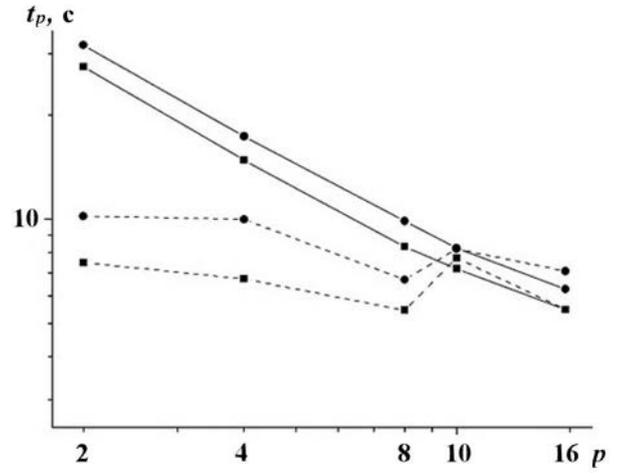


Рис. 4. Времена счета задачи с матрицей `ecology2` методами WIIC2S-CG и WIIC1-CG с использованием технологий MPI и MPI+OpenMP: —●— — WIIC1-CG, MPI; - -● - - WIIC1-CG, MPI+OpenMP; —■— — WIIC2S-CG, MPI; - -■ - - WIIC2S-CG, MPI+OpenMP

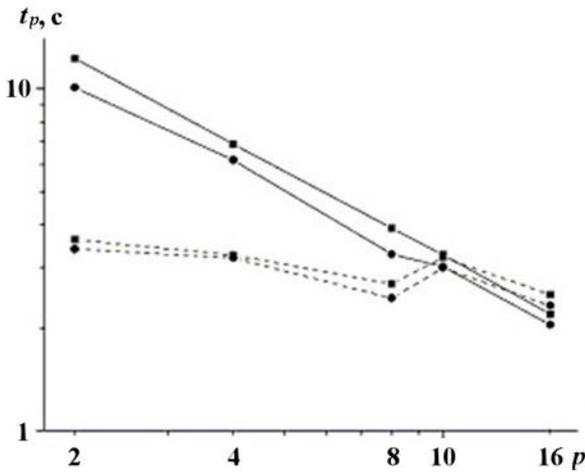


Рис. 5. Времена счета задачи с матрицей `boneS01` методами WIIC2S-CG и WIIC1-CG с использованием технологий MPI и MPI+OpenMP: —●— — WIIC1-CG, MPI; - -● - - WIIC1-CG, MPI+OpenMP; —■— — WIIC2S-CG, MPI; - -■ - - WIIC2S-CG, MPI+OpenMP

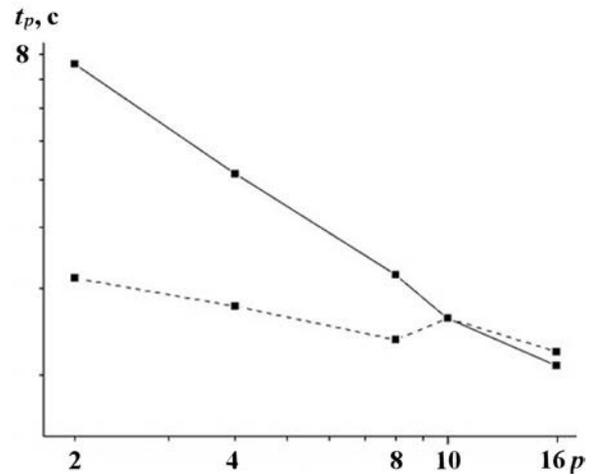


Рис. 6. Времена счета задачи с матрицей `cfd2` методом WIIC2S-CG с использованием технологий MPI (—■—) и MPI+OpenMP (- -■ - -)

процесса в методе WIIC2S-CG должна быть выше, чем в WIIC1-CG. Кроме того, метод WIIC2S-CG является безотказным.

Как видно из табл. 2–5 и рис. 1–4, решение задач 1–4 методом WIIC2S-CG с применением MPI и MPI+OpenMP в подавляющем большинстве случаев происходит быстрее, чем методом WIIC1-CG. Для задач 1–4 число итераций метода WIIC2S-CG меньше числа итераций метода WIIC1-CG как без использования, так и при использовании OpenMP-технологии. Решение задачи 5 с более заполненной матрицей `boneS01` методами WIIC2S-CG и WIIC1-CG выполнялось с разными значениями τ . При этом, как видно из табл. 6 и рис. 5, решение этой задачи методом WIIC2S-CG с применением MPI и MPI+OpenMP происходит немного медленнее, чем методом WIIC1-CG.

На рис. 7 приведены графики ускорения счета задач ν методами ВПС2S-CG и ВПС-CG с применением MPI- и (MPI+OpenMP)-технологий по сравнению с расчетами на двух процессорах.

Как видно из рис. 7, *а*, при решении задач 1–4, 6 при $p \leq 8$, а задачи 5 — при $p < 8$ методом ВПС2S-CG с применением (MPI+OpenMP)-технологии наблюдается сверхлинейное ускорение. Как видно из рис. 7, *б*, при решении задач 1, 2, 4, 5 при $p \leq 8$, а задачи 4 — при $p < 8$ методом ВПС1-CG с применением (MPI+OpenMP)-технологии также наблюдается сверхлинейное ускорение.

Уменьшение эффекта от использования OpenMP-технологии с увеличением числа процессоров объясняется, в частности, уменьшением числа строк матрицы, приходящихся на каждый процессор, т. е. уменьшением вычислительной работы на каждом процессоре. В работе [6] проведено исследование влияния размера матрицы на эффективность использования OpenMP-технологии с помощью решения модельных задач — разностных задач Дирихле для уравнения Пуассона в единичной квадратной области на равномерной ортогональной сетке с возрастающим числом узлов. Решение этих задач выполнялось методом ВПС2S-CG без использования налегания ($q = 0$). В этом случае имеет место предобусловливание блочным методом Якоби в сочетании с IC2S(τ) (ВПС2(τ)). Расчеты продемонстрировали, что с увеличением размера матрицы эффективность использования OpenMP-технологии для фиксированного числа процессоров возрастает.

В настоящей работе в качестве тестовых матриц использовались матрицы относительно небольшого размера. При расчетах реальных физических задач размеры матриц, как правило, значительно больше. Можно ожидать, что потеря эффективности от применения OpenMP-технологии при решении задач наступит при значительно большем числе процессоров.

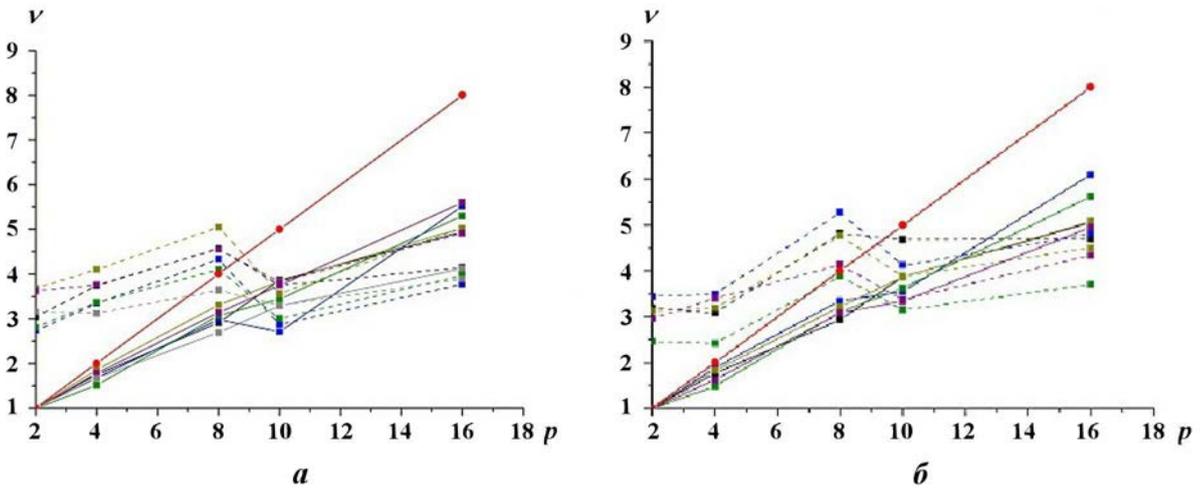


Рис. 7. Ускорения счета задач при использовании методов ВПС2S-CG (*а*) и ВПС1-CG (*б*) с применением технологий MPI (—) и MPI+OpenMP (---): ■ — 5_1048576; ■ — parabolic_fem; ■ — apache2; ■ — ecology2; ■ — boneS01; ■ — cfd2; ● — идеальное ускорение

Заключение

В работе рассмотрен новый предобусловливатель ВПС-IC1 для решения СЛАУ (1) методом сопряженных градиентов. Предложен способ применения (MPI+OpenMP)-технологии для построения и обращения предобусловливателей ВПС-IC2S и ВПС-IC1 с числом блоков, кратным числу процессоров и числу используемых потоков. С помощью расчетов модельной задачи и ряда задач из коллекции разреженных матриц SuiteSparse показано, что использование (MPI+OpenMP)-технологии для реализации метода сопряженных градиентов с предобусловливателями ВПС-IC2S(τ) и ВПС-IC1(τ) позволяет существенно ускорить вычисления по сравнению с применением только MPI для не слишком большого числа узлов суперкомпьютерной системы. При этом наблюдается сверхлинейное ускорение расчетов. Как показали расчеты, в подавляющем большинстве случаев

решение тестовых задач методом сопряженных градиентов с предобусловливанием ВПС-IC2S(τ) происходит быстрее, чем с предобусловливанием ВПС-IC1(τ), как при использовании MPI, так и при применении (MPI+OpenMP)-технологии.

Список литературы

1. *Kaporin I. E.* New convergence results and preconditioning strategies for conjugate gradient method // Numer. Linear Algebra and Appls. 1994. Vol. 1, No 2. P. 179–210.
2. *Капорин И. Е.* О предобусловливании метода сопряженных градиентов при решении дискретных аналогов дифференциальных задач // Дифференциальные уравнения. 1990. Т. 26, № 7. С. 1225–1236.
Kaporin I. E. O predobuslovliivaniy metoda sopryazhyennykh gradientov pri reshenii diskretnykh analogov differentsialnykh zadach // Differentsialnye uravneniya. 1990. T. 26, № 7. S. 1225–1236.
3. *Kaporin I. E.* High quality preconditionings of a general symmetric positive definite matrix based on its $U^T U + U^T R + R^T U$ -decomposition // Numer. Lin. Alg. Appl. 1998. Vol. 5. P. 483–509.
4. *Капорин И. Е., Миллюкова О. Ю.* Массивно-параллельный алгоритм предобусловленного метода сопряженных градиентов для численного решения систем линейных алгебраических уравнений // Сб. трудов отдела проблем прикладной оптимизации ВЦ РАН / Под ред. В. Г. Жадана. М.: ВЦ РАН, 2011. С. 132–157.
Kaporin I. E., Milyukova O. Yu. Massivno-parallelnyy algoritm predobuslovlennoy metoda sopryazhyennykh gradientov dlya chislennogo resheniya system lineynykh algebraicheskikh uravneniy // Sb. trudov otdela problem prikladnoy optimizatsii VTs RAN / Pod red. V. G. Zhadana. M.: VTs RAN, 2011. S. 132–157.
5. *Munksgaard N.* Solving sparse symmetric sets of linear equations by preconditioned conjugate gradients // ACM Trans. Math. Software. 1980. No 6. P. 206–219.
6. *Миллюкова О. Ю.* MPI+OpenMP реализация метода сопряженных градиентов с предобусловливателем блочного неполного обратного треугольного разложения IC2S и IC1: Препринт № 48. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2021. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-48>.
Milyukova O. Yu. MPI+OpenMP realizatsiya metoda sopryazhyennykh gradientov s predobuslovliivatelem blochnogo nepolnogo obratnogo treugolnogo razlozheniya IC2S i IC1: Preprint № 48. M.: IPM im. M. V. Keldysha RAN, 2021. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-48>.
7. *Tuff A. D., Jennings A.* An iterative method for large systems of linear structural equations // J. Numer. Methods Eng. 1973. No 7. P. 175–183.
8. *Капорин И. Е., Коншин И. Н.* Параллельное решение симметричных положительно-определенных систем на основе перекрывающегося разбиения на блоки // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2001. Т. 41, № 4. С. 515–528.
Kaporin I. E., Konshin I. N. Parallelnoye reshenie simmetrichnykh polozhitelno opredelyennykh system na osnove perekryvayushchegosya razbieniya na bloki // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2001. T. 41, № 4. S. 515–528.
9. *Anderson E. C., Saad Y.* Solving sparse triangular systems on parallel computers // Int. J. High Speed Computing. 1989. Vol. 1. P. 73–96.
10. *Hammond S. W., Schreiber R.* Efficient ICCG on a shared memory multiprocessor // Ibid. 1992. Vol. 4. P. 1–21.
11. *Wolf M. M., Heroux M. A., Boman E. G.* Factors impacting performance of 535 multithreaded sparse triangular solve // Proc. 9th Int. Conf. on High Performance Computing for Computational Science VECPAR'10. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. P. 32–44.
12. *Chow E., Anzt H., Scott J., Dongarra J.* Using Jacobi iterations and blocking for solving sparse triangular systems in incomplete factorization preconditioning // J. Parallel and Distributed Computing. 2018. No 119. P. 219–230.

