

ОБЪЕДИНЁННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

На правах рукописи



A handwritten signature in blue ink is located on the right side of the page, below the text 'На правах рукописи'. The signature is stylized and appears to read 'Айриян'.

Айриян Александр Сержикович

**Численное моделирование тепловых процессов в ячейках
поддачи молекул в источник ионов**

Специальность 05.13.18 —
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Дубна — 2020

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель: **Донец Евгений Евгеньевич**
кандидат физико-математических наук

Официальные оппоненты: **Цирулев Александр Николаевич**,
доктор физико-математических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», профессор кафедры общей математики и математической физики

Поляков Сергей Владимирович,
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник,
Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук», ведущий научный сотрудник

Защита состоится 23.12.2020 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета ОИЯИ.05.01.2019.П при Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований по адресу: Конференц-зал ЛИТ, ОИЯИ, ул. Жолио-Кюри, д. 20, г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980.

С электронной версией диссертации можно ознакомиться на официальном сайте Объединенного института ядерных исследований в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» по адресу: <https://dissertations.jinr.ru>. С печатной версией диссертации можно ознакомиться в Научно-технической библиотеке ОИЯИ.

Телефон для справок: +7 (496) 216-47-28.

Ученый секретарь
диссертационного совета
ОИЯИ.05.01.2019.П,
д-р физ.-мат. наук



Е. В. Земляная

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В настоящее время особую актуальность приобретают прецизионные методы селекции и быстрой доставки молекул строго определенных веществ, являющихся рабочими веществами в различных научно-технических приложениях. Например, такими приложениями являются: подача рабочих газов в источник ионов (в ускорительной технике), диагностика и мониторинг онкологических заболеваний с помощью позитрон-эмиссионной томографии (в медицине). В последнем случае, особое значение имеет работа с короткоживущими изотопами, которые вступают в химические реакции с молекулами мишени. Вследствие чего важной задачей является отделение молекул, содержащих радиоактивные изотопы, от молекул фонового газа.

В современной прикладной теплоинженерии применение зависимостей теплофизических свойств материалов от температуры (даже в небольшом интервале) может обеспечить элегантный способ решения подобных задач. Так, в Лаборатории физики высоких энергий ОИЯИ разрабатываются методы быстрой и точной селекции и доставки изотопосодержащих соединений, основанные на использовании значительной разницы зависимостей парциальных давлений от температуры (в том числе в криогенном диапазоне от 4.2 и до 78 К) для различных неорганических веществ. Наиболее интересным из разрабатываемых методов является технология «температурных створок» являющаяся альтернативой механическим створкам, надежная эксплуатация которых в миллисекундном диапазоне при криогенных температурах не представляется достижимой. «Температурные створки» реализуются импульсной криогенной ячейкой. Проведенные испытания прототипа криогенной ячейки продемонстрировали, что её функционирование (для метана в качестве рабочего вещества) нуждается в дальнейшем исследовании и улучшении качества проектирования.

Отсюда очевидна актуальность математического моделирования процесса теплопроводности в ячейках инъекции рабочих веществ в ионизационную камеру источника ионов – во-первых, в связи с дороговизной натуральных экспериментов, и, во-вторых, для лучшего понимания путей дальнейшего проектирования.

В связи с отсутствием эффективных алгоритмов и программного обеспечения, позволяющих непосредственно применить их для проведения указанного математического моделирования и получить результаты за разумное время, возникла необходимость в разработке эффективных вычислительных схем и алгоритмов параллельных вычислений, создании комплекса программ для численного моделирования тепловых процессов в рассматриваемых устройствах, а также постановке и решению задачи оптимизации характеристик данных устройств, повышающих эффективность их функционирования.

Целью диссертационной работы является разработка эффективных вычислительных схем и алгоритмов параллельных вычислений, создание комплекса программ для моделирования тепловых процессов в устройствах подачи рабочих газов в ионизационную камеру источника многозарядных ионов,

решение задачи оптимизации характеристик рассматриваемых устройств и проведение вычислительных экспериментов для исследования свойств тепловых процессов в рассматриваемых устройствах.

Для достижения поставленной цели было необходимо решить следующие **задачи**: разработать эффективные вычислительные схемы и алгоритмы параллельных вычислений, реализовать их в виде комплекса программ для численного решения начально-краевых задач, описывающих тепловую эволюцию в ячейках подачи молекул в источник ионов, и на этой основе провести комплексное исследование свойств тепловых процессов в рассматриваемых устройствах.

При решении вышеописанных задач были получены следующие **результаты**:

1. Разработаны вычислительные схемы моделирования тепловых процессов в устройствах как порционной (в миллисекундном диапазоне), так и постоянной подачи рабочих газов в ионизационную камеру источника многозарядных ионов.
2. Реализованы конечно-разностные методы численного решения начально-краевых задач со смешанными граничными условиями для нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих тепловые процессы в L -образных областях в цилиндрических и декартовых координатах.
3. Разработаны алгоритмы параллельных вычислений на многоядерных вычислительных архитектурах: центральных процессорных устройствах (ЦПУ) и графических процессорных устройствах (ГПУ), сохраняющие основные характеристики используемых численных методов и реализующие их этапы.
4. Создан комплекс программ высокопроизводительных вычислений, комбинирующий различные технологии параллельных вычислений для решения задач оптимизации характеристик устройств подачи рабочих газов.
5. Проведены вычислительные эксперименты с привлечением суперкомпьютера «Говорун» для исследования тепловых процессов в устройствах подачи рабочих веществ камеру источника ионов.

Научная новизна. Следующие результаты исследования являются новыми:

1. Впервые проведено компьютерное моделирование тепловой эволюции устройств подачи рабочих газов в ионизационную камеру источника многозарядных ионов. На его основе получены новые знания о функционировании импульсной криогенной ячейки. Показано, что устройство имеет время установления требуемого температурного режима работы, которое несоизмеримо больше одного периода инжекции. Данное свойство должно быть учтено при проектировании и эксплуатации.
2. В рамках рассматриваемых моделей продемонстрирована принципиальная возможность реализации технологии «температурных створок»

для импульсной парциальной инжекции как альтернативы механическим створкам, надежная эксплуатация которых в миллисекундном диапазоне при криогенных температурах не представляется достижимой.

3. Впервые реализованы алгоритмы параллельных вычислений на современных многоядерных системах ЦПУ и ГПУ для численного решения начально-краевых задач для нелинейного уравнения теплопроводности в цилиндрической системе координат с разрывными теплофизическими коэффициентами и разрывной по времени импульсной функцией источника.
4. Сформулированы и решены новые задачи оптимизации характеристик рассматриваемых устройств, повышающие эффективность их функционирования в рамках модели их тепловой эволюции.

Практическая значимость. Результаты, изложенные в диссертации, используются для расчетов и изготовления криогенных ячеек прецизионного ввода газообразных соединений короткоживущих радиоактивных изотопов в ионные источники. Эти короткоживущие изотопы предполагается подвергнуть ионизации до высоких зарядностей с последующей инжекцией в ускорители:

- для адронной терапии онкозаболеваний с помощью ионов изотопа $^{11}_6\text{C}^+$,
- благодаря излучению позитрона, данный изотоп предполагается одновременно использовать во время облучения опухолей для on-line позитрон-эмиссионной томографии и коррекции на мишени;
- для фундаментальных исследований в ядерной физике.

Разработанные алгоритмы реализованы и объединены в программный комплекс *Ophelia*¹, который в дальнейшем будет применяться в ЛФВЭ ОИЯИ для проектирования и оптимизации реализующих «температурные створки» устройств импульсной инжекции рабочих газов в источник ионов.

Описанные алгоритмы численного моделирования реализованы программно в обобщенном виде так, что конкретика задачи задается независимо от самого численного метода. Таким образом, эти программы с небольшими модификациями могут быть применены к решению других начально-краевых задач для нелинейных уравнений параболического типа, в том числе с коэффициентами, терпящими разрывы первого рода. К их числу относится ряд задач в рамках тематического плана ОИЯИ № 05-6-1119-2014/2023 «Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных».

Методология и методы исследования:

- исследование проводилось в рамках методологии проведения вычислительного эксперимента;

¹ <https://gitlab-hlit.jinr.ru/ayriyan/ophelia> – доступ к репозиторию с исходным кодом программного комплекса *Ophelia* осуществляется по запросу.

