

M.K. Ammosov North-Eastern Federal University
Северо-Восточный федеральный университет
им. М.К. Аммосова

**Second international conference
SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES OF
MATHEMATICAL MODELLING**

**Вторая международная конференция
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Abstracts

Тезисы докладов

**July, 8 – 11, 2013 / 8 – 11 июля 2013 г.
Yakutsk, Russia / Якутск, Россия**

Суперкомпьютерные технологии математического моделирования: Тез. докл. / Под редакцией В.И. Васильева – Якутск: Издательский дом СВФУ, 2013. – 116 с.

This collection of abstracts presented at second International Conference *Supercomputer technologies of mathematical modelling*

В сборник включены тезисы докладов, представленных на вторую международную конференцию *Суперкомпьютерные технологии математического моделирования*

TABLE OF CONTENTS

<i>Afanas'eva N.M.</i> Stable schemes for convection-diffusion-reaction problems	9
<i>Boletin S.V.</i> Nearly collision trajectories of the problem of n gravitating bodies	11
<i>Bondarev E.A., Rozhin I.I., Argunova K.K.</i> Simulation of hydrate formation in gas wells at thermal interaction with rocks	12
<i>Butrin A.G.</i> Economical and mathematical modeling of flow process in industrial enterprises	13
<i>Carstensen C.</i> Five Trends in the Mathematical Foundation of Computational PDEs	14
<i>Chashechkin Yu.D.</i> Differential fluid mechanics: compatible analytical, numerical, and laboratory models of stratified flows	15
<i>Cheng Q., Sun Y.R., Zhao Y.D., Xue X.Z., Huang X.F., Vasilyev V.I., Danilov Y.G., Eremeev I.S., Popov V.V.</i> Experimental validation of couple-heat-water-transfer PDE model by in-situ determination of soil freezing characteristic curve	17
<i>Cho S.-Y.</i> Tractable Topology for Task Assignment on Multicomputers with Dedicated Control Units	18
<i>Chugainova A.P.</i> Nonstationary solutions of the generalized Korteweg-de Vries-Burgers equation	20
<i>Csörgő G.</i> Splitting method for shallow water equations . .	21
<i>Demidov G.V., Mikhailenko B.G., Martynov V.N.</i> Application of the Laguerre step-by-step transformation for solving dynamic problems	22
<i>Faragó I.</i> Reliable numerical models for diffusion problems .	23

<i>Fu Y.B.</i> Localized bulging in inflated membrane tubes: characterization, stability, and applications	25
<i>Gavrilieva A.A., Gubarev Yu.G.</i> To adequacy problem un-stability of steady-state plane-parallel shearing flows in ideal stratified fluid	27
<i>Goloviznin V.M., Glotov V.Yu., Markesteyn A.P., Karabasov S.A.</i> Computational modelling of multiscale problems of fluctuating hydrodynamics	29
<i>Gonsai A., Goswami B., Kar N.</i> Study of Supercomputer's Architecture, Application and Its Future Use	30
<i>Grigoriev A.V.</i> Explicit-implicit schemes of double porosity model	32
<i>He X., Cheng J., Liu T.</i> CUDA Flow Solver Based on RKDG Method on Two-Dimensional Unstructured Grids	33
<i>Il'ichev A.T.</i> Competition of stabilizing and destabilizing factors and bifurcation of phase transition fronts in geothermal systems	35
<i>Imomnazarov Kh.Kh., Nyago V.A.</i> Numerical modelling of wave fields in porous media (reversible case)	36
<i>Jiang Z.W.</i> High Accuracy Quasi interpolation of Radial Basis Functions	38
<i>Kaplunov J.D.</i> Dynamic homogenization for periodic and functionally graded structures	39
<i>Keating J., Minev P.D.</i> A Direction Splitting Algorithm for Particulate Flows	40
<i>Kumar S.</i> Discontinuous Galerkin finite volume element methods and its applications to miscible displacement problems in porous media	41
<i>Kumar V.</i> Application of High Performance Computing in Compressible Flow Simulation for Aerospace Applications	42
<i>Kutcev A.R.</i> Modeling of non-stationary process of conjugate heat exchange between the mountain range and mine air with the use of computing on graphics processors NVIDIA CUDA	43
<i>Laeovsky Yu., Kandryukova T.</i> Filtration gas combustion . .	44
<i>Levin V.A., Manuylovich I.S., Markov V.V.</i> New approaches to the initiation of gaseous detonation	46