13. *Chow E., Patel A.* Fine-grained parallel incomplete LU factorization // *SIAM J. Sci. Comp.* 2015. Vol. 37. P. 169–193.
14. *Cayrols S., Duff I., Lopes F.* Parallelization of the Solve Phase in a Task-Based Cholesky Solver Using a Sequential Task Flow Model. Technical Report RAL-TR-2018-008. UK, Science & Technology Facilities Council, 2018.
15. *Капорин И. Е., Миллюкова О. Ю.* MPI+OpenMP параллельная реализация метода сопряженных градиентов с некоторыми явными предобусловливателями: Препринт № 8. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2018. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-8>.
Kaporin I. E., Milyukova O. Yu. MPI+OpenMP parallelnaya realizatsiya metoda sopryazhyennykh gradientov s nekotorymi yavnymi predobuslovlivatelyami: Preprint № 8. М.: IPM im. M. V. Keldysha RAN, 2018. <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-8>.
16. *Капорин И. Е., Миллюкова О. Ю.* MPI+OpenMP реализация метода сопряженных градиентов с факторизованными явными предобусловливателями // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 2018. Вып. 4. С. 57–69.
Kaporin I. E., Milyukova O. Yu. MPI+OpenMP realizatsiya metoda sopryazhyennykh gradientov s faktorizovannymi yavnymi predobuslovlivatelyami // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2018. Vyp. 4. S. 57–69.
17. *Chow E.* Parallel implementation and practical use of sparse approximate inverse preconditioners with a priori sparsity patterns // *Int. J. High Performance Comp. Appl.* 2001. Vol. 15. No 1. P. 56–74.
18. *Миллюкова О. Ю.* MPI+OpenMP реализация метода сопряженных градиентов с факторизованным предобусловливателем: Препринт № 31. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2020. <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-31>.
Milyukova O. Yu. MPI+OpenMP realizatsiya metoda sopryazhyennykh gradientov s faktorizovannym predobuslovlivatelem: Preprint № 31. М.: IPM im. M. V. Keldysha RAN, 2020. <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-31>.
19. *Миллюкова О. Ю.* MPI+OpenMP реализация метода сопряженных градиентов с предобусловливателем блочного Якоби IC1: Препринт № 83. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2020. <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-83>.
Milyukova O. Yu. MPI+OpenMP realizatsiya metoda sopryazhyennykh gradientov s predobuslovlivatelem blochnogo Yakobi IC1: Preprint № 83. М.: IPM im. M. V. Keldysha RAN, 2020. <https://doi.org/10.20948/prepr-2020-83>.
20. *Duff I. S., Meurant G. A.* The effect of ordering on preconditioned conjugate gradients // *BIT.* 1989. Vol. 29. P. 625–657.
21. *Капорин И. Е., Миллюкова О. Ю.* Неполное обратное треугольное разложение в параллельных алгоритмах предобусловленного метода сопряженных градиентов: Препринт № 37. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2017. <https://doi.org/10.20948/prepr-2017-37>.
Kaporin I. E., Milyukova O. Yu. Nepolnoe obratnoe treugolnoe razlozhenie v parallelnykh algoritmakh predobuslovlennogo metoda sopryazhyennykh gradientov: Preprint № 37. М.: IPM im. M. V. Keldysha RAN, 2017. <https://doi.org/10.20948/prepr-2017-37>.
22. *Kaporin I. E.* Reordering and splitting of sparse matrices into overlapping blocks for massively parallel preconditioning of iterative methods // *Int. Conf. "NUMGRID-2012".* Moscow, A. A. Dorodnicyn Computing Center RAS. Dec. 17–18, 2012.
23. *Davis T., Hu Y. F.* University of Florida sparse matrix collection // *ACM Trans. on Math.-Software.* 2011. Vol. 38, No 1 // <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices>.
24. *Axelsson O.* Iterative solution methods. New York: Cambridge Univ. Press, 1994.
25. *Капорин И. Е.* Использование полиномов Чебышева и приближенного обратного треугольного разложения для предобусловливания метода сопряженных градиентов // *Журнал вычисл. мат. и мат. физ.* 2012. Т. 52, № 2. С. 1–26.

Kaporin I. E. Ispolzovanie polinomov Chebysheva i priblizhennogo obratnogo treugolnogo razlozheniya dlya predobuslovlivaniya methoda sopryazhyennykh gradientov // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2012. T. 52, № 2. S. 1–26.

Статья поступила в редакцию 09.08.21.

УДК 621.315.592

ВЛИЯНИЕ МАТЕРИАЛА ПОДЛОЖКИ ОХЛАЖДАЕМОГО ИНФРАКРАСНОГО МАТРИЧНОГО ФОТОПРИЕМНИКА НА НАГРЕВ ЕГО ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОГО СЛОЯ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ИНТЕНСИВНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

А. Э. Запонов, Д. С. Конради

(ВА РВСН им. Петра Великого, г. Балашиха Московской области)

В пакете программ инженерного анализа и суперкомпьютерного моделирования "Логос" разработаны и реализованы расчетные модели взаимодействия интенсивного лазерного излучения с матричными фотоприемниками на основе InSb и $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ с подложками из Si , GaAs , Ge , InAs для определения их влияния на формирование и эволюцию возникающих при этом тепловых полей. Проанализированы и представлены в аналитическом виде температурные зависимости оптических и теплофизических характеристик исследуемых материалов. Показаны полученные результаты моделирования, проведены их анализ и обобщение.

Ключевые слова: матричные фотоприемники, лазерное излучение, компьютерное моделирование, материал подложки, пакет программ "Логос".

Введение

Моделированию взаимодействия интенсивного лазерного излучения (ЛИ) с охлаждаемыми инфракрасными матричными фотоприемниками (МФП) на основе полупроводниковых материалов антимонида индия (InSb) и твердых растворов кадмия-ртути-теллура ($\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, где x показывает долю Cd в растворе) посвящено множество работ [1–4]. Расчеты в них основаны на решении нестационарного трехмерного уравнения теплопроводности с определенными начальными и граничными условиями. Моделирование нагрева МФП при воздействии на него ЛИ осуществляется с помощью численных методов в конечно-элементной форме с использованием обеспечивающих требуемую детализацию расчетных сеток, что позволяет получить достаточно точные результаты. Однако в указанных работах рассмотрены случаи взаимодействия с ЛИ фоточувствительных слоев, размещенных на подложке из кремния, в то время как возможно использование других материалов, оптически прозрачных в требуемом диапазоне длин волн. Отличные от параметров кремния оптические и теплофизические характеристики способны существенно изменить температурное поле, формирующееся в МФП при воздействии на него ЛИ с теми же значениями энергии и длительности.

Анализ устройства и конструкции современных инфракрасных МФП позволил установить, что в качестве материалов подложек для приемников среднего и дальнего инфракрасного диапазона спектра, кроме кремния (Si), также используются арсенид галлия (GaAs), германий (Ge), арсенид индия (InAs) [5–7]. Применение конкретного (определенного) материала обусловлено его стоимостью, оптической прозрачностью в требуемом диапазоне спектра, возможностью образовывать прочное соединение с материалом фоточувствительного слоя и другими требованиями. Таким образом, целью данной работы является определение влияния материала подложки на формирование и эволюцию тепловых полей в МФП, возникающих в результате его взаимодействия с интенсивным ЛИ.

Исходя из цели сформулированы частные задачи исследования:

- 1) разработка расчетной модели взаимодействия интенсивного ЛИ с МФП на основе InSb и $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$;

- 2) определение зависимостей оптических и теплофизических характеристик исследуемых материалов от температуры для уточнения расчетной модели;
- 3) проведение расчетов с использованием разработанной модели и анализ полученных результатов.

Расчетная модель взаимодействия интенсивного ЛИ с МФП на основе InSb и $Cd_xHg_{1-x}Te$

Расчетная модель разработана в пакете программ инженерного анализа и суперкомпьютерного моделирования "Логос" по ряду причин [8]:

- данное программное обеспечение — отечественного производства и сертифицировано для использования в государственных учреждениях Российской Федерации;
- графический интерфейс и возможность автоматического построения расчетной сетки позволяют упростить процесс моделирования;
- имеются возможности распараллеливания алгоритмов и использования высокопроизводительных и суперЭВМ для уменьшения времени расчетов.

В качестве объекта исследований выбраны многослойные МФП на основе InSb и $Cd_xHg_{1-x}Te$, содержащие 64×64 чувствительных элемента (ЧЭ) размером $25 \text{ мкм} \times 25 \text{ мкм}$. ЧЭ сформированы на подложке толщиной 400 мкм при толщине фоточувствительных слоев 25 мкм , в качестве контактов ЧЭ с мультиплексором используются индиевые (In) столбы со стороны поперечного сечения (квадрата) 20 мкм и высотой 8 мкм . Трехмерная модель элемента МФП показана на рис. 1.

Для проведения расчетов приняты следующие граничные условия:

- верхняя (облучаемая ЛИ) поверхность подложки излучает в окружающую среду;
- через нижнюю поверхность In-столба происходит сток тепла в мультиплексор за счет теплопроводности, что моделируется граничными условиями третьего рода со значением коэффициента теплоотдачи, подобранным таким образом, что обеспечивается охлаждение МФП от 300 до 80 К за 5 мин [6];
- стенки боковых поверхностей ЧЭ теплоизолированы.

В качестве начальных условий принято равномерное распределение температуры в МФП: $T_0 = 80 \text{ К}$.

Для расчетов выбрана сетка с переменным пространственным шагом, где по толщине каждый ЧЭ разбивался в слое подложки на 10 , а в фоточувствительных слоях и In-столбах — на 5 интервалов. В поперечном сечении все элементы МФП разбивались на 3 интервала в каждом координатном направлении.

В расчетах моделировалось воздействие на МФП сквозь подложку импульсным ЛИ с длиной волны $3,98 \text{ мкм}$ и равномерным распределением энергии в сечении пучка, полностью покрывающим один ЧЭ площадью $1,225 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2$ в геометрическом центре МФП. Моделирование проводилось для моноимпульса ЛИ с энергией 2 мДж при длительности воздействия 400 мкс и форме импульса *строб*.

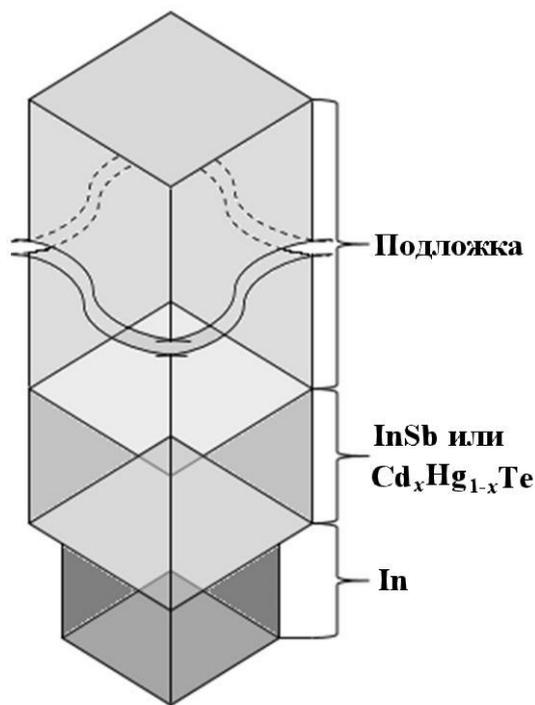


Рис. 1. Схематическое изображение объемной модели ЧЭ МФП

Зависимости оптических и теплофизических характеристик исследуемых материалов от температуры

Систематизированный набор результатов экспериментальных исследований физических характеристик полупроводниковых материалов содержится в тематической базе данных [9] в графическом виде. При помощи оцифровки графиков были получены значения характеристик, соответствующие экспериментальным с точностью до тысячных. По результатам оцифровки с помощью лицензионного пакета программ Mathcad для исследуемых материалов получены значения и выражения, наиболее точно описывающие зависимости их оптических и теплофизических характеристик от температуры (табл. 1–3).

Приведенные выражения соответствуют имеющимся экспериментальным данным для исследуемых материалов с коэффициентом корреляции не ниже 0,95 и использованы при уточнении математической модели с целью повышения точности получаемых результатов расчетов.