- для численного решения нелинейных уравнений теплопроводности, описывающих моделируемые процессы, использовались конечно-разностные методы и разрабатывались алгоритмы параллельных вычислений с сохранением базовых свойств методов численного решения;
- при численном решении сформулированных в рамках исследования задач оптимизации использовался метод прямого перебора, основанный на параллельном вычислении значений целевой функции (функционала);
- при реализации разработанных алгоритмов параллельных вычислений на ЭВМ использовались технологии Message Passing Interface (MPI), Open Multi-Processing (OpenMP) и Open Computing Language (OpenCL) для проведения расчетов на многоядерных многопроцессорных архитектурах и графических процессорных устройствах.
- при программной реализации разработанных алгоритмов использовалась онлайн-платформа GitLab для системы контроля версий Git, предоставляемая на гетерогенной платформе HybriLIT.

Положения, выносимые на защиту:

1. Начально-краевые задачи для нелинейных уравнений теплопроводности, описывающие тепловую эволюцию ячеек подачи молекул в источник ионов, а также задачи параметрической оптимизации с целью максимизации эффективности функционирования рассматриваемых устройств.
2. Вычислительные схемы, реализованные с применением технологий параллельных вычислений, для численного решения нелинейных аксиально-симметричных параболических уравнений с разрывными коэффициентами и разрывной функцией источника, позволившие моделировать тепловую эволюцию рассматриваемых устройств.
3. Вычислительные схемы, реализованные с применением технологий параллельных вычислений, для численного решения задач параметрической оптимизации, позволившие получить значение физических параметров, обеспечивающих максимум эффективность функционирования рассматриваемых устройств в рамках моделей их тепловой эволюции.
4. Результаты вычислительных экспериментов с привлечением суперкомпьютера «Говорун» для комплексного исследования тепловых процессов в устройствах подачи рабочих веществ камеру источника ионов, позволившие получить новые знания о тепловой эволюции изучаемых устройств и сформулировать на их основе задачи параметрической оптимизации.
5. Программный комплекс Orhelia, реализующий алгоритмы параллельных вычислений с применением комбинации технологий MPI и OpenMP, для высокопроизводительной оптимизации характеристик

тепловых процессов в криогенной ячейки порционной подачи молекул в источник ионов.

Достоверность перечисленных результатов подтверждается сопоставлением расчетов, полученных с использованием различных разностных схем (явных и неявных), серий расчетов на последовательностях сгущающихся сеток и на модельных задачах.

Апробация работы. Основные положения и результаты исследований, изложенные в диссертации, были доложены автором:

- на **17-и** международных и российских конференциях:
 - International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond (CSP2020) (ВШЭ, Москва, **2020**);
 - Mathematical Modeling and Computational Physics (ММСП) (Словакия, **2011**; Россия, **2013**; Словакия, **2015**; Словакия, **2019**);
 - Научной конференции молодых ученых и специалистов (ОМУС) (ОИЯИ, Дубна, **2013, 2014, 2017** и **2019**);
 - Workshop on Numerical and Symbolic Computing (Варна, Болгария, **2019**);
 - Международной конференции «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (МРАМС) (ОИЯИ, Дубна, **2012** и **2014**);
 - Всероссийской конференции с международным участием «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем» (РУДН, Москва, **2012**);
 - 3-ья конференция «Методы математической физики и математическое моделирование физических процессов» (МИФИ, Москва, **2014**);
 - Седьмой международной молодежная научная школа-конференция «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач», посвященная 90-летию со дня рождения академика Г. И. Марчука (Академгородок, Новосибирск, **2015**);
 - Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2015», посвященная 90-летию со дня рождения академика Г. И. Марчука (Академгородок, Новосибирск, **2015**);
 - Восьмой международной конференции «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании» (ОИЯИ, Дубна, **2018**);
- на **6-и** научных семинарах:
 - Общелабораторном научном семинаре Лаборатории информационных технологий ОИЯИ, Дубна, 9-ое сентября **2020**;
 - Общелабораторном научном семинаре Лаборатории информационных технологий ОИЯИ, Дубна, 14-ое марта **2019**;
 - Научном семинаре по вычислительной физике Лаборатории информационных технологий ОИЯИ, Дубна, 6-ое декабря **2013**;
 - Научном семинаре по математическому моделированию Кафедры систем телекоммуникаций Факультета физико-математических и естественных наук РУДН, Москва, 13-ое июня **2012**;

- Научном семинаре кафедры «Математики и теоретической информатики» Факультета электротехники и информатики Технического университета в Кошице, Кошице, Словакия, 8-ое декабря **2011**;
- Научном семинаре кафедры физики Факультета естественных наук Университета им. Нельсона Манделы, Порт-Элизабет, ЮАР, 5-ое ноября **2010**.

Соискатель руководил исследовательскими грантами ОИЯИ № 14-602-01 и № 17-602-01, а также исследовательским грантом РФФИ № 14-01-31227-мол_а («Мой первый грант») «Разработка и оптимизация параллельных алгоритмов для сеточных методов в задачах численного моделирования процессов теплопроводности в технических устройствах».

Соискатель является лауреатом стипендии Лаборатории информационных технологий им. член.-корр. АН СССР М. Г. Мещерякова для молодых ученых в 2008–2013 гг., 2015–2016 гг. и 2018 г., а также был удостоен премии Губернатора Московской области в сфере науки и инноваций для молодых ученых и специалистов (Распоряжение от 22.12.2014 № 429-РГ).

Личный вклад. Содержание диссертации, а также основные результаты и положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора. Подготовка к публикациям полученных результатов проводилась совместно с соавторами, при этом вклад соискателя был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором, либо в соавторстве при определяющем вкладе соискателя.

Соответствие диссертации паспорту специальности. В диссертационной работе присутствуют оригинальные результаты одновременно в трех областях: математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Исследования соответствуют пунктам 3, 4 и 5 паспорта специальности. Соответствие диссертации физико-математической отрасли науки определяется выбором моделей, преобладанием численных методов в качестве аппарата исследования и полученными результатами в виде новых вычислительных схем, алгоритмов параллельных вычислений и комплекса программ.

Публикации. По теме диссертации лично и в соавторстве опубликованы 16 работ, 10 из которых в рецензируемых изданиях, индексируемых в базах научного цитирования Scopus и WoS [1; 8–10], а также РИНЦ [1–7] – в соответствии с требованиями к публикациям Положения о присуждении ученых степеней в ОИЯИ (пр. ОИЯИ от 30.04.2019 № 320), последние ссылки указаны на журналы, рекомендованные для публикаций результатов для защиты научных степеней по специальности 05.13.18 в соответствующей отрасли науки; 6 — в сборниках, трудах и тезисах конференций.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи,

излагаются научная новизна и практическая значимость, приводятся результаты и положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена описанию объекта математического моделирования, а именно – эволюции и распределения температурного поля в ячейках инжекции рабочих газов в ионизационную камеру источника многозарядных ионов. Одной из них является цилиндрическая криогенная ячейка импульсной инжекции в миллисекундном диапазоне газов, заранее замороженных на ее поверхности при температуре жидкого гелия [1]. Импульсная инжекция осуществляется с использованием значительной разницы зависимостей парциальных давлений различных газов от температуры, что позволяет реализовать технологию «температурных створок» как альтернативу механическим створкам (см. рисунок 1), когда замороженные газовые смеси на поверхности криогенной ячейки испаряются (инжектируются) нагреванием её поверхности импульсным электрическим током. Другое устройство является плоской ячейкой постоянной инжекции испарившихся молекул материала самой ячейки в ионизационную камеру [2] (см. рисунок 2).

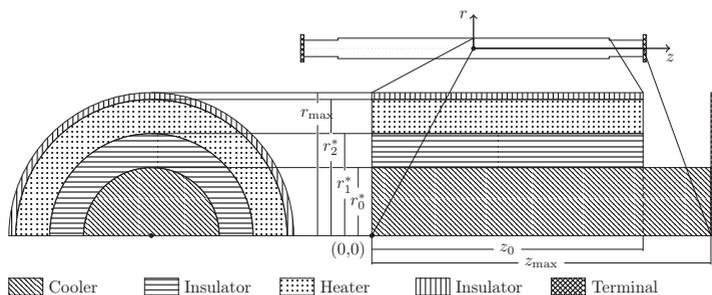


Рис. 1 — Схематическое представление четверти среза цилиндрической ячейки через ось. Нижняя линия – ось цилиндра (ось симметрии, $r = 0$). Теплоём (медный сердечник) охлаждает ячейку при контакте с температурным терминалом (жидкий гелий). Нагреватель (проводящий слой) нагревает ячейку при пропускании через него электрического тока. Внутренний изолятор предотвращает утечку электрического тока от нагревателя к теплоёму. Внешний изолятор не дает молекулам рабочих газов проникнуть в поры проводящего слоя.