<i>Levin V.A., Manuylovich I.S., Markov V.V.</i> Simulation of multi-dimensional structures of gas detonation: multi-headed and spin modes	47
<i>Su L.D., Jiang Z.W., Jiang T.S.</i> Numerical solution for a kind of nonlinear telegraph equations using radial basis functions	48
<i>Matus P.P.</i> On stability of difference schemes for nonlinear evolutional problems	49
<i>Mikhailenko B.G., Glinsky B.M.</i> Supercomputer technologies solution large problems in the Siberian supercomputer center	51
<i>Mikhailenko B.G., Mikhailov A.A.</i> Numerical modeling of acoustic-gravity waves propagation in a model "Earth-Atmosphere"with wind	53
<i>Imomnazarov Kh.Kh., Mikhailov A.A.</i> Numerical modeling of seismic fields in viscoelastic and porous media for dissipative case	55
<i>Muratova G.V., Soldatov A.V.</i> The research of 3d nanostructure of materials using supercomputer technologies	57
<i>Ostapenko V.V.</i> Finite difference schemes for systems of conservation laws	58
<i>Pavlova N.V., Vasilyeva M.V.</i> Numerical simulation of artificial soil freezing on high-performance systems	59
<i>Qiu J.L.</i> Dynamics of high-order hopfield neural networks with time delays	60
<i>Semiletov V., Karabasov S.</i> Cabaret-code based on monotonically integrated les with acoustic post-processing for aerodynamic and aeroacoustic simulations on supercomputer	61
<i>Shargatov V.A.</i> Numerical modeling of filtration flows and evaporation fronts in low permeability nonwettable porous medium	62
<i>Sidnyaev N.I.</i> Theoretical studies of nonstationary flow of a highspeed aircraft in the conditions of the destruction of the surface	63
<i>Titarev V.A., Utyuzhnikov S.V.</i> Numerical modeling of rarefied gas flows on supercomputers	65

<i>Tsichritzis D., Hristopulos D.T.</i> The triangle of knowledge applied in a remote region	67
<i>Tsyplkin G.G.</i> Sealing of permeable porous media and multi-valued solution	68
<i>Vasilyev V.I., Popov V.V.</i> The iterative solution of the inverse problem for the equation of oscillations of a string	71
<i>Xin W., Shaydurov V.</i> Runge-Kutta Method Applied in Continuity Equations	72
<i>Yun I.D., Park S.H.</i> Medical image segmentation using MRF-based optimization	74
<i>Zakharov P.E.</i> Domain decomposition schemes without overlapping subdomains for the parabolic problems	76
<i>Zotina V.O.</i> The development of the finite-element algorithm on the basis of a mixed functional of the solution of the plane problem of heat conductivity with the use of high-performance computing on a supercomputer "PSU-TESLA"	77
<i>Аслеев А.В.</i> Современные тенденции разработки высокопроизводительных приложений: обзор новейших программных инструментов Intel, примеры их эффективного использования и специальные программы Intel для поддержки разработчиков	78
<i>Акимов М.П.</i> Численное исследование динамики температурного поля многолетнемерзлых грунтов при воздействии бесканальных подземных трубопроводов теплоснабжения	80
<i>Антонов М.Ю., Науменкова Т.В., Левцова О.В., Шайтан К.В.</i> Исследование трансемembrанной диффузии методами компьютерного моделирования	82
<i>Булатов В.В., Владимиров Ю.В.</i> Фундаментальные проблемы моделирования волновой динамики природных стратифицированных сред: теория, натурные наблюдения, приложения	84
<i>Вабищевич П.Н., Васильев В.И.</i> Вычислительные технологии: подготовка специалистов	87
<i>Гилева Л.В., Шайдуров В.В.</i> Эрмитов треугольный элемент с 13-ю степенями свободы	89

<i>Добронец Б.С.</i> Суперсходимость решений метода конечных элементов с эрмитовым базисом	91
<i>Елизарова Т.Г., Булатов О.В.</i> Эффективные численные методы в задачах механики сплошной среды на основе регуляризованных уравнений мелкой воды	93
<i>Емец О.А., Емец Е.М., Олексийчук Ю.Ф.</i> Метод имитации отжига для комбинаторной задачи нахождения максимального потока	94
<i>Кабанихин С.И.</i> Обратные задачи - теория и приложения	95
<i>Касаткина Е.В., Насридинова Д.Д.</i> Структурная оптимизация нейросетевых моделей	96
<i>Крукнер Л.А., Муратова Г.В., Чикун А.Л., Дацюк В.Н.</i> Использование высокопроизводительных вычислительных систем при моделировании задач экологии региона	97
<i>Кудрявцев А.О., Аветисян А.И.</i> Обеспечение переноса высокопроизводительных вычислений в облако	99
<i>Лазарев Н.П.</i> Формула Гриффитса для пластины Тимошенко, содержащей криволинейную трещину	101
<i>Мельник О.Э., Афанасьев А.А., Вагнер А.В.</i> Суперкомпьютерное моделирование в задачах гидромеханики	102
<i>Моисеев Е.И., Ложский С.А., Тихомиров В.В.</i> Наиболее значимые результаты 2012 года, полученные на факультете ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова	105
<i>Тишкун В.Ф.</i> Применение разрывного метода Галеркина для решения задач гидродинамики на нерегулярных сетках	108
<i>Четверушкин Б.Н.</i> Высокопроизводительные вычисления и математические модели в задачах механики сплошной среды	109
<i>Шайдуров В.В.</i> Аппроксимация уравнений Навье-Стокса: комбинация методов траекторий и конечных элементов	110
<i>Эверстов В.В.</i> Алгоритм решения двумерной механической задачи	112