Таблица 1

Значения коэффициентов поглощения и плотности исследуемых материалов при температуре 300 К

Материал подложки	Коэффициент поглощения	Плотность, кг/м ³
GaAs	0,25	7 390
Ge	0,2	5 330
InAs	0,12	5 670
Si	0,2	2 330
InSb	0,72	5 777
Cd _x Hg _{1-x} Te	0,28	7 393

Таблица 2

Выражения, описывающие зависимости удельной теплоемкости исследуемых материалов от температуры

Материал подложки	Удельная теплоемкость, Дж/(кг · К)
GaAs	$10^{-7} T^5 - 32 \cdot 10^{-7} T^4 + 15 \cdot 10^{-4} T^3 - 0,23 T^2 + 53 T + 151,22 \cdot 10^3$
Ge	$7,99 \ln T - 177,7$
InAs	$67,2 \cdot 10 \ln T - 136,6$
Si	$10^{-7} T^4 + 42 \cdot 10^{-7} T^3 - 6,12 \cdot 10^{-3} T^2 + 3,9 T - 76,3$
InSb	$54,476 \ln T - 109,73$
Cd _x Hg _{1-x} Te	$0,058 T(x, t)^* + 149,76$

*Наличие параметров (x, t) подчеркивает в данном случае зависимость температуры не только от времени t , но и от концентрации x атомов кадмия.

Таблица 3

Выражения, описывающие зависимости коэффициента теплопроводности исследуемых материалов от температуры

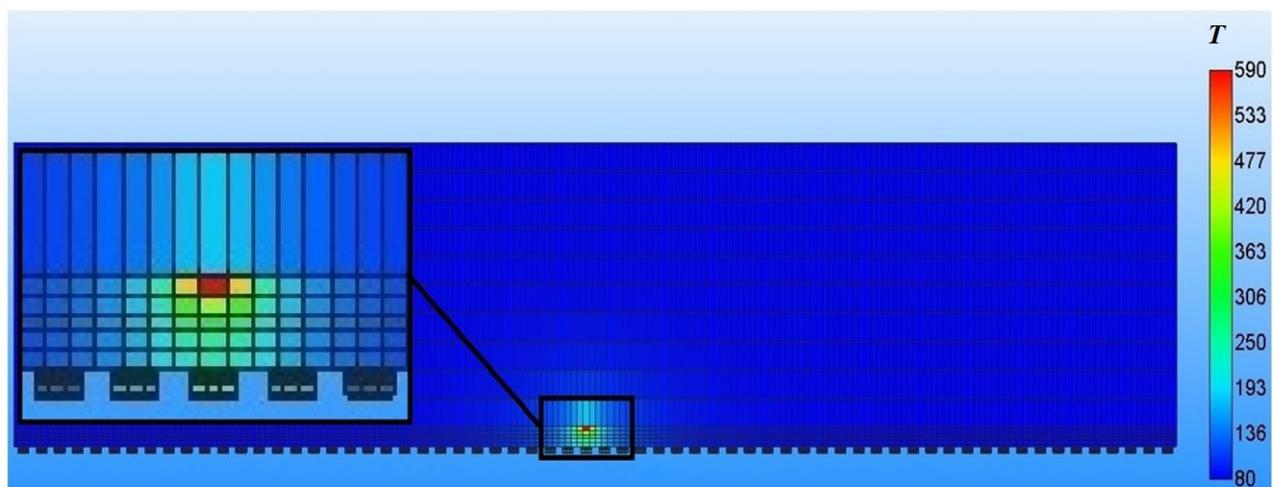
Материал подложки	Коэффициент теплопроводности, Вт/(м · К)
GaAs	$15,4 \cdot 10^{-11} T^2 - 55 \cdot 10^{-15} T^3 - 12,3 \cdot 10^{-9} + 37 \cdot 10^{-6}$
Ge	$78,1 \cdot 10^{-5} T^{-1,25}$
InAs	$77 706,4 \cdot T^{-1,38}$
Si	$96,7 \cdot 10^{-4} T^{-1,49}$
InSb	$635,28 T^{-1,42}$
Cd _x Hg _{1-x} Te	$7 \cdot 10^{-5} T^2 - 0,0872 T + 33,859$

Результаты расчетов и их анализ

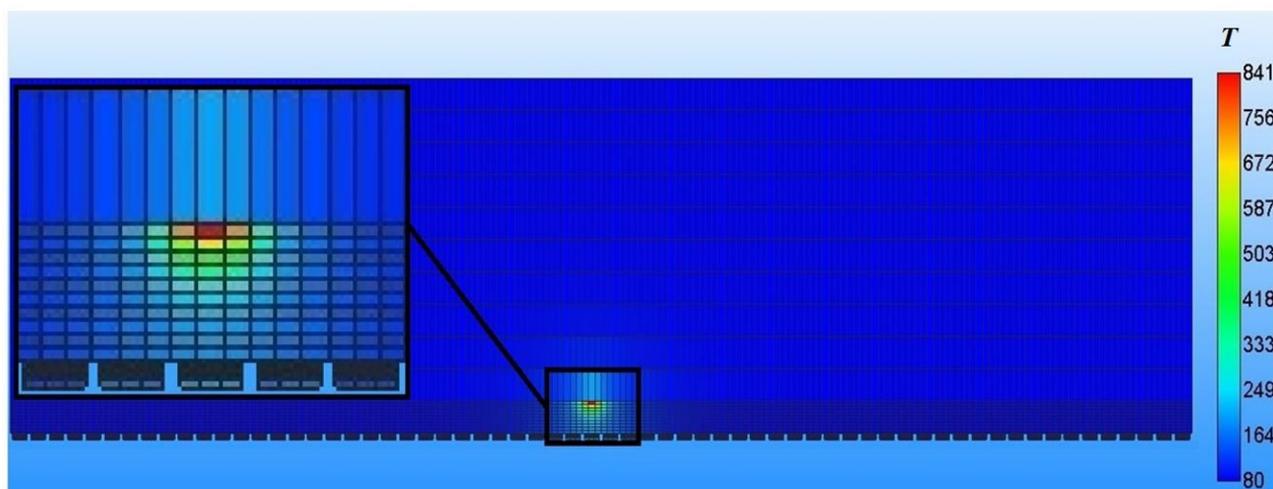
В результате проведения расчетов с использованием пакета программ инженерного анализа и суперкомпьютерного моделирования "Логос" получены графические представления тепловых полей, сформировавшихся в МФП в результате воздействия ЛИ. Примеры для кремниевой подложки показаны на рис. 2, 3. Также получены зависимости температуры для полупроводниковых материалов исследуемых МФП на основе InSb и $Cd_xHg_{1-x}Te$ (рис. 4–6).

В результате анализа зависимостей, показанных на рис. 4–6, установлено следующее:

- зависимость температуры фоточувствительного слоя от времени воздействия ЛИ (времени нагрева) описывается логарифмической функцией;
- при одинаковых уровнях воздействия МФП на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$ получает больший нагрев, что обусловлено большим значением коэффициента теплопроводности тройного соединения и меньшим значением теплоемкости;
- материал подложки вносит существенный вклад в нагрев фоточувствительного слоя при воздействии ЛИ, что в большей степени обусловлено удельной теплоемкостью этого материала;

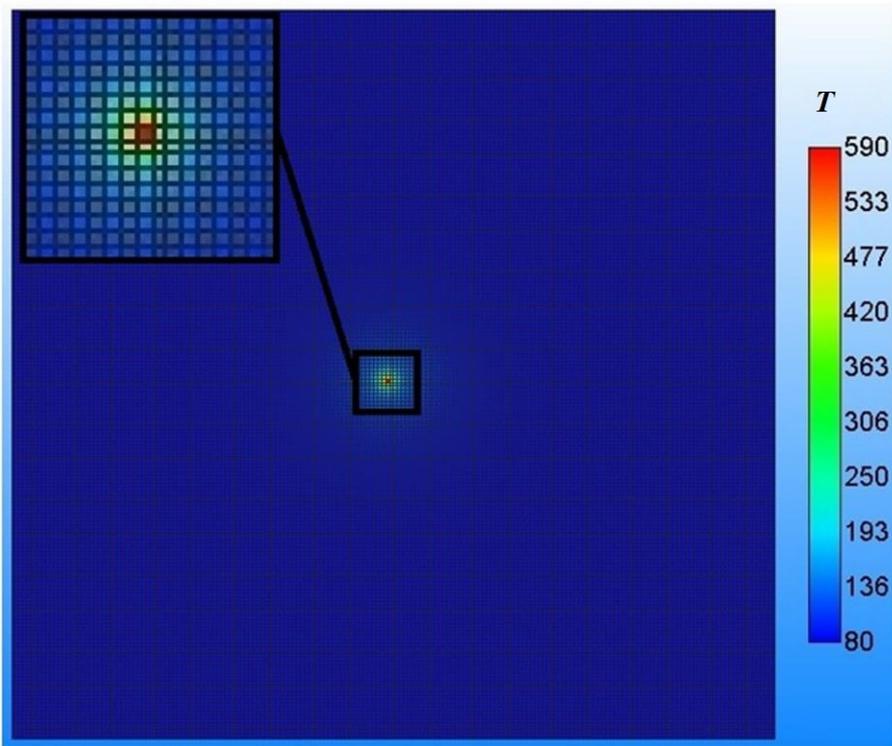


a

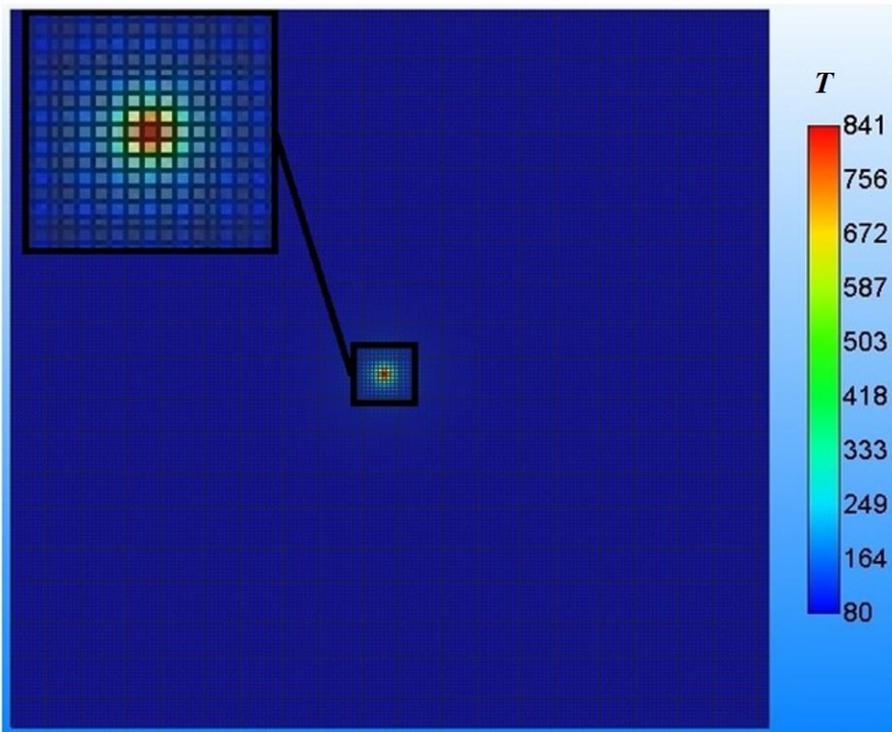


б

Рис. 2. Термограмма результата взаимодействия интенсивного ЛИ с МФП на основе InSb (*a*) и $Cd_xHg_{1-x}Te$ (*б*). Вид сбоку



a



б

Рис. 3. Термограмма результата взаимодействия интенсивного ЛИ с МФП на основе InSb (*a*) и Cd_xHg_{1-x}Te (*б*). Вид сверху

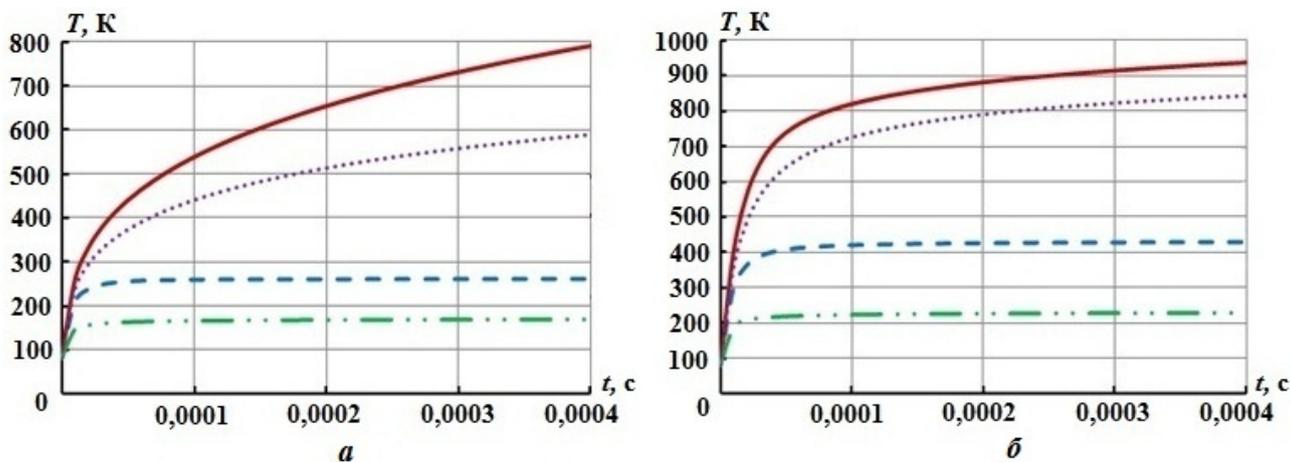


Рис. 4. Зависимости температуры нагреваемого ЧЭ от времени воздействия ЛИ для МФП на основе InSb (а) и $Cd_xHg_{1-x}Te$ (б): — — GaAs; — — Ge; — · — InAs; ····· — Si