Также рассматриваются технические характеристики и особенности функционирования данных устройств, в обоих из них тепловые процессы порождаются пропусканием электрического тока через проводящие материалы. Перечисляются допущения, принятые в математических моделях. В диссертационной работе изучение данных устройств проводится исключительно в рамках моделирования теплопроводности. Из этих соображений формулируются начально-краевые задачи, т.е. уравнения (1)–(2) и (3) для первого и второго устройства соответственно, описывающие распространение тепла внутри устройств, и замыкающие условия (4). В обоих случаях моделирование проводится в первой координатной четверти плоскости.

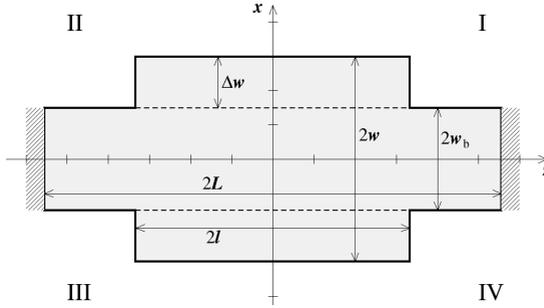


Рис. 2 — Геометрия плоской ячейки постоянной инъекции. $2L$ — это длина пластины, $2w$ — её ширина, $2l$ — длина «крыльев», $2w_b$ — ширина основы пластины. Слева и справа она соединена с температурным терминалом (жидким азотом).

Для первого устройства уравнение теплопроводности имеет следующий вид:

$$\rho(r)c_V(T,r)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda(T,r)\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(T,r)\frac{\partial T}{\partial z}\right) + X(T,t,r; I_0, t_{\text{per}}, t_{\text{src}}), \quad (1)$$

здесь теплофизические коэффициенты, а именно плотность $\rho(r)$, удельная теплоёмкость $c_V(T,r)$ и теплопроводность $\lambda(T,r)$ нелинейно зависят от температуры и имеют разрывы первого рода вдоль границы раздела сред. Их температурные зависимости были описаны полиномиальными функциями различных степеней на основе экспериментальных данных [3]. Импульсная периодическая функция источника описывается следующим образом:

$$X(T,t,r; I_0, t_{\text{per}}, t_{\text{src}}) = \chi(T,r)\frac{I_0^2}{S_C}\sum_{n=0}^{\infty}[\theta(t - nt_{\text{per}}) - \theta(t - nt_{\text{per}} - t_{\text{src}})], \quad (2)$$

где t_{per} — период инъекции, t_{src} — время нагрева в рамках одного периода, а I_0 — сила электрического тока.

Эволюция температурного поля во втором устройстве описывается следующим уравнением:

$$\rho(T)c_V(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right) + I^2\frac{\chi(T)}{S_C}. \quad (3)$$

Начально-краевые условия в общем виде можно выразить так:

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 & z \neq z_{\text{max}}, \\ T = T_0 & z = z_{\text{max}}, \\ T = T_0, & t = 0, \end{cases} \quad (4)$$

где \mathbf{n} – вектор нормали к границе $\delta\Omega_L$ L -образной пространственной области Ω_L .

Обсуждаются методы приближенного решения рассматриваемых начально-краевых задач, а также подходы к параллелизации численного решения параболических уравнений явными [4–6] и неявными [7–9] конечно-разностными методами.

Для класса конечно-разностных схем, принятых для проведения исследований в диссертационной работе, на примере решения начально-краевой задачи для линейного одномерного параболического уравнения продемонстрировано, что реализация параллельных вычислений для явных разностных схем эффективнее с точки зрения ускорения расчетов на системах с распределенной памятью. Как следствие, они могут иметь преимущество при расчётах на больших многопроцессорных вычислительных системах. Под ускорением здесь понимается отношение времени выполнения задачи одним вычислительным процессом ко времени её выполнения n параллельными процессами [10; 11]. Тем не менее неявные схемы сохраняют своё преимущество над явными при параллельных вычислениях на системах с общей памятью. Однако такие системы имеют ограничения по количеству вычислительных устройств из-за конфликтов доступа к памяти. Отметим, что явные схемы находят всё большее применение из-за их логической простоты и внутреннего параллелизма при моделировании на высокопроизводительных и сверхпроизводительных системах [12; 13].

Таким образом, дальнейшие исследования в диссертационной работе подчинялись следующей парадигме: при реализации параллельных вычислений для численного решения уравнений явными конечно-разностными методами использовалась технология, ориентированная на системы с распределенной памятью (MPI), а для неявных конечно-разностных методов использовались технологии, разработанные для систем с общей памятью OpenMP (для вычислений на многоядерных ЦПУ) и OpenCL (для вычислений на ГПУ).

Рассматривается методология вычислительного эксперимента в эпоху высокопроизводительных вычислений [A1]. Выделяются этапы вычислительного эксперимента, на которые, в первую очередь, влияет все более широкая доступность все большего объёма вычислительных ресурсов. В частности, делается вывод, что разработка и установка высокопроизводительных вычислительных систем действительно важна, вне зависимости от конкретных научных задач, поскольку наличие современных высокопроизводительных вычислительных систем в академической инфраструктуре дает широкие возможности научного изыскания и стимулирует новые исследования. Например, в рамках диссертационного исследования, после установки в Лаборатории информационных технологий суперкомпьютера «Говорун» в 2018 году [14], была математически сформулирована задача оптимизации, приближенное решение которой потребовало больших объемов вычислительных ресурсов, обеспеченных данным суперкомпьютером.

Во **второй главе** описывается предложенный алгоритм параллельных вычислений с распределенной памятью (с использованием интерфейса передачи

сообщений MPI), реализующий явную разностную схему (5) [15–17] для численного моделирования тепловых процессов, протекающих в многослойной цилиндрической области:

$$\rho_{i,j} c_{V,i,j} \frac{\hat{T}_{i,j} - T_{i,j}}{\tau} = \Lambda_r [T_{i,j}] + \Lambda_z [T_{i,j}] + X_{i,j}, \quad (5)$$

где $\Lambda_r [T_{i,j}]$ и $\Lambda_z [T_{i,j}]$ – зависящие от коэффициента теплопроводности пространственные конечно-разностные операторы на специальной неравномерной сетке (под специальной понимается сетка, имеющая узлы на границе разрыва коэффициентов) (6)–(8), $\hat{T}_{i,j}$ – искомое значение на новом временном слое, а $T_{i,j}$ – известные значения на текущем слое, $\rho_{i,j} = \rho(T_{i,j})$, $c_{V,i,j} = c_V(T_{i,j})$ и $X_{i,j} = X(T_{i,j})$ – плотность, удельная теплоёмкость и функция источника соответственно.

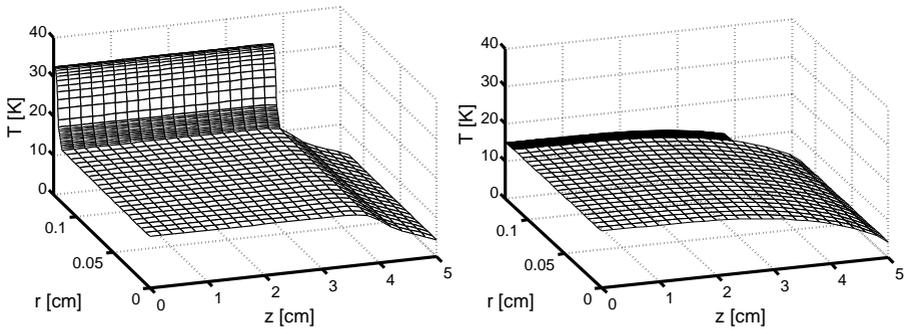
$$\bar{\omega} = \{(t_k, r_i, z_j) \mid 0 \leq t_k \leq t_{\text{per}}, \quad t_{k+1} = t_k + \tau_k, \quad k = 0 \dots K-1; \\ 0 \leq r_i \leq r_{\text{max}}, \quad r_{i+1} = r_i + h_i, \quad i = 0 \dots N_j - 1; \\ 0 \leq z_j \leq z_{\text{max}}, \quad z_{j+1} = z_j + \eta_j, \quad j = 0 \dots M_i - 1\}, \quad (6)$$

здесь

$$N_j = \begin{cases} N & \text{при } 0 \leq j \leq M^{(0)}, \\ N^{(0)} & \text{при } M^{(0)} < j \leq M, \end{cases} \quad (7)$$

и

$$M_i = \begin{cases} M & \text{при } 0 \leq i \leq N^{(0)}, \\ M^{(0)} & \text{при } N^{(0)} < i \leq N. \end{cases} \quad (8)$$



а) Температурное поле при $t_{\text{src}} = 1$ мс сразу после выключения источника.

б) Температурное поле при $t_{\text{per}} = 25$ мс.

Рис. 3 — Температурное поле $T(r, z)$ в различные моменты времени эволюции.

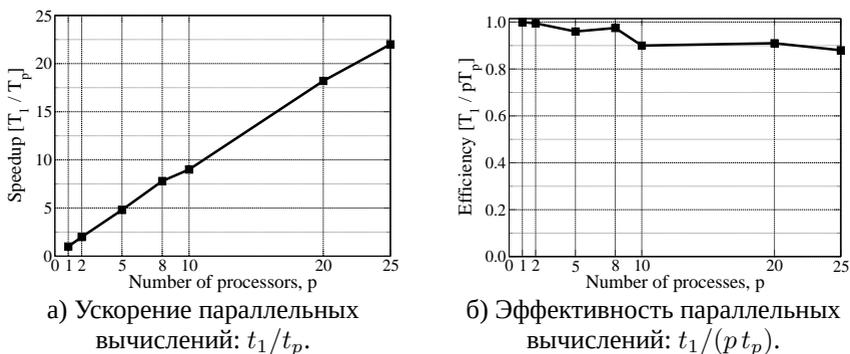


Рис. 4 — Ускорение и эффективность параллельных вычислений на кластере ЦИВК ОИЯИ.

Численные эксперименты показывают (см. рисунок 3), что после нагрева продолжительностью t_{src} температурное поле не возвращается к начальному значению $T_0 = 4.2$ К за время t_{per} [A2]. Более того, из-за нелинейности теплофизических коэффициентов время релаксации в две тысячи раз превышает t_{per} . Это означает, что невозможно реализовать неизменный периодический температурный режим на поверхности криогенной ячейки (т. е. реализовать технологию «температурных створок») с первого периода функционирования импульсной криогенной ячейки.

Производительность алгоритма демонстрирует линейное ускорение и высокую эффективность параллельных вычислений (см. рисунок 4). Под эффективностью понимается отношение ускорения к соответствующему числу параллельных процессоров. Однако дальнейшее исследование требует моделирования тепловой эволюции на время, многократно превышающее один период инъекции, до достижения установившегося периодического температурного режима. Это, в свою очередь, делает применение явных разностных схем неосуществимым на практике из-за очень строгого ограничения на значение временного шага.

Результаты моделирования также позволили предложить модель тепловой эволюции с одной пространственной переменной (радиальной) для моделирования нагрева криогенной ячейки во временном интервале $[0, t_{src}]$ [A3]. Данная модель нашла применение в определении интервала поиска значения амплитуды силы тока в алгоритме решения задачи оптимизации характеристик функции источника, описанной в Главе 4.

В **третьей главе** исследуется возможность реализации «температурных створок», предназначенных для импульсной дозированной инъекции рабочих газов в ионизационную камеру источника ионов. Необходимо найти установившийся периодический температурный режим, удовлетворяющий заданным условиям. Для этого необходимо решать начально-краевую задачу до получения

искомого температурного режима, что требует реализации неявных разностных схем для численного моделирования тепловой эволюции тысяч периодов нагрева и охлаждения.

Рассматриваются два конечно-разностных метода. Первый основан на разностной аппроксимации двухмерного эллиптического оператора неявным и явным разностными операторами, действующими в разных сеточных направлениях. Второй – метод переменных направлений. Кроме того, для функции источника, производящей периодический процесс нагрева, была реализована модель переходного процесса «включения» и «отключения» электрического тока [18]. Это позволило сделать процессы более реалистичными и стабилизировать численное моделирование неявными разностными методами.

Первый метод использует явную и неявную конечно-разностные аппроксимации дифференциального оператора, действующего в аксиальном и радиальном направлениях соответственно:

$$\rho_{i,j} c_V v_{i,j} \frac{\widehat{T}_{i,j} - T_{i,j}}{\tau} = \Lambda_r [\widehat{T}_{i,j}] + \Lambda_z [T_{i,j}] + X_{i,j}. \quad (9)$$

Разностная схема на каждом шаге по времени разрешается методом прогонки, при этом аппроксимация условий сопряжения (в точках разрыва коэффициентов) реализуется в коэффициентах прямого хода прогонки:

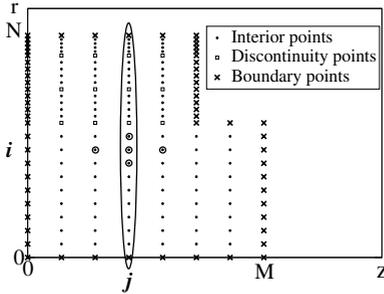
$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{i^*} = \frac{\lambda_{m+1}^* h_{i^*}}{\lambda_{m+1}^* h_{i^*} + \lambda_m^* h_{i^*+1} (1 - \alpha_{i^*-1})}, \\ \beta_{i^*} = \frac{\lambda_m^* h_{i^*+1} \beta_{i^*-1}}{\lambda_{m+1}^* h_{i^*} + \lambda_m^* h_{i^*+1} (1 - \alpha_{i^*-1})}, \end{array} \right. \quad (10)$$

где i^* – индекс узла на границе сопряжения (вдоль которого коэффициенты терпят разрыв первого рода). Для случая равномерной сетки выражения для коэффициентов прямого хода прогонки даны в работе [19]. Предлагается подход к параллелизации вычислений, особенности которого требуют использования общей памяти.

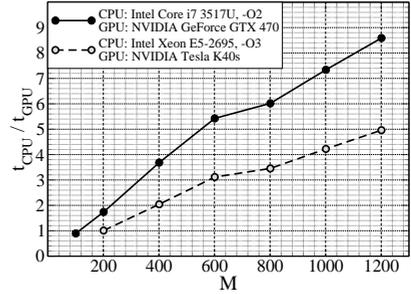
Реализация параллельных вычислений при решении задачи данной разностной схемой основана на свойстве её натуральной параллелизации по направлению, в котором действует явный разностный оператор (в нашем случае в аксиальном направлении). Таким образом, на каждом шаге по времени цикл по индексу $j = 1, \dots, M_i - 1$ может быть распараллелен так, что каждое вычислительное устройство методом прогонки находит значение искомой функции $\widehat{T}_{i,j}$ для всех i при фиксированном j .

На рисунке 5а схематично показана дискретизация области искомой функции. Значение функции в выделенной группе точек рассчитывается j -й нитью. Также обведены точки, участвующие в расчете значения функции на узле сетки (i, j) . При такой организации параллельных вычислений эффективнее использовать общую память, чтобы избежать большого количества пересылок данных

из одной области памяти в другую. Кроме того, наиболее эффективными параллельные вычисления являются при количестве вычислительных устройств, равном $\max_{1 \leq i \leq N-2} |M_i| - 2$.



а) Схематичное представление дискретизации расчётной области. Выделенный вектор значений искомой функции находится методом прогонки. Окружностями выделены точки, участвующие в шаблоне разностной схемы.



б) Ускорение параллельных вычислений на ГПУ в сравнении с расчетами на ЦПУ при фиксированном N : $N = 431$ (черные точки соединенные сплошной линией) и $N = 631$ (выколотые точки соединенные пунктирной линией).

Рис. 5 — Описание алгоритма, реализованного на OpenCL для расчетов на ГПУ и его ускорение.

Программная реализация параллельных вычислений осуществлялась с применением языка OpenCL [20], а вычисления проводились на графических процессорных устройствах (ГПУ).

Численные эксперименты на персональном компьютере и на гетерогенном вычислительном кластере HybriLIT [21] показывают значительный рост ускорения при увеличении количества точек дискретизации в аксиальном направлении M (см. рисунок 5б). Кроме того, расчетное время на ГПУ в этом случае практически не меняется (либо растет незначительно). Таким образом, реализованный на OpenCL алгоритм позволяет повысить плотность расчетной сетки в аксиальном направлении практически без потери времени расчетов.

Второй метод – метод переменных направлений [3; 16; 17]. Реализация продольно-поперечной разностной схемы позволяет на практике добиться второго порядка аппроксимации по временному шагу дискретизации $\mathcal{O}(\max |\tau|^2)$:

$$\bar{\rho}_{i,j} \bar{c}_V v_{i,j} \frac{\bar{T}_{i,j} - T_{i,j}}{0.5\tau} = \Lambda_r [T_{i,j}] + \Lambda_z [\bar{T}_{i,j}] + \bar{X}_{i,j}, \quad (11)$$

$$\bar{\rho}_{i,j} \bar{c}_V v_{i,j} \frac{\hat{T}_{i,j} - \bar{T}_{i,j}}{0.5\tau} = \Lambda_r [\hat{T}_{i,j}] + \Lambda_z [\bar{T}_{i,j}] + \bar{X}_{i,j}, \quad (12)$$

где $\bar{T}_{i,j}$ – температурное поле на полуслое (между следующим и текущим временными слоями), $\bar{\rho}_{i,j} = \rho(\bar{T}_{i,j})$, $\bar{c}_{V i,j} = c_V(\bar{T}_{i,j})$, и $\bar{X}_{i,j} = X(\bar{T}_{i,j})$.