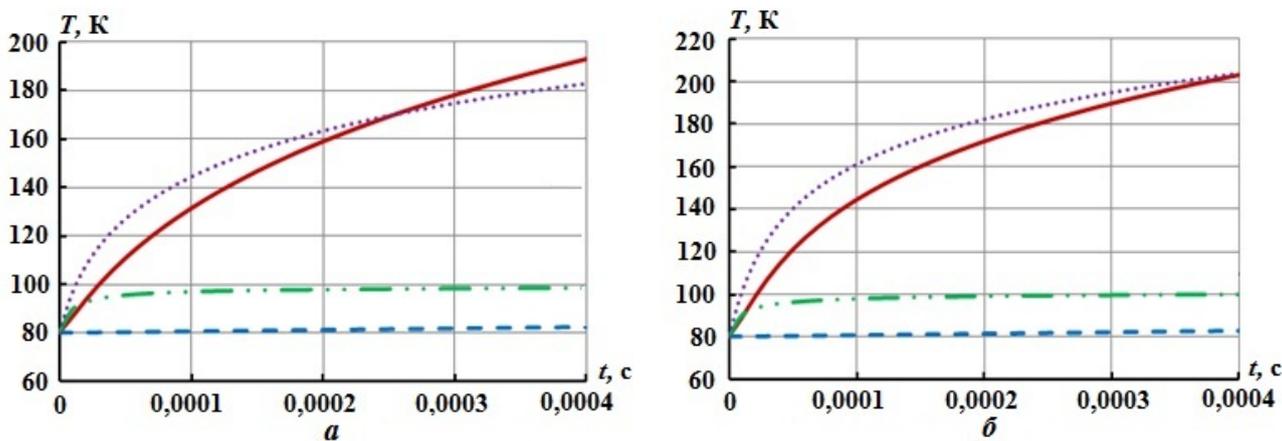


Рис. 5. Зависимости температуры подложки непосредственно над нагреваемым ЧЭ от времени воздействия ЛИ для МФП на основе InSb (а) и $Cd_xHg_{1-x}Te$ (б): — — GaAs; — — Ge; — · — InAs; ····· — Si

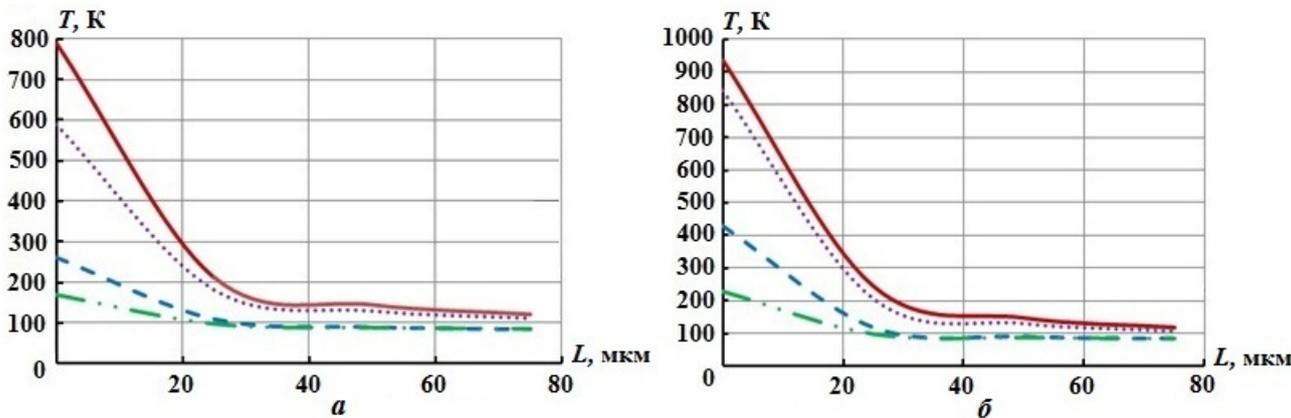


Рис. 6. Зависимости температуры фоточувствительного материала от расстояния до места воздействия ЛИ на МФП на основе InSb (а) и $Cd_xHg_{1-x}Te$ (б): — — GaAs; — — Ge; — · — InAs; ····· — Si

- характер зависимости нагрева фоточувствительного слоя от времени воздействия для различных подложек не зависит от материала, на основе которого изготовлен МФП;
- тепловая волна от места воздействия ЛИ на МФП быстрее распространяется по фоточувствительному слою на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ независимо от материала подложки, что объясняется большим значением коэффициента теплопроводности по сравнению с InSb.

Заключение

В результате проведенных исследований установлено, что основной вклад в процесс нагрева фоточувствительного слоя МФП в процессе его взаимодействия с интенсивным ЛИ определяется значениями теплофизических характеристик материала подложки.

С помощью разработанных в ходе настоящих исследований расчетных моделей возможна оценка оптической стойкости InSb и $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ МФП, а также обоснование целесообразности использования конкретных материалов в качестве подложек исходя из условий их применения. Возможности пакета программ "Логос" позволяют разработать другие аналогичные модели фотоприемников на основе перспективных полупроводниковых материалов с любой топологией для исследования процессов их функционирования в различных условиях взаимодействия с интенсивным ЛИ.

Направлением дальнейших исследований является моделирование взаимодействия интенсивного ЛИ с многодиапазонными МФП на квантовых ямах с целью определения влияния особенностей топологии матрицы на растекание тепла.

Список литературы

1. *Средин В. Г., Сахаров М. В.* Математическая модель воздействия лазерного излучения на многослойную полупроводниковую фоточувствительную структуру // Прикладная физика. 2011. № 2. С. 5–11.
Sredin V. G., Sakharov M. V. Matematicheskaya model vozdeystviya lazernogo izlucheniya na mnogosloynnuyu poluprovodnikovuyu fotochuvstvitelnuyu strukturu // Prikladnaya fizika. 2011. № 2. S. 5–11.
2. *Сахаров М. В., Средин В. Г., Астраускас Й. И., Васильева Ю. В.* Трехмерная математическая модель воздействия лазерного излучения на матричный фотоприемник на основе $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ // Известия вузов. Физика. Томский ГУ. 2013. Т. 56, № 9–2. С. 98–101.
Sakharov M. V., Sredin V. G., Astrauskas Y. I., Vasilyeva Yu. V. Tryekhmernaya matematicheskaya model vozdeystviya lazernogo izlucheniya na matrichnyy fotopriyemnik na osnove $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ // Izvestiya vuzov. Fizika. Tomskiy GU. 2013. T. 56, № 9–2. S. 98–101.
3. *Сахаров М. В., Средин В. Г., Конради Д. С.* Трехмерная модель нагрева многослойного матричного фотоприемника в поле интенсивного лазерного излучения // Прикладная физика. 2018. № 6. С. 43–48.
Sakharov M. V., Sredin V. G., Konradi D. S. Tryekhmernaya model nagreva mnogosloynnogo matrichnogo fotopriyemnika v pole intensivnogo lazernogo izlucheniya // Prikladnaya fizika. 2018. № 6. S. 43–48.
4. *Сахаров М. В., Средин В. Г., Запонов А. Э., Конради Д. С.* Имитационное моделирование воздействия лазерного излучения на InSb матричный фотоприемник в пакете программ ЛОГОС // Известия вузов. Физика. Томский ГУ. 2019. Т. 62, № 9. С. 117–122.
Sakharov M. V., Sredin V. G., Zaponov A. E., Konradi D. S. Imitatsionnoe modelirovanie vozdeystviya lazernogo izlucheniya na InSb matrichnyy fotopriyemnik v pakete programm LOGOS // Izvestiya vuzov. Fizika. Tomskiy GU. 2019. T. 62, № 9. S. 117–122.
5. *Пономаренко В. П.* Квантовая фотосенсорика. М.: АО "НПО "Орион", 2018.
Ponomarenko V. P. Kvantovaya fotosensorika. M.: AO "NPO "Orion", 2018.
6. ФГБУН "Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова". <https://www.isp.nsc.ru>.
FGBUN "Institut fiziki poluprovodnikov im. A. V. Rzhanova". <https://www.isp.nsc.ru>.

7. *Тарасов В. В., Якушенко Ю. Г.* Инфракрасные системы "смотрящего типа". М.: Логос, 2004.
Tarasov V. V., Yakushenko Yu. G. Infrakrasnye sistemy "smotryashchego tipa". М.: Logos, 2004.
8. Пакет программ инженерного анализа и суперкомпьютерного моделирования "Логос".
<http://logos.vniief.ru>.
Paket programm inzhenerного analiza i superkompyuternogo modelirovaniya "Logos".
<http://logos.vniief.ru>.
9. Тематическая база данных перспективных полупроводниковых материалов. <http://ioffe.ru>.
Tematicheskaya baza dannykh perspektivnykh poluprovodnikovyykh materialov. <http://ioffe.ru>.

Статья поступила в редакцию 25.06.2021.

УДК 681.3

СИСТЕМА ПРОСТРАНСТВЕННО-ГРУППОВОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПОТОКОВ

И. А. Мартынова, А. П. Мартынов, Д. Б. Николаев, В. Н. Фомченко
(ОИВТ РАН, г. Москва; ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Развитие сложных вычислительных комплексов для классов задач, использующих параллельные вычисления, предопределило необходимость формирования новых подходов к управлению процессами обработки данных, что и является предметом данной статьи. Работа с многомерными динамическими структурами характеризуется повышенными требованиями к достоверности выполняемых операций, быстродействию и прозрачности управления вычислениями. Предложенная авторами функционально-алгоритмическая модель пространственно-группового перемещения предназначена для построения траекторий обработки данных и траекторий их верификации при заданных параметрах входных и выходных информационных массивов. Модель не накладывает ограничений на обрабатываемые данные и является основой универсального инструментария для описания и анализа процессов информационного взаимодействия в сложных динамических системах, использующих параллельную обработку данных. В качестве примера применения данной модели и соответствующей ей системы пространственно-группового преобразования информационных потоков представлены результаты анализа однопоточных информационно-криптографических систем.

Ключевые слова: информационная система, многомерные множества, преобразование данных, универсальная система управления, криптографические функции.

Введение

Развитие фундаментальных и прикладных наук в настоящее время невозможно без использования значительных вычислительных ресурсов. При этом требования к точности и скорости решения задач, возникающих в процессе исследования, постоянно возрастают. Одним из основных способов ускорения вычислений является создание параллельных вычислительных методов, систем и технологий.

Распараллеливание вычислительного процесса невозможно без представления о методах решения поставленных задач, архитектуре параллельных вычислительных систем, а также математическом обеспечении, которое имеют эти системы. Важно изучать, а при необходимости и создавать классы методов, удобных для реализации в параллельной системе и имеющих гибко адаптируемую алгоритмическую структуру.

Адаптируемая алгоритмическая структура позволяет увеличивать вариативность примене-

ния вычислительных методов для обработки информационных потоков и упрощать управление процессами обработки данных.

Использование такой структуры при реализации модулей обработки данных, представляющих собой сложные динамические системы, позволяет сформировать универсальную систему управления многомерными множествами. Особенно это актуально для решения задач верификации вычислительных процедур, требующих контроля вычислений по нескольким независимым траекториям внутри единого вычислительного модуля. Количество используемых параметров и траекторий контроля определяется сложностью и составом вычислительных модулей и резко возрастает при увеличении размерности входных данных.

Таким образом, разработка системы, позволяющей реализовать единую структуру управления многомерными вычислительными объектами с высокой степенью вариативности и адаптацией к решаемым задачам, является актуальной.

Она направлена на расширение понятийного аппарата исследования сложных процессов взаимодействия, протекающих при параллельной обработке информационных массивов в режиме реального времени и с использованием специализированных и суперЭВМ, обладающих большим быстродействием.

Наиболее наглядно процесс обработки информационных потоков и функциональные процедуры управления данными процессами могут быть показаны на примере систем обработки данных в каналах связи, в том числе криптографических систем.

Криптографические функции и криптоалгоритмы

Основными функциями в криптографических системах являются подстановки и перестановки, обеспечивающие рассеивание и перемешивание информации. Их изучение проводится в двух направлениях: анализ и систематизация процессов, происходящих внутри подстановок и перестановок, и анализ базовых криптографических функций, построенных на их основе. На основе базовых криптографических функций можно строить криптографические системы любой сложности. Более того, криптографические функции можно комбинировать различными способами для получения новой криптографической системы с определенными, заранее заданными, параметрами [1, 2].

Какой бы сложной криптографическая система ни была, в процессе проведения криптографического анализа ее можно разложить на ряд последовательно выполняемых функций

$$f(x) = f_0(x), f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x). \quad (1)$$

Это относится к подавляющему большинству известных криптографических функций и алгоритмов, например таких, как криптографические алгоритмы "Люцифер", DES, AES, алгоритм по ГОСТ 28147-89 и т. д. [1, 2]. Криптоалгоритм "Люцифер" напрямую состоит из чередующихся подстановок и перестановок, что соответствует выражению (1). Покажем это также на примере широко известных криптографических алгоритмов DES и ГОСТ 28147-89, являющихся каскадными (композиционными) шифрами, основанными на преобразовании Фейстеля [1, 2].

Криптоалгоритм DES можно представить в виде 16 одинаковых последовательно обрабатываемых блоков C_i (преобразований Фейстеля), приведенных на рис. 1 (K_i — ключевые последовательности). В нем циклы для прямого и обратного преобразований имеют одинаковую структуру. Схема преобразования $f(K_i, R_i)$ показана на рис. 2, где R_i — блок входной информации; IP — первичная перестановка; P — конечная перестановка; S_i — нелинейное преобразование (подстановка).

Алгоритм ГОСТ 28147-89, как и криптоалгоритм DES, можно представить в виде последовательно обрабатываемых 32 одинаковых блоков, показанных на рис. 3, где C_i — повторяющийся цикл (преобразование Фейстеля для ГОСТ 28147-89).

В ГОСТ 28147-89 циклы прямого и обратного преобразований имеют одинаковую структуру. Схема преобразования $f(K_i, R_i)$ для ГОСТ 28147-89 показана на рис. 4.

Появление суперЭВМ, развитие методов параллельных вычислений, новые алгоритмы фак-

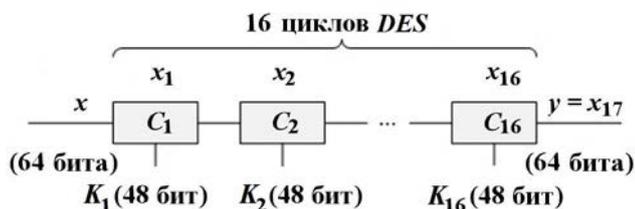


Рис. 1. Каскадный криптоалгоритм DES

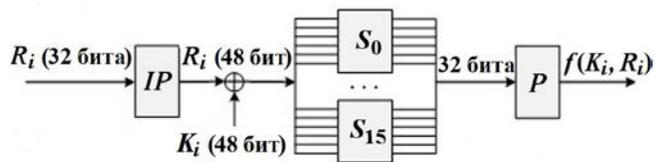


Рис. 2. Преобразование $f(K_i, R_i)$ криптоалгоритма DES

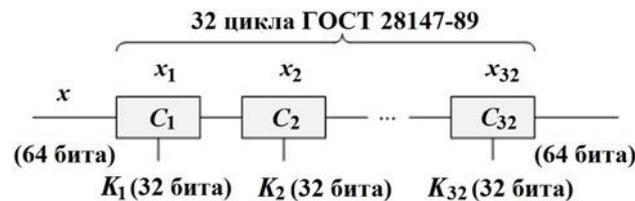


Рис. 3. Каскадный криптоалгоритм ГОСТ 28147-89

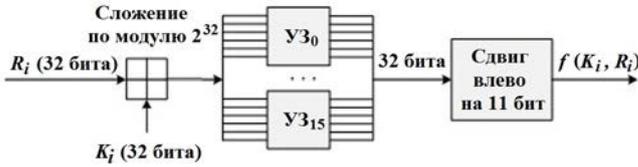


Рис. 4. Преобразование $f(K_i, R_i)$ криптоалгоритма ГОСТ 28147-89

торизации чисел, перспективы создания квантовых компьютеров и теория несепарабельных состояний многокубитных квантовых систем [3, 4] ставят под угрозу большинство классических криптографических систем, криптосистем на базе односторонних функций (типа RSA, Эль-Гамала и др.), а также значительное количество протоколов распределения ключей [5, 6]. Все это приводит к необходимости поиска и создания новых криптографических функций и алгоритмов [1, 2, 7–10]. Перспективными в данном направлении являются исследования криптографических операций, алгоритмов преобразования информации на базе пространственно-группового перемещения функциональных элементов упорядоченных множеств [11–14].

Пространственно-групповое перемещение элементов произвольного конечного множества

Одномерное множество A_x и способы задания ключа. Рассмотрим некоторое одномерное конечное множество

$$A_x = \{a_0, a_1, a_2, \dots, a_n\}.$$

Количество элементов множества равно n (мощность множества).

Данное множество можно представить как вектор или матрицу, состоящую из одной строки:

$$A = (a_x)_{x=0, \overline{n}} = (a_0, a_1, a_2, \dots, a_n).$$

Опираясь на результаты исследований, приведенные в работах [7, 8, 10, 15], представим данное множество как циклическую группу, для которой определена операция циклического сдвига влево. Пространственно-групповое перемещение элементов множества осуществляется в одной строке по оси OX . При циклическом сдвиге на один шаг все элементы множества сдвигаются на одну позицию влево, a_0 переходит в конец множества (рис. 5).

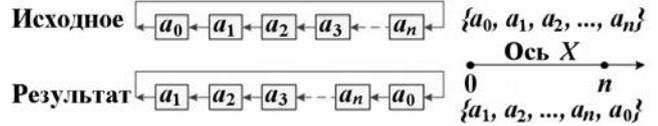


Рис. 5. Циклический сдвиг влево элементов множества A_x в графическом представлении

С точки зрения теории графов, циклическая группа множества A_x относительно операции циклического сдвига образует полный граф, поскольку все его вершины (элементы множества) связаны между собой линиями (рис. 6).

Относительно порядка следования элементов множества граф уже нельзя назвать полным, однако линии такого частичного графа образуют полную цепь. Головой цепи до циклического сдвига на один шаг является вершина a_0 , после сдвига — a_1 . Хвостом цепи до циклического сдвига на один шаг является вершина a_n , после сдвига — a_0 .

Однако теория графов является менее удобной для анализа пространственно-группового перемещения элементов множества (особенно при значительном увеличении его мощности и размерности), поэтому в дальнейшем возьмем за основу матричное представление множества как наиболее наглядное и компактное [7, 8, 10]. Циклический сдвиг для одномерного множества будем трактовать как циклическую перестановку элементов множества по оси OX или как циклическую перестановку элементов матрицы в строке. Количество шагов сдвига может быть произвольным: от 0 до n . Количество вариантов перестановки элементов множества равно n .

Перемещение элементов (ключ) можно задавать следующими способами:

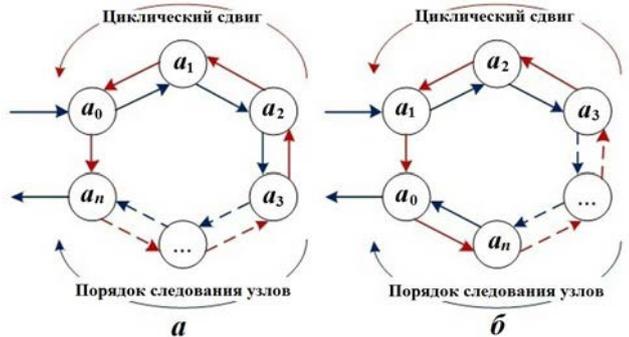


Рис. 6. Полный граф (а) и полная цепь (б) множества A_x

- 1) выбрать некоторый элемент множества, например a_2 , и задать число шагов сдвига, например 3, — ключ в этом случае будет иметь два аргумента: $K(a_2, 3)$;
- 2) выбрать некоторый элемент множества, например a_3 , и задать элемент множества, на место которого необходимо его переместить, например a_1 , — ключ в этом случае будет содержать также два аргумента: $K(a_3, a_1)$;
- 3) выбрать заранее элемент, до которого будет осуществляться сдвиг, например a_0 (эта операция вводится в алгоритм по умолчанию). Ключ в этом случае можно задавать номером элемента, который необходимо переместить в выбранную точку: если выбрать элемент a_3 , ключ можно представить как $K(a_3)$ или просто $K(3)$.

Последний вариант является наиболее предпочтительным, так как длина ключа* является минимальной. В дальнейшем остановимся на этом варианте. В этом случае число шагов сдвига равно номеру элемента множества. Для множества A_x возможные варианты циклического сдвига влево приведены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты циклического сдвига влево для множества $A_x = \{a_0, a_1, a_2, a_3, \dots, a_n\}$

Ключ	Результат
$K(0)$	$\{a_0, a_1, a_2, a_3, \dots, a_n\}$
$K(1)$	$\{a_1, a_2, a_3, \dots, a_n, a_0\}$
$K(2)$	$\{a_2, a_3, \dots, a_n, a_0, a_1\}$
$K(3)$	$\{a_3, \dots, a_n, a_0, a_1, a_2\}$
...	...
$K(n)$	$\{a_n, a_0, a_1, a_2, a_3, \dots\}$

Двумерное множество A_{yx} . Рассмотрим двумерное конечное множество A_{yx} , $y = 0 \dots m$, $x = 0 \dots n$.

Данное множество можно представить как матрицу, состоящую из строк y и столбцов x :

$$A = (a_{yx})_{\substack{y=0, \dots, m \\ x=0, \dots, n}} = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & \dots & a_{0n} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ a_{m0} & a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

Количество элементов множества (мощность) равно $m \times n$.

Объединим элементы данного двумерного множества в циклические группы по строкам и столбцам. Элементами данного множества A_{yx} будут уже не отдельные элементы, а группы элементов в строках и столбцах. Определим для этих групп операции циклического сдвига влево.

Пространственно-групповое перемещение групп элементов данного двумерного множества (циклический сдвиг) можно осуществлять по двум осям — OY и OX , что отражено на рис. 7.

Число шагов сдвигов может быть произвольным: по строкам от 0 до m , по столбцам от 0 до n . Количество вариантов перестановки элементов множества равно $m \times n$.

Пространственно-групповое перемещение групп элементов множества A_{yx} для $y = 0 \dots m$, $x = 0 \dots n$ и ключа $K(a_{12})$ показано в табл. 2.

Трехмерное множество A_{zyx} . Рассмотрим трехмерное множество A_{zyx} , $z = 0 \dots l$, $y = 0 \dots m$, $x = 0 \dots n$. Количество элементов множества (мощность) равно $l \times m \times n$.

Определим группы элементов, составляющих циклические группы двумерных матриц, в которых выполняются циклические сдвиги по столбцам и строкам множества. Помимо строк и столбцов матриц, осуществляется также циклический сдвиг (перестановка) матриц в целом.

Данное множество можно представить как z -матрицы A_{yx} , состоящие из строк y и столбцов x и аналогичные матрицы [11]. Число матриц равно l .

Циклический сдвиг элементов данного множества в целом можно осуществлять по трем осям: OZ , OY , OX . Циклический сдвиг по оси OZ

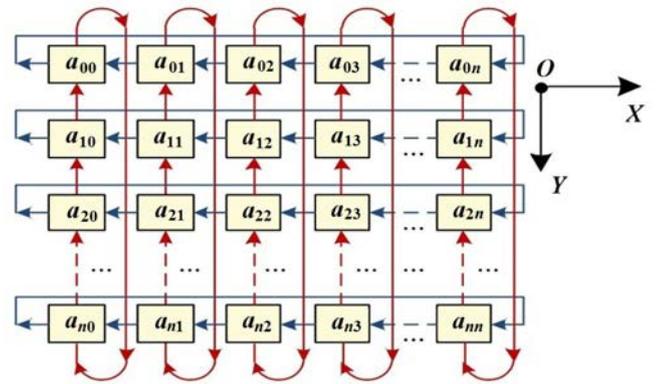


Рис. 7. Циклические сдвиги групп элементов множества A_{yx}

* Длина ключа — это объем информации, используемой в криптографическом ключе, измеряемый в битах.

Таблица 2

Пространственно-групповое перемещение групп элементов двумерного множества

Исходное состояние	Сдвиг по оси Y ($y = 1$)	Сдвиг по оси X ($x = 2$) (результат)
$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & \dots & a_{0n} \\ a_{10} & a_{11} & \mathbf{a_{12}} & \dots & a_{1n} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ a_{n0} & a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} a_{10} & a_{11} & \mathbf{a_{12}} & \dots & a_{1n} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ a_{n0} & a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \\ a_{00} & a_{01} & a_{02} & \dots & a_{0n} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \mathbf{a_{12}} & \dots & a_{1n} & a_{10} & a_{11} \\ a_{22} & \dots & a_{2n} & a_{20} & a_{21} \\ \dots & \ddots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n2} & \dots & a_{nn} & a_{n0} & a_{n1} \\ a_{02} & \dots & a_{0n} & a_{00} & a_{01} \end{pmatrix}$

осуществляется циклическим сдвигом матриц. Циклические сдвиги по осям OY , OX осуществляются внутри каждой матрицы (рис. 8). Перемещения по оси OZ показаны в табл. 3.

Пространственно-групповое перемещение групп элементов множества A_{zyx} , для $z = 0 \dots n$, $y = 0 \dots n$, $x = 0 \dots n$ и ключа $K(a_{212})$ можно представить, как показано на рис. 9.