С появлением и широким распространением ЦПУ, поддерживающих десятки параллельных вычислительных нитей, становится актуальной разработка алгоритмов параллельных вычислений на системах с общей памятью для численного решения начально-краевых задач на сетках с не очень большим числом узлов ($M = 101$ и $M = 201$). Параллелизация вычислений продольно-поперечной разностной схемой при решении задачи (1)–(2), (4) была реализована с использованием технологии OpenMP [22]. Производительность алгоритма (см. рисунок 6) на современных многоядерных ЦПУ согласуется с методическими примерами из литературы, например, с результатами вычислений с использованием локально-одномерных разностных схем для линейного параболического уравнения с постоянным шагом дискретизации [23; 24].

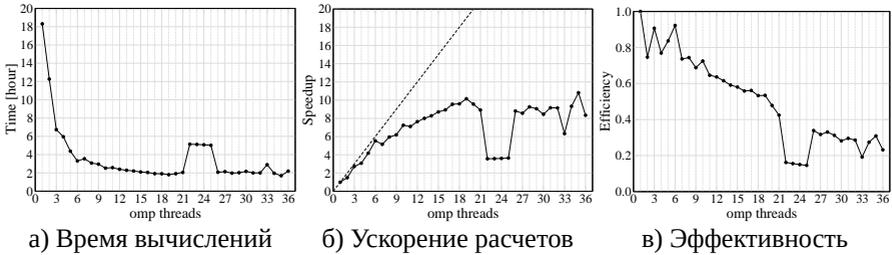


Рис. 6 — Производительность алгоритма параллельных вычислений, реализующего метод переменных направлений.

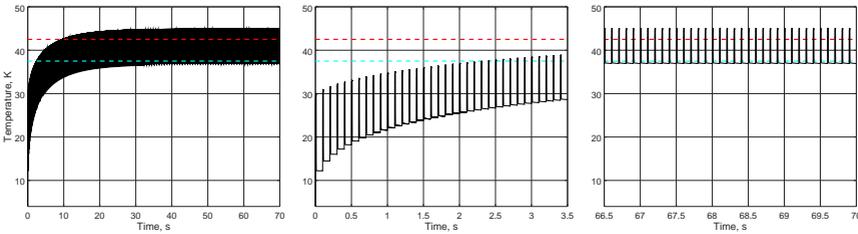


Рис. 7 — Эволюция температуры на поверхности при $z = 0$ (черная линия). Верхняя пунктирная линия красного цвета обозначает максимальную критическую температуру (42 K), а нижняя пунктирная линия голубого цвета – минимальную критическую температуру (37 K). Слева: зависимость температуры от времени от 0 до 70 сек. По центру: начало эволюции (первые 3.5 сек.). Справа: последние 3.5 сек. эволюции.

Данные алгоритмы позволили продемонстрировать принципиальную возможность реализации технологии «температурных створок» для импульсной инжекции газообразных смесей в ионизационную камеру источника ионов (см.

рисунок 7). Таким образом, численным моделированием подтверждена возможность существования альтернативы механическим створкам, надежная эксплуатация которых в миллисекундном диапазоне при криогенных температурах не представляется достижимой.

Параллельный алгоритм, реализующий продольно-поперечную схему, был далее интегрирован в гибридный MPI+OpenMP алгоритм для решения задачи оптимизации характеристик теплового источника (t_{per} , t_{src} , и I_0) импульсной криогенной ячейки.

В **четвертой главе** формулируется задача оптимизации эффективности функционирования импульсной криогенной ячейки, приводится описание разработанного и реализованного гибридного MPI+OpenMP алгоритма параллельных вычислений для решения задачи оптимизации.

С введением в строй суперкомпьютера «Говорун» в 2018 году [14] расширились возможности проведения масштабных научных расчетов и, в том числе, формулировки и решения задачи оптимизации характеристик теплового источника импульсной криогенной ячейки, приближенное решение которой сводится к многократному решению начально-краевой задачи для уравнения теплопроводности.

В ЛФВЭ ОИЯИ были проведены испытания криогенной ячейки [25] – экспериментальные результаты продемонстрировали, что функционирование такой ячейки (для метана в качестве рабочего вещества), будучи в целом удовлетворительным, тем не менее нуждается в дальнейшей оптимизации. Предлагаемый в данной главе алгоритм параллельных вычислений позволяет за приемлемое время найти оптимальные характеристики теплового источника для конкретной конфигурации ячейки и, вследствие этого, повышает эффективность исследования и проектирования данного устройства.

Оптимизация эффективности основывается на максимизации функционала, значение которого пропорционально количеству молекул рабочих газов, испаренных с поверхности ячейки при условии реализации «температурных створок», другими словами, максимизации их эффективности.

Формализуются условия, при которых установившийся температурный режим реализует «температурные створки»:

$$\begin{cases} T^{\min} < T_{\text{crit}}^{\min}, & (13a) \\ T^{\max} > T_{\text{crit}}^{\max}, & (13b) \\ T^{\max} \leq T_{\text{limit}}. & (13в) \end{cases}$$

При выполнении условия (13a) «температурные створки» считаются «закрытыми», а при выполнении условия (13б) – «открытыми». T_{limit} – ограничение на значение температуры сверху. При нарушении хотя бы одного условия (13) считается, что «температурные створки» не могут быть реализованы; в обратном случае достигается их функционирование.

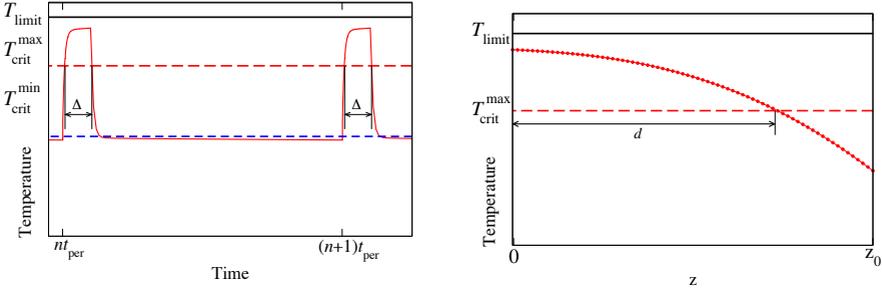


Рис. 8 — Зависимость температуры от времени в точке ($r = r_{\max}, z = 0$) (слева) и его распределение в аксиальном направлении при $r = r_{\max}$ (справа) в установившемся температурном режиме.

Параметры t_{per} и t_{src} являются свободными и могут варьироваться в некотором интервале. Амплитуда электрического тока, проходящего через проводящий слой I_0 , должна быть вычислена так, чтобы установившийся температурный режим удовлетворял указанным выше условиям, если это возможно.

При этом, с учетом условия (13в), чем больше и чем дольше значение температуры будет превышать максимальное критическое значение на как можно большей поверхности ячейки (см. рисунок 8), тем больше молекул требуемого газа будет испарено и попадет в область ионизации. Символом Δ обозначена длительность превышения значения T_{crit}^{\max} , а d обозначает длину, соответствующую площади цилиндрической поверхности, на которой значение температуры превышает T_{crit}^{\max} в конкретный момент времени. Эти положения позволяют сформулировать задачу оптимизации для нахождения таких значений t_{per} , t_{src} и I_0 , которые максимизируют количество испаренных молекул:

$$\{t_{\text{per}}, t_{\text{src}}, I_0\} = \arg \max \left(\int_{n t_{\text{per}}}^{(n+1) t_{\text{per}}} \iint_S F(t, z; I_0, t_{\text{per}}, t_{\text{src}}) ds dt \right), \quad (14)$$

где S – площадь поверхности цилиндра с радиусом r_{\max} и длиной z_0 , а функция $F(t, z)$ выражается следующим образом:

$$F(t, z) = \max [0, T(t, r_{\max}, z) - T_{\text{crit}}^{\max}]. \quad (15)$$

Отметим здесь, что в случае нарушения хотя бы одного из условий (13) значение интеграла полагается равным нулю.

В теории оптимизации существует большое количество эффективных алгоритмов нахождения глобального экстремума: как детерминированные методы, зачастую требующие вычисления первой, а иногда и второй производной (гессiana), так и стохастические методы, например, роевые или генетические. Однако при наличии достаточного объема вычислительных ресурсов для классов задач, требующих большого количества времени для вычисления одного значения

функции (в нашем случае от суток до четырех), эффективным может быть использование метода перебора:

- (1) дискретизировать область поиска,
- (2) вычислить значения функции параллельно на каждом узле сетки и,
- (3) сравнивая полученные значения, найти оптимальное.