Процесс преобразования данного множества по ключу представляет собой последовательное циклическое изменение его элементов (объединенных в группы) сначала по оси OZ , затем по оси OY , а затем еще по оси OX . После окончания каждого процесса циклического изменения множество превращается в пространственную фигуру, трансформируемую при каждой перестановке элементов. Последовательность операций в общем случае может быть произвольной: ZYX , ZXY , XYZ и т. д.

Варианты увеличения размерности множества. Увеличение размерности множества можно продолжить, выбирая множество, в котором изменение его параметров происходит не по трем, а по четырем и более направлениям (осям) [3, 4]. Введение четвертого и более параметров множества (время не учитываем) трудно представить с использованием традиционной геометрии. Существует два варианта введения направлений (осей).

Вариант 1. Переходим условно в пространство, которое имеет больше чем три измерения. Это можно записать следующим образом:

$$A_{vzyx} \text{ при } v = 0 \dots k, z = 0 \dots l, \\ y = 0 \dots m, x = 0 \dots n; \\ A_{wvzyx} \text{ при } w = 0 \dots p, v = 0 \dots k, \\ z = 0 \dots l, y = 0 \dots m, x = 0 \dots n; \\ \text{и т. д.}$$

Таблица 3

Пространственно-групповое перемещение по оси OZ групп элементов трехмерного множества

Сдвиг	Результат
$z = 0$	$\begin{pmatrix} a_{000} & a_{001} & a_{002} & \dots & a_{00n} \\ a_{010} & a_{011} & a_{012} & \dots & a_{01n} \\ a_{020} & a_{021} & a_{022} & \dots & a_{02n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ a_{0n0} & a_{0n1} & a_{0n2} & \dots & a_{0nn} \end{pmatrix}$
$z = 1$	$\begin{pmatrix} a_{100} & a_{101} & a_{102} & \dots & a_{10n} \\ a_{110} & a_{111} & a_{112} & \dots & a_{11n} \\ a_{120} & a_{121} & a_{122} & \dots & a_{12n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ a_{1n0} & a_{1n1} & a_{1n2} & \dots & a_{1nn} \end{pmatrix}$
$z = 2$	$\begin{pmatrix} a_{200} & a_{201} & a_{202} & \dots & a_{20n} \\ a_{210} & a_{211} & a_{212} & \dots & a_{21n} \\ a_{220} & a_{221} & a_{222} & \dots & a_{22n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ a_{2n0} & a_{2n1} & a_{2n2} & \dots & a_{2nn} \end{pmatrix}$
...	...
$z = n$	$\begin{pmatrix} a_{n00} & a_{n01} & a_{n02} & \dots & a_{n0n} \\ a_{n10} & a_{n11} & a_{n12} & \dots & a_{n1n} \\ a_{n20} & a_{n21} & a_{n22} & \dots & a_{n2n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ a_{nn0} & a_{nn1} & a_{nn2} & \dots & a_{nnn} \end{pmatrix}$

Вариант 2. Используем операцию подстановки, широко применяемую в алгебре и криптографии, например $B = A_{xyz}$ при $z = 0 \dots l$, $y = 0 \dots m$, $x = 0 \dots n$. В этом случае используется трехмерное измерение, и весь процесс можно продолжить по аналогии с множествами A ,

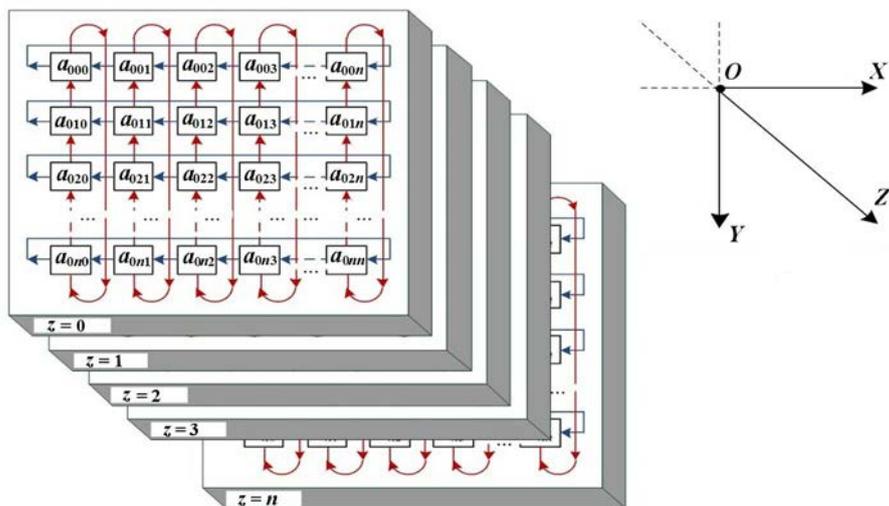


Рис. 8. Циклические сдвиги внутри матриц групп элементов множества A_{zyx}

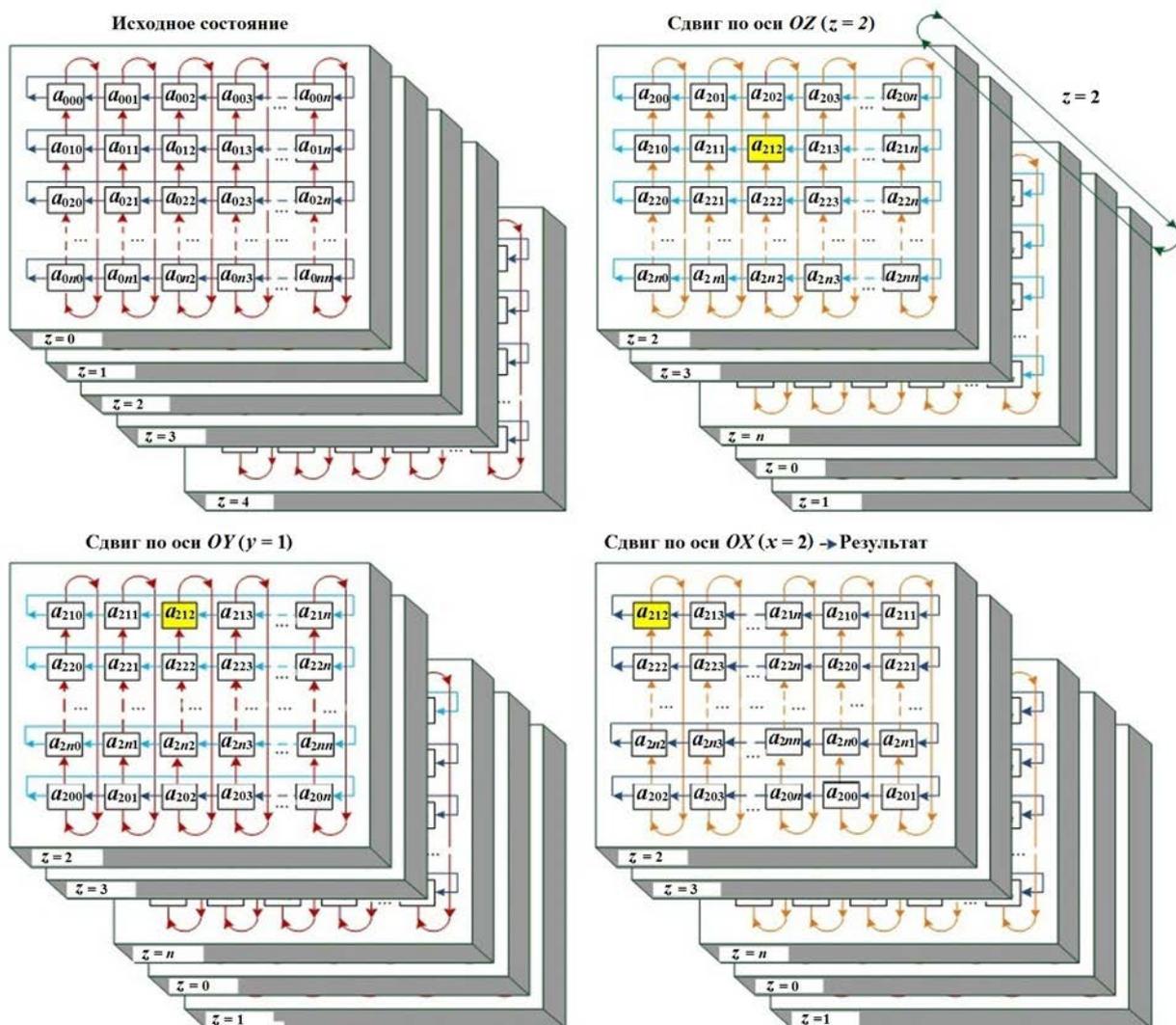


Рис. 9. Пример пространственно-группового перемещения элементов множества A_{zyx}

получая B_x, B_{xy}, B_{xyz} . По каждой оси максимальный параметр также может быть своим. Процесс подстановки можно бесконечно продолжать в двух направлениях как в сторону увеличения размерности множества, так и в сторону его уменьшения.

Опираясь на вышеизложенное, можно отметить следующее:

- 1) используя для пространственно-группового перемещения элементов множества их представление и объединение в циклические группы, определяя для них операцию циклического сдвига влево, можно получить сравнительно простой способ перестановки всех элементов множества по ключу малой длины, в котором количество возможных ключей равно количеству всех возможных вариантов;
- 2) операцию циклического сдвига можно выполнять и вправо — суть преобразования от этого не изменится, изменится только порядок расположения элементов множества на каждом шаге;
- 3) операции перестановки при пространственно-групповом перемещении элементов множества просты и прозрачны, а их количество значительно превышает длину ключа. Это свойство становится наиболее существенным при увеличении мощности множества;
- 4) способ пространственно-группового перемещения элементов множества по заданному ключу не зависит от природы элементов множества, и его можно распространить на пространственно-групповое перемещение криптографических функций.

Пространственно-групповое перемещение криптографических функций

Одномерное множество криптографических функций $F(A_x)$. Выберем в качестве отдельных элементов одномерного множества некоторые криптографические функции

$$F(A_x) = \{f(a_0), f(a_1), f(a_2), \dots, f(a_n)\}.$$

Никаких особых требований к свойствам криптографических функций не предъявляется, кроме того, что результирующая функция должна представлять собой последовательное произведение — выполнение функций в том порядке,

в котором они записаны, т. е. криптографические функции должны быть некоммутативны. В этом случае любая перестановка функций даст новую результирующую криптографическую функцию, соответствующую требованиям, изложенным в работе К. Шеннона [16].

Модель криптографической системы одномерного множества криптографических функций $F(A_x)$ показана на рис. 10. В ней предполагается, что сначала выполняется циклический сдвиг функций по ключу (верхние стрелки), а затем — преобразование исходного сообщения в криптограмму (нижние стрелки) в зависимости от конкретной криптографической системы. Преобразование криптограммы в исходное сообщение производится в обратном направлении при том же состоянии криптографической системы. Это традиционные операции в криптографии, и на данном этапе никаких особых преимуществ от такой интерпретации криптографических преобразований не прослеживается, так как традиционно идет преобразование одного исходного сообщения. Отличие заключается только в том, что ключ в данном случае применяется не к конкретной функции, а к порядку следования самих функций. На ключевые системы отдельных функций ограничений не накладывается.



Рис. 10. Модель криптографической системы одномерного множества криптографических функций

Двумерное множество криптографических функций $F(A_{yx})$. Модель криптографической системы двумерного множества криптографических функций $F(A_{yx})$ для $y = 0, \dots, n$; $x = 0, \dots, n$ показана на рис. 11. В ней предполагается, что сначала выполняется циклический сдвиг функций по ключу, а затем — преобразование потока исходных сообщений в криптограммы. Преобразование криптограмм в исходные сообщения производится в обратном направлении при том же состоянии криптографической системы.

Рассматривая модель криптографической системы двумерного множества криптографических функций, можно выделить ряд новых преимуществ.