Предполагается, что дискретизация достаточно плотная, а функция в области поиска не имеет дельтообразного поведения. Учитывая вышесказанное, метод перебора был выбран для решения задачи (14).

Алгоритм решения задачи (14) состоит из следующих основных этапов:

1. Дискретизация области поиска в пространстве параметров $t_{\text{per}} \times t_{\text{src}}$:

$$\mathbb{T} = \left\{ (t_{\text{per}}, t_{\text{src}}) \mid \begin{array}{l} t_{\text{per}}^{\min} \leq t_{\text{per}} \leq t_{\text{per}}^{\max}, \quad t_{\text{per}}^{(p+1)} = t_{\text{per}}^{(p)} + \Delta t_{\text{per}}^{(p)}, \quad p = 1, \dots, M_p; \\ t_{\text{src}}^{\min} \leq t_{\text{src}} \leq 0,5 t_{\text{per}}, \quad t_{\text{src}}^{(q+1)} = t_{\text{src}}^{(q)} + \Delta t_{\text{src}}^{(q)}, \quad q = 1, \dots, M_q \end{array} \right\} \quad (16)$$

В программной реализации алгоритма множество \mathbb{T} задается в виде таблицы во входном файле.

2. Для каждого элемента конечного множества \mathbb{T} методом дихотомии решается задача управления источником:

$$I_0^{(p,q)} = \arg \max \left(2 \pi r_{\max} \int_{n t_{\text{per}}}^{(n+1) t_{\text{per}}} \int_0^{z_0} F(t, z; I_0^{(p,q)}, t_{\text{per}}^{(p)}, t_{\text{src}}^{(q)}) dz dt \right). \quad (17)$$

На каждой итерации дихотомии решается прямая задача теплопроводности (1)–(2), (4). При этом, если решение прямой задачи нарушает хотя бы одно из условий (13), значению интеграла I^* в (17) присваивается ноль.

3. Из конечного множества решений задачи (17) выбирается максимальное значение интеграла и записываются соответствующие ему параметры t_{per} , t_{src} и I_0 . Выбор осуществляется путем сортировки таблицы $(t_{\text{per}}, t_{\text{src}}, I_0, I^*)$ по убыванию значения интеграла в (17).

На главном (втором) шаге алгоритма, задачи управления источником решаются независимо для каждой пары индексов p и q , соответственно, решение каждой задачи может быть выполнено параллельно. Параллельные вычисления были реализованы с использованием технологии Message Passing Interface (MPI) [26] на основе модели «мастер/рабочие» [10]. Процесс-мастер не участвует в расчетах, а выполняет управляющие функции, такие как: распределение задач по рабочим, мониторинг освободившихся процессов, чтобы назначить им расчеты для следующей пары параметров t_{per} и t_{src} (что позволяет более эффективно распределить загрузку процессоров), сбор результатов, их сортировка и выбор оптимального решения.

Задача оптимизации решалась на суперкомпьютере «Говорун» [21], в вычисления были вовлечены 70 ЦПУ Intel Xeon Gold 6154 с использованием

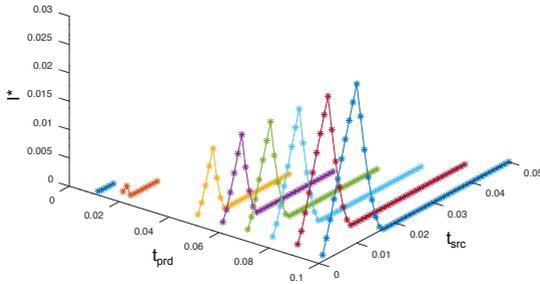


Рис. 9 — Зависимость решения задачи управления источником от параметров t_{per} и t_{src} .

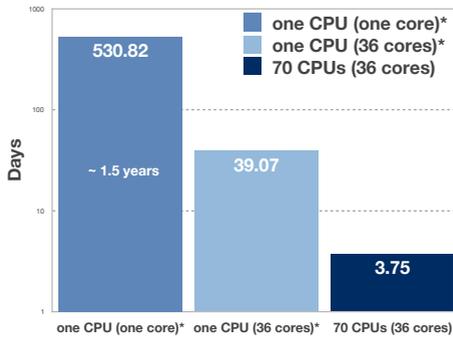


Рис. 10 — Время расчетов и оценка времени расчетов (указаны звездочками) на суперкомпьютере «Говорун».

гиперпоточности, при этом дополнительное вычислительное ядро использовалось для управления в модели «мастер/рабочие». На рисунке 9 приведена зависимость максимального значения интеграла в (17) от параметров (t_{per} и t_{src}). Из графика видно, что решение задачи (14) достигается при максимальном значении t_{per} .

На рисунке 10 представлено ускорение расчетов. В правом столбце – время решения задачи (14) – это время, которое получено на MPI-процессе «мастер» от начала запуска программы до выдачи результата. Средний столбец – оценка решения задачи на одном процессоре Intel Xeon Gold 6154 (SkyLake) с 18-ю ядрами и многopotочностью (36 нитей), данная оценка получается суммированием времени расчетов на рабочих MPI-процессах. Левый столбец – это оценка времени, полученная путём произведения среднего ускорения решения с использованием 36 OpenMP-нитей рабочими MPI-процессами на оценку времени решения на одном процессоре.

Разработанный многоуровневый алгоритм параллельных вычислений для решения задачи оптимизации дает возможность дальнейшего эффективного исследования реализующих «температурные створки» устройств для импульсной

инъекции рабочих газов в ионизационную камеру источника ионов. Вычисления для конкретной конфигурации ячейки на суперкомпьютере «Говорун» демонстрируют значительное ускорение расчетов (см. рисунок 10).

Пятая глава посвящена исследованию возможности максимизации рабочей поверхности плоской ячейки постоянной инъекции молекул собственного материала в ионизационную камеру источника ионов [2]. Для этого была предложена новая однопараметрическая геометрическая форма пластины (см. рисунок 2 на странице 10). Новая форма получена путем удаления прямоугольных частей из углов исходной прямоугольной пластины. Длина возникших прямоугольных «крыльев» принималась в качестве свободного параметра.

Подача рабочих газов достигается, когда температура на поверхности достигает требуемой *критической* величины T_{low} , которая зависит от материала пластины – это значение определяется требуемым давлением насыщенного пара над поверхностью пластины. Существует также ограничение на максимальное (предельное) значение температуры T_{high} в пластине, которая должна быть значительно меньше температуры плавления материала во избежание тепловой деформации. *Рабочей поверхностью* называется область на поверхности, в каждой точке которой значение температуры находится в диапазоне $[T_{low}, T_{high}]$.

Для максимизации рабочей области пластины, нагретой в диапазоне температур $[T_{low}, T_{high}]$, формулируется задача оптимизации:

$$\{l, I_0\} = \arg \max [S(l, I_0)], \quad (18)$$

где функция от параметров $S(l, I_0)$ определяется через значение площади рабочей поверхности $\sigma(l, I_0)$:

$$S(l, I_0) = \begin{cases} 0, & \text{если } \exists (x, z) \in \bar{\Omega}_L \text{ для которого } T(x, z) > T_{high}, \\ \sigma(l, I_0), & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (19)$$

сама $\sigma(l, I_0)$ выражается как

$$\sigma(l, I_0) = 4 \iint_{\Omega_L} \nu(x, z; l, I_0) dx dz, \quad (20)$$

где $\nu(x, z; l, I_0)$ определяется как функция принадлежности точки области Ω_L к рабочей поверхности (характеристическая функция рабочей поверхности):

$$\nu(x, z; l, I_0) = \begin{cases} 0, & \text{если } T(x, z; l, I_0) < T_{low}, \\ 1, & \text{если } T(x, z; l, I_0) \geq T_{low}, \end{cases} \quad (21)$$

здесь $T(x, z; l, I_0)$ есть стационарное распределение температуры в области Ω_L . Распределение температурного поля в пластине описывается стационарным решением начально-краевой задачи (3)–(4), которая численно решается конечно-разностным методом.

Предлагаемый алгоритм численного решения задачи оптимизации приводит к многократному решению задачи управления источником (22) и, как следствие, к многократному решению прямой задачи (3)–(4) и состоит из следующих основных шагов:

1. Дискретизируется полудлина «крыльев» $l \in [0, L]$ с числом точек N_{wings} с равномерным шагом $h_l = L/(N_{\text{wings}} - 1)$, причем при $l = 0$ ширина пластины принимается $w_b = w$.
2. Решается задача управления источником для каждого значения l :

$$I_{0l} = \arg \max [S(l, I_0)], \quad (22)$$

т. е. находится такое значение силы электрического тока I_{0l} , для которого с некоторой наперед заданной точностью выполняется условие

$$T(x, z, l, I_{0l})|_{x=0, z=0} = T_{\text{high}}. \quad (23)$$

Отметим, что ограничение на максимальную температуру применяется к центральной точке пластины ($x = 0, z = 0$), так как она, вследствие однородности пластины и симметрии теплового поля относительно осей Ox и Oz , является наиболее горячей в $\bar{\Omega}_L$. Сама задача управления источником численно решается методом деления отрезка пополам.

3. Вычисляется значение площади рабочей поверхности по формуле (20).
4. Находится пара (l^*, I_0^*) , соответствующая максимальному значению S^* в получившейся таблице (l, I_{0l}, S_l) , где $S_l = S(l, I_{0l})$, а $l = 0, \dots, N_{\text{wings}}$:

$$\{l, I_{0l}\} = \arg \max_{1 \leq l \leq N_{\text{wings}}} S_l, \quad (24)$$

которое соответствует численному решению задачи оптимизации (14)–(21).

Отметим, что площадь рабочей поверхности рассчитывалась на исходной сетке по формуле

$$\sigma(l, I_0) = 4 \sum_{\substack{0 \leq i < N, \\ 0 \leq j < M}} \mu_{i,j} h \eta, \quad (25)$$

с сеточным аналогом функции (21):

$$\mu_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{если } 0.25 [T_{i+1,j} + T_{i+1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j+1}] < T_{\text{low}}, \\ 1, & \text{если } 0.25 [T_{i+1,j} + T_{i+1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j+1}] \geq T_{\text{low}}. \end{cases} \quad (26)$$

Алгоритм параллельных вычислений для решения задачи оптимизации был реализован с использованием технологии Message Passing Interface (MPI)

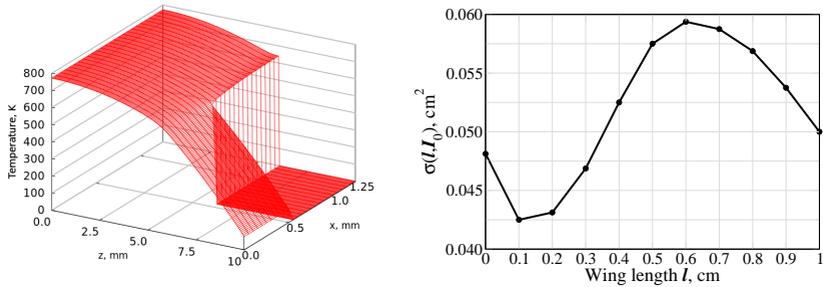


Рис. 11 — Температурное поле в плоской ячейке для $l = 0.6L$, а $I_0 = 385$ (слева) и зависимость площади рабочей поверхности от полудлины «крыла» (справа).

[26]. Так, для каждого значения l_i отдельным MPI-процессом параллельно решается задача управления источником. Затем управляющий процесс находит максимальное значение параметра S^* и соответствующие значения полудлины «крыла» l^* , силы тока I_0^* и времени выхода на стационарное решение.

В рамках выбранной геометрической формы была найдена максимально возможная площадь рабочей поверхности и значения параметров, её обеспечивающих (см. рисунок 11). Решение задачи оптимизации показывает, что рабочую поверхность можно увеличить на 23,5% по сравнению с исходной прямоугольной формой пластины.

В **заключении** приведены основные результаты диссертационной работы и перспективы дальнейшего использования полученных результатов.

В рамках компьютерного моделирования продемонстрирована принципиальная возможность реализации «температурных створок» как альтернативы механическим створкам, надежная эксплуатация которых в миллисекундном диапазоне при криогенных температурах не представляется достижимой. А именно, получен периодический температурный режим, обеспечивающий функционирование « температурных створок».

В рамках вычислительного эксперимента найдено, что время установления «температурных створок» в сотни раз превышает время одного периода инъекции. Этот факт должен быть принят во внимание при проектировании и эксплуатации импульсной криогенной ячейки дозированной подачи молекул в источник ионов.

Разработанные алгоритмы реализованы и объединены в программный комплекс Orhelia, который в дальнейшем будет применяться в ЛФВЭ ОИ-ЯИ для проектирования и оптимизации реализующих «температурные створки» устройств импульсной инъекции рабочих газов в источник ионов.

Для плоской ячейки постоянной инъекции была показана возможность увеличения рабочей поверхности (области, участвующей в процессе инъекции) путём изменения её геометрической формы, рассмотренной в данной диссертации. Разработанные диссертационной работе алгоритмы и программы

применимы для дальнейшего исследования возможности ещё большего увеличения рабочей поверхности в рамках других геометрических форм.

Публикации автора по теме диссертации

- A1. Ayriyan, A. Computational experiment in era of HPC / A. Ayriyan // *Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science*. — 2019. — Т. 27, № 3. — С. 263—267. — DOI: [10.22363/2658-4670-2019-27-3-263-267](https://doi.org/10.22363/2658-4670-2019-27-3-263-267). — URL: <http://journals.rudn.ru/miph/article/view/22704>.
- A2. Ayriyan, A. Numerical Algorithm for Simulation of Thermal Processes in Four Layer Cylindrical Object / A. Ayriyan, J. Pribis // *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics*. — 2014. — № 2. — С. 67—71. — URL: <http://journals.rudn.ru/miph/article/view/8347>.
- A3. Ayriyan, A. Model with One Spatial Variable for Design of a Technical Device / A. Ayriyan // *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics*. — 2013. — № 2. — С. 89—93. — URL: <http://journals.rudn.ru/miph/article/view/8533>.
- A4. Решение задачи оптимизации для проектирования импульсной криогенной ячейки / А. С. Айриян [и др.] // Письма в журнал «Физика элементарных частиц и атомного ядра». — 2019. — Т. 16, 3(222). — С. 277—290. — URL: http://www1.jinr.ru/Pepan_letters/panl_2019_3/16_Ayriyan.pdf; *Physics of Particles and Nuclei Letters* 16(3), pp. 300-309 (2019), <https://doi.org/10.1134/S1547477119030026>. — (Scopus, WoS).
- A5. Ayriyan, A. Parallel Algorithm for Numerical Solution of Heat Equation in Complex Cylindrical Domain / A. Ayriyan, J. Buša Jr. // *Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science*. — 2019. — Т. 27, № 1. — С. 22—33. — DOI: [10.22363/2658-4670-2019-27-1-22-33](https://doi.org/10.22363/2658-4670-2019-27-1-22-33). — URL: <https://doi.org/10.22363/2658-4670-2019-27-1-22-33>.
- A6. Algorithm and Simulation of Heat Conduction Process for Design of a Thin Multilayer Technical Device / A. Ayriyan [и др.] // *Applied Thermal Engineering*. — 2016. — Т. 94, № 5. — С. 151—158. — DOI: [10.1016/j.applthermaleng.2015.10.095](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.10.095). — URL: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.10.095>. — (Scopus, WoS).
- A7. Algorithm for Solving the Optimization Problem for the Temperature Distribution on a Plate / A. Ayriyan [и др.] // *European Physical Journal WoC*. — 2016. — Т. 108. — С. 02010. — DOI: [10.1051/epjconf/201610802010](https://doi.org/10.1051/epjconf/201610802010). — URL: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201610802010>. — (Scopus, WoS).