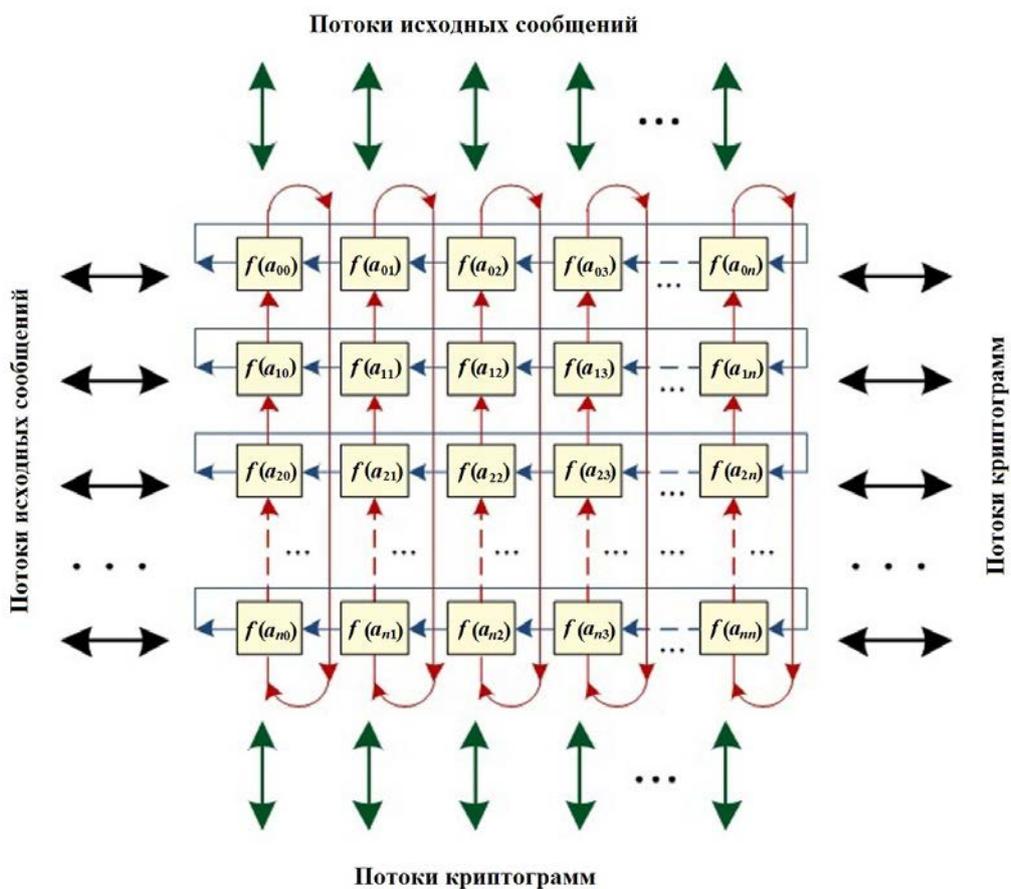


Рис. 11. Модель криптографической системы двумерного множества криптографических функций

Появилась возможность преобразования не одного исходного сообщения, а двух потоков исходных сообщений, что значительно усложняет задачу злоумышленника. Один поток направлен по оси OY , другой поток — по оси OX . При этом обратное преобразование потоков исходных сообщений можно производить как по оси OY , так и по оси OX в обратном, по отношению к прямому, направлению. Если $y = 0 \dots t$, $x = 0 \dots n$, то общее количество элементов множества будет равно $t \times n$.

Здесь необходимо отметить появление важного свойства пространственно-группового перемещения криптографических функций: возможность выполнения параллельных операций не только в процессе криптографического анализа, но и в процессе криптографического преобразования информации (не одного исходного сообщения, а сразу нескольких потоков исходных сообщений).

Это свойство является удобным применительно к специализированным и суперЭВМ, обладающим большим быстродействием и возможно-

стью выполнения параллельных операций над информационными потоками.

Дополнительно необходимо отметить, что в ряде конкретных случаев в процессе реализации двумерного множества $F(A_{yx})$ и перестановки его элементов по ключу $K(a_{yx})$ реальную перестановку элементов множества можно не производить, а ограничиться лишь их переадресацией в определенных регистрах системы адресации. Это позволит выполнять пространственно-групповое перемещение виртуально и сократить время выполнения операций. Таким образом, в случае криптографических систем становится возможным через несколько шагов уйти от конкретной привязки элементов множества к определенной позиции, что будет сбивать накопленную статистику злоумышленника.

Ключ можно задавать с помощью генератора псевдослучайных последовательностей, обладающего определенными наперед заданными характеристиками. Ключ в зависимости от назначения системы может быть долговременным или выбираться как ключ сеанса. Этот вывод мож-

но распространить на множества криптографических функций $F(A_{zyx})$ любой размерности.

Трехмерное множество криптографических функций $F(A_{zyx})$. Рассмотрим трехмерное множество криптографических функций

$$F(A_{zyx}), z = 0 \dots l, y = 0 \dots m, x = 0 \dots n.$$

Данное множество можно представить как z -матрицы, состоящие из строк y и столбцов x .

Модель криптографической системы трехмерного множества криптографических функций $F(A_{zyx})$ для $l = m = n$ приведена на рис. 12. Эта модель дает еще больше преимуществ разработчику при ее реализации с применением специализированных и суперЭВМ. Она позволяет

производить преобразование потоков информации по всем трем осям: OZ , OY и OX . Их общее количество значительно возрастает, особенно по отношению к длине ключа, что не влияет существенно на общую криптографическую стойкость системы. Таким образом, резко увеличивается возможность выполнения параллельных операций не только в процессе криптографических преобразований потоков информации, но и при обработке и передаче данных в многоуровневых и иерархических информационных системах. Как было отмечено ранее, это очень удобно для реализации на специализированных и суперЭВМ.

При увеличении размерности множества функций количество потоков исходных сообщений и криптограмм резко возрастает при

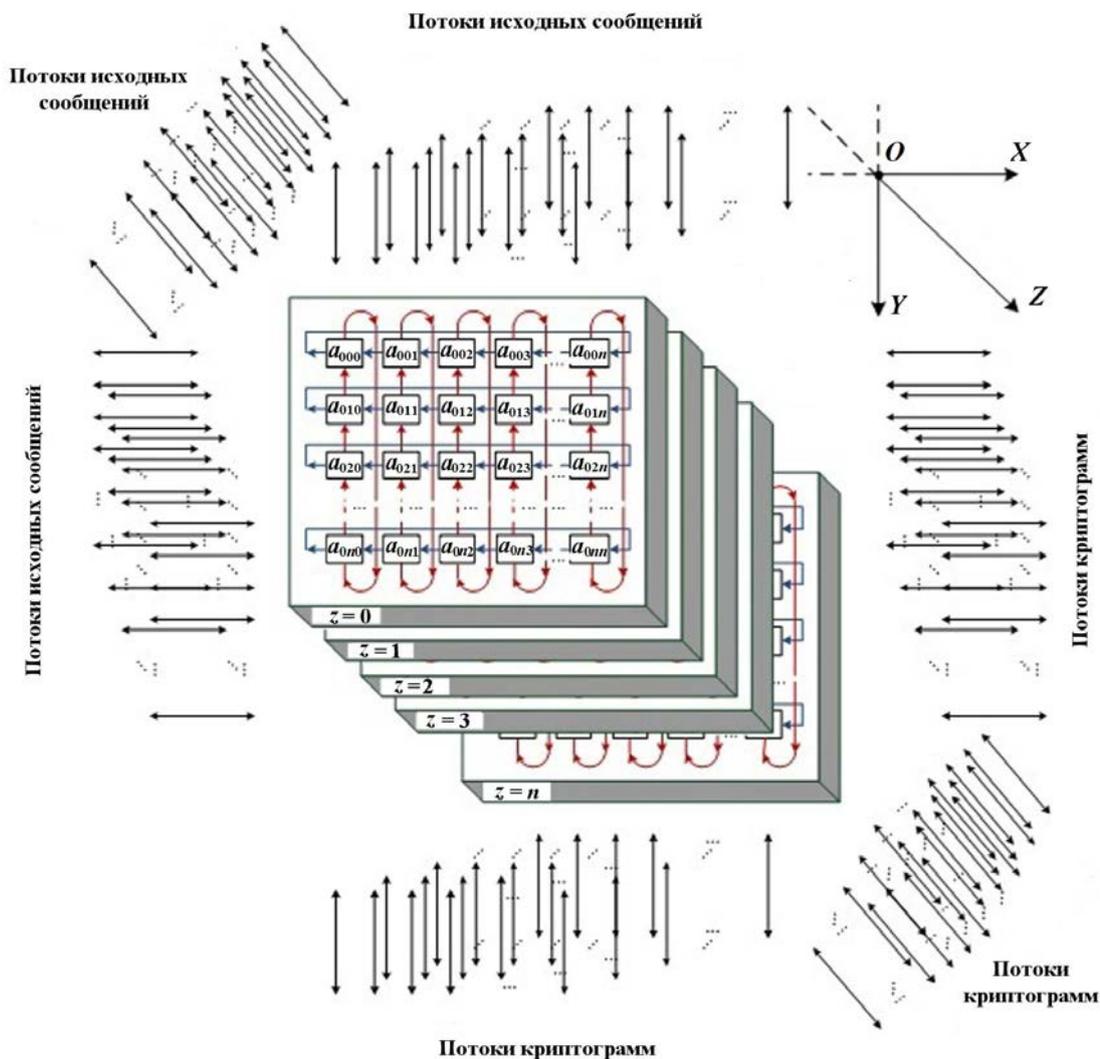


Рис. 12. Модель криптографической системы трехмерного множества криптографических функций

незначительном увеличении длины ключа. Например:

- 1) при $n = m = l = 8$:
 - длина ключа равна $3 + 3 + 3 = 9$ бит;
 - количество потоков по одной оси равно 64;
 - общее количество потоков равно 192;
- 2) при $n = m = l = 16$:
 - длина ключа равна $4 + 4 + 4 = 12$ бит;
 - количество потоков по одной оси равно 256;
 - общее количество потоков равно 768;
- 3) при $n = m = l = 32$:
 - длина ключа равна $5 + 5 + 5 = 15$ бит;
 - количество потоков по одной оси равно 1024;
 - общее количество потоков равно 3072;
- 4) при $n = m = l = 64$:
 - длина ключа равна $6 + 6 + 6 = 18$ бит;
 - количество потоков по одной оси равно 4096;
 - общее количество потоков равно 12288.

Пространственно-групповые модели и ключевая система многопоточного преобразования информационных потоков

Прямое преобразование потоков исходных сообщений и обратное преобразование криптограмм могут быть однонаправленными (ориентированными по одной из осей OZ , OY , OX) (рис. 13) или мультинаправленными (проходить по нескольким осям).

Мультинаправленное преобразование потоков исходных сообщений производится в следующем порядке (рис. 14):

- 1) по оси OX : от входа через плоскость $x = 0$ к выходу через плоскость $x = n$;

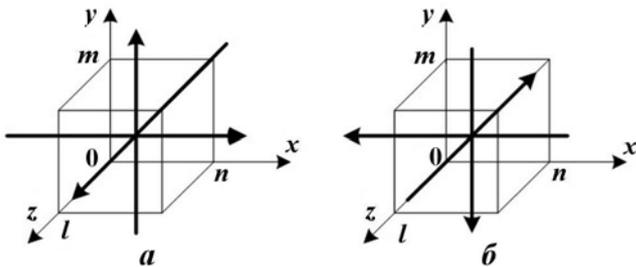


Рис. 13. Однонаправленное прохождение информационных потоков: а – прямое преобразование; б – обратное преобразование

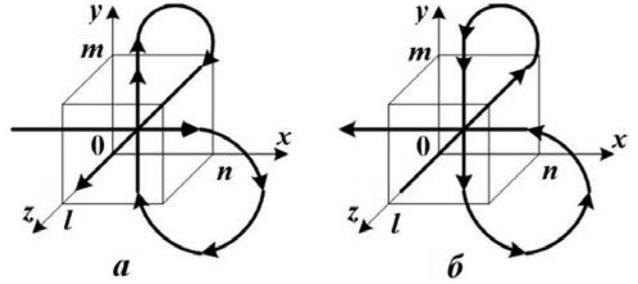


Рис. 14. Мультинаправленное прохождение информационных потоков: а – прямое преобразование; б – обратное преобразование

- 2) по оси OY : от входа через плоскость $y = 0$ к выходу через плоскость $y = m$;
- 3) по оси OZ : от входа через плоскость $z = 0$ к выходу через плоскость $z = l$.

Мультинаправленное восстановление криптограмм производится в обратном порядке:

- 1) по оси OZ : от входа через плоскость $z = l$ к выходу через плоскость $x = 0$;
- 2) по оси OY : от входа через плоскость $y = m$ к выходу через плоскость $y = 0$;
- 3) по оси OX : от входа через плоскость $x = n$ к выходу через плоскость $x = 0$.

В зависимости от требований, предъявляемых к системе, данные алгоритмы могут применяться полностью или частично, т. е. информационные потоки могут проходить по всем осям или только по части осей. Последовательность прохождения информационных потоков по осям также может быть произвольной.

Заключение

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы:

1. Предложенный способ пространственно-группового перемещения элементов множества дает сравнительно простой способ вариативного преобразования информационных потоков путем формирования траектории преобразования с заданным числом вариантов трансформации (перестановки всех элементов информационного потока по заданному алгоритму).
2. Результаты анализа способа пространственно-группового перемещения наиболее наглядно продемонстрированы на криптогра-

- фических системах, основными операциями в которых являются операции подстановки и перестановки. Криптографические функции можно комбинировать различными способами для получения новой криптографической системы с определенными, заранее заданными, параметрами.
3. Способ пространственно-группового перемещения элементов множества по заданному алгоритму не зависит от природы элементов множества. Операции перестановки просты и прозрачны, а их количество значительно превышает длину ключа.
 4. Способ пространственно-группового перемещения элементов множеств применительно к многомерным множествам позволяет производить преобразование не одного исходного сообщения, как это было в классических криптографических системах, а целых потоков исходных сообщений одновременно. Траектория преобразования зависит от обрабатываемых информационных потоков и резко усложняется при увеличении их количества.
 5. Важным свойством пространственно-группового перемещения является возможность выполнения параллельных операций не только в процессе обработки данных, но и в процессе анализа. Это свойство является наиболее эффективным применительно к специализированным и суперЭВМ, обладающим большим быстродействием и возможностью выполнения параллельных операций над информационными потоками.
 6. Преобразование потоков исходных сообщений может быть однонаправленным (ориентированным по одной из осей множества) или мультинаправленным (проходить по всем или нескольким осям множества последовательно) в зависимости от требований, предъявляемых к информационной системе.
 7. Алгоритм преобразования в информационной системе можно задавать с помощью генератора псевдослучайных последовательностей, обладающего определенными, наперед заданными, характеристиками. Алгоритм преобразования в зависимости от назначения может быть долговременным или сеансовым.