- A8. Computational Scheme for Solving Heat Conduction Problem in Multilayer Cylindrical Domain / A. Ayriyan [и др.] // RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics. — 2015. — № 1. — С. 53–59. — URL: <http://journals.rudn.ru/miph/article/view/8568>.
- A9. Numerical Simulation of Heat Conductivity in Composite Object with Cylindrical Symmetry / A. Ayriyan [и др.] // Lecture Notes in Computer Science. — 2012. — Т. 7125. — С. 264–269. — DOI: [10.1007/978-3-642-28212-6_31](https://doi.org/10.1007/978-3-642-28212-6_31). — URL: https://doi.org/10.1007/978-3-642-28212-6_31. — (Scopus).
- A10. Айриян, А. С. Моделирование процесса теплопроводности в составном образце с цилиндрической симметрией / А. С. Айриян, Я. Прибиш // Математическое моделирование. — 2012. — Т. 24, № 12. — С. 113–118. — URL: <http://mi.mathnet.ru/rus/mm/v24/i12/p113>.
- A11. OpenCL Realization of Algorithm for Modelling of Heat Conducting Process / A. Ayriyan [и др.] // JINR LIT Scientific Report 2012-2013 / под ред. Gh. Adam [и др.]. — Laboratory of Information Technologies of JINR. Dubna, 2014. — Гл. Numerical Algorithms and Computational Physics. С. 89–91. — URL: http://lit.jinr.ru/Reports/SC_report_12-13/p89.pdf.
- A12. Parallel algorithm for heat conduction problem / A. Ayriyan [и др.] // JINR LIT Scientific Report 2010-2011 / под ред. Gh. Adam [и др.]. — Laboratory of Information Technologies of JINR. Dubna, 2011. — Гл. Numerical Algorithms and Computational Physics. С. 156–157. — URL: http://lit.jinr.ru/Reports/SC_report_10-11/LIT-Rep-2010-2011SC.htm.
- A13. Ayriyan, A. OpenCL Realization of Algorithm for Modelling of Heat Transfer / A. Ayriyan, J. Busa Jr., J. Pribis // Proceedings of the XVIII International Scientific Conferences of Young Scientists and Specialists (AYSS'14). — Dubna : JINR Publishing Department, 2014. — Гл. Mathematical Modelling and Computational Physics. С. 57–60.
- A14. Алгоритмы численного моделирования тепловых процессов с периодическим источником / А. С. Айриян [и др.] // Труды научных сессий МИФИ – 2014. Т. 2. — 2014. — Гл. Методы математической физики и математическое моделирование физических процессов. С. 13. — URL: <http://library.mephi.ru/934/935/scientific-sessions?Year=2014>.
- A15. Айриян, А. Моделирование процесса теплопроводности в составном образце при криогенных температурах / А. Айриян // Тезисы докладов Всероссийской конференции с международным участием “Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем”, Москва, РУДН, 23–27 апреля 2012 года. — 2012. — С. 227–229. — URL: http://conf.sci.pfu.edu.ru/public/conferences/2/schedConfs/3/ittmm-2012_print.pdf.

- A16. Айриян, А. Моделирование процесса теплопроводности в составном образце с цилиндрической симметрией / А. Айриян, Я. Прибиш // Тезисы докладов Международной молодёжной конференции-школы “Современные проблемы прикладной математики и информатики”. — 2012. — С. 40—41.

Список литературы

1. Production of highly charged ion beams Kr³²⁺, Xe⁴⁴⁺, Au⁵⁴⁺ with Electron String Ion Source(ESIS) Krion-2 and corresponding basic and applied studies / D. E. Donets [et al.] // Journal of Instrumentation. — 2010. — Vol. 5, no. C09001. — DOI: [10.1088/1748-0221/5/09/C09001](https://doi.org/10.1088/1748-0221/5/09/C09001). — URL: <https://doi.org/10.1088/1748-0221/5/09/C09001>.
2. Status report on recent developments in physics and technology of Electron String Ion Sources (ESIS) / A. Y. Boytsov [et al.] // Program of the 13th International Symposium on Electron Beam Ion Sources and Traps. — Fudan University Shanghai China. — P. 32. — URL: <https://ebist2018.fudan.edu.cn> ; Plenary talk given by E. E. Donets.
3. *Peaceman, D. W.* The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations / D. W. Peaceman, H. H. R. Jr. // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. — 1955. — Vol. 3, no. 1. — P. 28—41. — DOI: [10.1137/0103003](https://doi.org/10.1137/0103003). — URL: <https://doi.org/10.1137/0103003>.
4. *Старченко, А.* Методы параллельных вычислений / А. Старченко, В. Берцун. — Томск : Издательство Томского университета, 2013.
5. *Dournac, F.* MPI Numerical solving of the 2D Heat equation / F. Dournac. — 2018. — URL: https://dournac.org/info/parallel_heat2d.
6. *Dournac, F.* MPI Parallelization for numerically solving the 3D Heat equation / F. Dournac. — 2018. — URL: https://dournac.org/info/parallel_heat3d.
7. *Austin, T.* A memory efficient parallel tridiagonal solver / T. Austin, M. Berndt, D. Moulton. — 2004. — URL: <https://www.researchgate.net/publication/250802261> ; Los Alamos National Laboratory. Preprint LA-UR-03-4149.
8. Численное исследование распада возмущенных стационарных решений системы уравнений Янга–Миллса с дилатоном с использованием технологии MPI / Э. Айрян [и др.] // Математическое моделирование. — 2005. — Т. 17, № 6. — С. 103—121. — URL: <http://mi.mathnet.ru/rus/mm/v17/i6/p103>.
9. *Veneva, M.* Development of Efficient Methods of Solving Systems of Linear Algebraic Equations Whose Matrices Have Striped Structure / M. Veneva. — 02/2020. — URL: <https://math.bas.bg/en/event/mathematical-modeling-and-numerical-analysis-seminar-4/> ; Seminar of the Department of Mathematical Modeling and Numerical Analysis (IMI BAN), Sofia, Bulgaria.

10. *Воеводин, В.* Параллельные вычисления / В. Воеводин, В. Воеводин. — Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2002.
11. *Воеводин, В.* Вычислительная математика и структура алгоритмов / В. Воеводин. — Москва : Издательство МГУ, 2006.
12. *Четверушкин, Б.* Прикладная математика и проблема использования высокопроизводительных вычислительных систем / Б. Четверушкин // Труды МИФИ. — 2011. — Т. 3, № 4. — С. 55—67. — URL: https://mipt.ru/science/trudy/trudy_mipt_12.php.
13. *Четверушкин, Б.* Явные схемы и моделирование на вычислительных системах сверхвысокой производительности / Б. Четверушкин, А. Гулин // Доклады академии наук. — 2012. — Т. 446, № 5. — С. 501—503. — URL: https://mipt.ru/upload/8e0/Pages_55-67__from_trudy3_4_final_3nov_morning-8-arphcx1tgs.pdf.
14. Суперкомпьютер «Говорун». — Дата последнего обращения: 25.07.2020. http://hlit.jinr.ru/about_govorun/.
15. *Самарский, А. А.* Теория разностных схем / А. А. Самарский. — Москва : Наука, 1983.
16. *Samarskii, A. A.* Computational Heat Transfer. Vol. 1 / A. A. Samarskii, P. N. Vabishchevich. — Chichester, UK : John Wiley & Sons Ltd., 1995.
17. *Калиткин, Н. Н.* Численные методы / Н. Н. Калиткин. — 2-ое издание. — Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2011.
18. *Бессонов, Л. А.* Теоретические основы электротехники. Электрические цепи / Л. А. Бессонов. — Москва : Гардарики, 2007. — 701 с.
19. *Кузнецов, Г.* Разностные методы решения задач теплопроводности / Г. Кузнецов, М. Шеремет. — Томск : Издательство Томского политехнического университета, 2007.
20. Open Computing Language (OpenCL). — Дата последнего обращения: 20.06.2020. <https://www.khronos.org/opencv/>.
21. IT-ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform for high-performance computing and training of IT-specialists / G. Adam [et al.] // CEUR Workshop Proceedings. Vol. 2267 / ed. by V. Korenkov [et al.]. — 2018. — P. 638—644.
22. *Dagum, L.* OpenMP: an industry standard API for shared-memory programming / L. Dagum, R. Menon // Computational Science & Engineering, IEEE. — 1998. — Т. 5, № 1. — С. 46—55.

23. Tokareva, V. A. Parallel realizations of locally one-dimensional difference schemes for solving the initial-boundary value problems for the multidimensional heat equation / V. A. Tokareva, O. I. Streltsova, M. I. Zuev // Proceedings of the The XX International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2016) / ed. by A. V. Friesen, V. Chudoba. — 2016. — P. 142—147. — URL: https://indico.jinr.ru/event/73/attachments/4813/6312/AYSS_proceedings_final.pdf.
24. Schuster, M. D. The Heat Equation: High-Performance Scientific Computing Case Study / M. D. Schuster // Computing in Science & Engineering. — 2018. — T. 20, № 5. — С. 114—127. — DOI: [10.1109/MCSE.2018.05329820](https://doi.org/10.1109/MCSE.2018.05329820). — URL: <https://doi.org/10.1109/MCSE.2018.05329820>.
25. Physics research and technology developments of electron string ion sources / D. E. Donets [et al.] // Review of Scientific Instruments. — 2012. — Vol. 83, 02A512. — DOI: [10.1063/1.3678660](https://doi.org/10.1063/1.3678660). — URL: <https://doi.org/10.1063/1.3678660>.
26. Chapter 9 - Message Passing Interface / B. Schmidt [и др.] // Parallel Programming / под ред. B. Schmidt [и др.]. — Morgan Kaufmann, 2018. — С. 315—364. — DOI: [10.1016/B978-0-12-849890-3.00009-5](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-849890-3.00009-5). — URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128498903000095>.

Айриян Александр Сергикович

Численное моделирование тепловых процессов в ячейках подачи молекул в источник ионов

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать _____.____._____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____