Список литературы

1. Мартынов А. П., Фомченко В. Н. Криптография и электроника / Под ред. А. И. Астайкина. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
Martynov A. P., Fomchenko V. N. Kriptografiya i elektronika / Pod red. A. I. Astaykina. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2006.
2. Грибунин В. Г., Костюков В. Е., Мартынов А. П., Николаев Д. Б., Фомченко В. Н. Современные методы обеспечения безопасности информации в атомной энергетике / Под ред. А. И. Астайкина. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2014.
Gribunin V. G., Kostyukov V. E., Martynov A. P., Nikolaev D. B., Fomchenko V. N. Sovremennyye metody obespecheniya bezopasnosti informatsii v atomnoy energetike / Pod red. A. I. Astaykina. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2014.
3. Мартынова И. А., Смуров С. В., Волков Г. Г., Кукун Н. С., Мурадова А. Р., Корчевая И. О. Квантовая взаимосвязь групп симметрии NV-центра и многоэлектронных спиновых структур // Известия института инженерной физики. 2017. № 4 [46]. С. 31–37.
Martynova I. A., Smurov S. V., Volkov G. G., Kukun N. S., Muradova A. R., Korchevaya I. O. Kvantovaya vzaimosvyaz grupp simmetrii NV-tsentra i mnogoelektronnykh spinovykh struktur // Izvestiya instituta inzhenernoy fiziki. 2017. № 4 [46]. S. 31–37.
4. Мартынова И. А., Волков Г. Г., Кукун Н. С., Мурадова А. Р., Корчевая И. О. SU(2) — кубит-нутритовое управление NV-центрами в алмазе // Там же. 2018. № 2 [48]. С. 63–71.
Martynova I. A., Volkov G. G., Kukun N. S., Muradova A. R., Korchevaya I. O. SU(2) — kubit-nutritovoe upravlenie NV-tsentrami v almaze // Tam zhe. 2018. № 2 [48]. S. 63–71.
5. Шнайер Б. Прикладная криптография. Протоколы, алгоритмы, исходные тексты на языке Си. М.: Триумф, 2003.
Shnyder B. Prikladnaya kriptografiya. Protokoly, algoritmy, iskhodnye teksty na yazyke Si. M.: Triumf, 2003.

6. Запонов Э. В., Мартынов А. П., Машин И. Г., Николаев Д. Б., Сплюхин Д. В., Фомченко В. Н. Методы и средства комплексной защиты информации в технических системах: Уч. пособие. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2019.
Zaponov E. V., Martynov A. P., Mashin I. G., Nikolaev D. B., Splyukhin D. V., Fomchenko V. N. Metody i sredstva kompleksnoy zashchity informatsii v tekhnicheskikh sistemakh: Uch. posobie. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2019.
7. Мартынова И. А., Машин И. Г., Фомченко В. Н. Введение в теорию поля и ее приложения. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2014.
Martynova I. A., Mashin I. G., Fomchenko V. N. Vvedenie v teoriyu polya i eye prilozheniya. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2014.
8. Мартынова И. А., Машин И. Г., Фомченко В. Н. Теория поля и защита информации. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2017.
Martynova I. A., Mashin I. G., Fomchenko V. N. Teoriya polya i zashchita informatsii. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2017.
9. Мартынов А. П., Мартынова И. А. Функции перестановки в системе счисления ряда факториальных множеств // Вестник Воронежского государственного университета. Сер. Системный анализ и информационные технологии. 2016. № 3. С. 42–49.
Martynov A. P., Martynova I. A. Funktsii perestankovki v sisteme schisleniya ryada faktorialnykh mnozhestv // Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Ser. Sistemnyy analiz i informatsionnye tekhnologii. 2016. № 3. S. 42–49.
10. Мартынова И. А., Мартынов А. П., Фомченко В. Н. Аксиоматические основы функций подстановки в системе счисления ряда факториальных множеств и их характеристики. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2019.
Martynova I. A., Martynov A. P., Fomchenko V. N. Aksiomatische osnovy funktsiy podstanovki v sisteme schisleniya ryada faktorialnykh mnozhestv i ikh kharakteristiki. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2019.
11. Мартынов А. П., Мартынова И. А., Николаев Д. Б., Сидюхин Д. В., Фомченко В. Н. Подгруппы симметрических групп подстановок ряда факториальных множеств // Вестник Воронежского гос. ун-та. Сер. Системный анализ и информационные технологии. 2021. № 1. С. 53–62.
Martynov A. P., Martynova I. A., Nikolaev D. B., Sidyukhin D. V., Fomchenko V. N. Podgruppy simmetricheskikh grupp podstanovok ryada faktorialnykh mnozhestv // Vestnik Voronezhskogo gos. un-ta. Ser. Sistemnyy analiz i informatsionnye tekhnologii. 2021. № 1. S. 53–62.
12. Патент на изобретение № 2623894 С1 РФ, МПК H04L 9/16. Способ преобразования данных с равновероятностной инициализацией / А. П. Мартынов, И. А. Мартынова, М. В. Марунин, Д. Б. Николаев, В. Н. Фомченко. 29.06.2017. Бюллетень № 19.
Patent na izobretenie № 2623894 S1 RF, MPK H04L 9/16. Sposob preobrazovaniya dannykh s ravnoveroyatnostnoy initsializatsiyey / A. P. Martynov, I. A. Martynova, M. V. Marunin, D. B. Nikolaev, V. N. Fomchenko. 29.06.2017. Byulleten № 19.
13. Патент на изобретение № 2699589 С1 РФ, МПК H04L 9/18. Способ динамического преобразования данных при хранении и передаче / К. О. Волков, А. П. Мартынов, И. А. Мартынова, Д. Б. Николаев, И. А. Николаева, В. Н. Фомченко. 06.09.2019. Бюллетень № 25.
Patent na izobretenie № 2699589. S1 RF, MPK H04L 9/18. Sposob dinamicheskogo preobrazovaniya dannykh pri khraneni i peredache / K. O. Volkov, A. P. Martynov, I. A. Martynova, D. B. Nikolaev, I. A. Nikolaeva, V. N. Fomchenko. 06.09.2019. Byulleten № 25.
14. Патент на изобретение № 2700401 С1 РФ, МПК H04L 9/32, G06K 1/12. Способ формирования идентификационных признаков для группы объектов / К. О. Волков, А. П. Мартынов, И. А. Мартынова, Д. Б. Николаев, И. А. Николаева, В. Н. Фомченко. 16.09.2019. Бюллетень № 26.
Patent na izobretenie № 2700401. S1 RF, MPK H04L 9/32, G06K 1/12. Sposob formirovaniya identifikatsionnykh priznakov dlya gruppy obyektov / K. O. Volkov, A. P. Martynov, I. A. Martynova, D. B. Nikolaev, I. A. Nikolaeva, V. N. Fomchenko. 16.09.2019. Byulleten № 26.
15. Мартынова И. А., Мартынов А. П., Николаев Д. Б. Криптографические системы

и метод факториального сжатия информации // Известия института инженерной физики. 2016. № 42. С. 54–58.

Martynova I. A., Martynov A. P., Nikolaev D. B. Kriptograficheskie sistemy i metod faktorialnogo szhatiya informatsii // Izvestiya instituta inzhenernoy fiziki. 2016. № 42. S. 54–58.

16. *Shannon C.* Communication theory of secret system // Bell System Techn. J. 1949. Vol. 28, No 4. P. 656–715.

Статья поступила в редакцию 08.06.21.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Гордеев Дмитрий Геннадьевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: DGGordeev@vniief.ru
- Гулаков Сергей Юрьевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник расчетно-методической группы, *e-mail*: SYGulakov@vniief.ru
- Жильникова Наталия Николаевна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: NNZhilnikova@vniief.ru
- Запонов Арсений Эдуардович** — ФГКУ ВОУ ВО "Военная академия ракетных войск стратегического назначения им. Петра Великого", г. Балашиха Московской области, научный сотрудник, *e-mail*: poraz@mail.ru
- Кидямкина Дина Николаевна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: DNKidyamkina@vniief.ru
- Куделькин Вадим Григорьевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: VGKudelkin@vniief.ru
- Куликова Мария Вячеславовна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: MVKulikova@vniief.ru
- Конради Дмитрий Сергеевич** — ФГКУ ВОУ ВО "Военная академия ракетных войск стратегического назначения им. Петра Великого", г. Балашиха Московской области, научный сотрудник, *e-mail*: demon125@inbox.ru
- Маслов Евгений Евгеньевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник расчетно-методической группы, *e-mail*: EEMaslov@vniief.ru
- Мартынов Александр Петрович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательского отдела, *e-mail*: staff@vniief.ru
- Мартынова Инна Александровна** — ОИВТ РАН, г. Москва, старший научный сотрудник, *e-mail*: martina1204@yandex.ru
- Милюкова Ольга Юрьевна** — ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, г. Москва, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: olgamilyukova@mail.ru
- Модестов Дмитрий Геннадьевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ", г. Снежинск Челябинской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: d.g.modestov@vniitf.ru
- Николаев Дмитрий Борисович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, главный научный сотрудник, *e-mail*: dim010307@yandex.ru
- Романов Владимир Игоревич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, заместитель начальника научно-исследовательского отделения, начальник расчетно-методического отдела, *e-mail*: VIRomanov@vniief.ru
- Фомченко Виктор Николаевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, советник при дирекции — главный научный сотрудник, *e-mail*: staff@vniief.ru
- Чубарешко Илья Сергеевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина", г. Снежинск Челябинской области, младший научный сотрудник, *e-mail*: i.s.chubareshko@mail.ru
- Шестаков Александр Александрович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина", г. Снежинск Челябинской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: A.A.Shestakov2012@yandex.ru
- Шумилина Ольга Николаевна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: ONShumilina@vniief.ru

INFORMATION ABOUT AUTHORS

- Gordeev Dmitriy Gennadyevich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, *e-mail*: DGGordeev@vniief.ru
- Gulakov Sergey Yuryevich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of computational and methodological group, *e-mail*: SYGulakov@vniief.ru
- Zhilnikova Nataliya Nikolaevna** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, senior scientist, *e-mail*: NNZhilnikova@vniief.ru
- Zaponov Arseniy Eduardovich** — SOFSI MEI of HE "Peter the Great Military Academy of the Strategic Missile Forces", Balashikha, Moscow region, scientist, *e-mail*: nopaz@mail.ru
- Kidyamkina Dina Nikolaevna** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, *e-mail*: DNKidyamkina@vniief.ru
- Kudelkin Vadim Grigoryevich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, leading scientist, *e-mail*: VGKudelkin@vniief.ru
- Kulikova Mariya Vyacheslavovna** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, *e-mail*: MVKulikova@vniief.ru
- Konradi Dmitriy Sergeevich** — SOFSI MEI of HE "Peter the Great Military Academy of the Strategic Missile Forces", Balashikha, Moscow region, scientist, *e-mail*: demon125@inbox.ru
- Maslov Evgeniy Evgenyevich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of computational and methodological group, *e-mail*: EEMaslov@vniief.ru
- Martynov Aleksandr Petrovich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research department, *e-mail*: staff@vniief.ru
- Martynova Inna Aleksandrovna** — JIHT, RAS, Moscow, senior scientist, *e-mail*: martina1204@yandex.ru
- Milyukova Olga Yuryevna** — M. V. Keldysh IAM, RAS, Moscow, leading scientist, *e-mail*: olgamilyukova@mail.ru
- Modestov Dmitriy Gennadyevich** — FSUE "RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region, senior scientist, *e-mail*: d.g.modestov@vniitf.ru
- Nikolaev Dmitriy Borisovich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, chief scientist, *e-mail*: dim010307@yandex.ru
- Romanov Vladimir Igorevich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, deputy head of research division, head of computational and methodological department, *e-mail*: VIRomanov@vniief.ru
- Fomchenko Viktor Nikolaevich** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, Adviser to Directorate — chief scientist, *e-mail*: staff@vniief.ru
- Chubareshko Ilya Sergeevich** — FSUE "RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region, junior scientist, *e-mail*: i.s.chubareshko@mail.ru
- Shestakov Aleksandr Aleksandrovich** — FSUE "RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region, leading scientist, *e-mail*: A.A.Shestakov2012@yandex.ru
- Shumilina Olga Nikolaevna** — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, senior scientist, *e-mail*: ONShumilina@vniief.ru