<i>Яковлев П.Г. Обобщение метода Кабаре на треугольные сетки</i>	114
--	-----

STABLE SCHEMES FOR CONVECTION-DIFFUSION-REACTION PROBLEMS

Afanas'eva N. M.

*Center of computational technologies NEFU, Yakutsk, Russia;
afanasieva_nm@gmail.com*

In the mathematical modeling of continuum mechanics problems, special attention should be given to convection-diffusion-reaction problems. Additional terms of parabolic equations, that describe chemical reactions, lead to the fact that the norm of the solution can grow exponentially with time. Difference schemes for the approximate solution of such problems must take into account these features. To solve the time-dependent problems, explicit-implicit schemes, when some part of terms of the problem operator is approximated by the explicit relations, whereas other part is discretized via implicit formulas, are widely used [1]. We consider a distinct approach to the construction of unconditionally stable schemes for unsteady convection-diffusion-reaction problems, which ideologically adjoin to the so-called nonstandard schemes. Some examples of using such nonstandard discretizations in time can be found, e.g., in [2,3]. Difference schemes that more accurately take into account peculiarities of the considered time-dependent problems are based on the introduction of the new unknown variable in the standard two-level schemes with weights [4]. Stability conditions of these schemes are considered in different norms of grid functions [5].

REFERENCES

1. P.N. Vabishchevich, and M.V. Vasil'eva, Explicit-implicit schemes for convection-diffusion-reaction problems, Siberian J. Num. Math., 15 (2012), no.4, pp.359–369.
2. R.E. Mickens, Nonstandard Finite Difference Schemes for Differential Equations. Journal of Difference Equations and Applications, 8 (2002), no.9, pp. 823-847.
3. R.E. Mickens, Advances in the applications of nonstandard finite difference schemes, World Scientific, New Jersey, 2005.
4. N.M. Afanaseva, P.N. Vabishchevich, and M.V. Vasil'eva, Unconditionally stable schemes for convection-diffusion problems, Russian Mathematics, 57 (2013), no. 3, pp.1-11.

5. N.M. Afanas'eva, A.G. Churbanov, P.N. Vabishchevich, Unconditionally monotone schemes for unsteady convection-diffusion problems, Computational Methods in Applied Mathematics, 13 (2013), no. 2, pp. 185–205.

**NEARLY COLLISION TRAJECTORIES OF THE PROBLEM OF N
GRAVITATING BODIES¹**

Bolotin S. V.

Steklov Mathematical Institute, Moscow, Russia;
bolotin@mi.ras.ru

We consider the problem of $N \geq 3$ gravitating bodies assuming that one of them is much more massive than the others. Then, in the first approximation, smaller bodies move along nearly Kepler orbits around the big one. However, when small bodies undergo nearly collisions, they interact strongly, and start moving along new set of nearly Kepler orbits. This singularly perturbed dynamical system is hard both for theoretical and numerical analysis. We propose to replace the dynamical system by a variational problem. It turns out that the perturbation of the functional can be regularized which makes it possible to use both numerical (we don't do this ourselves) and theoretical methods to obtain a relatively satisfactory description of nearly collision solutions. This work in progress is continuation of [1].

REFERENCES

1. Bolotin S., Negrini P. Variatioanl approach to second species periodic solutions of the 3 body problem// Discrete and Condituous Dynamical Systems, 2013. V. 33. P. 1009-1032.

¹The work is supported by RFBR grant 12-01-00441

SIMULATION OF HYDRATE FORMATION IN GAS WELLS AT THERMAL INTERACTION WITH ROCKS

Bondarev E. A.¹, Rozhin I. I.¹, Argunova K. K.¹

¹ Institute of oil and gas problems SB RAS, Yakutsk, Russia;
rozhin@ipng.ysn.ru

The problems of thermal interaction of gas wells with rocks belong to conjugated problems of heat transfer. Their models include the equation of heat conduction describing propagation of heat in rocks with possible thawing and freezing, the equations of non-isothermal real gas flow in tube with corresponding boundary and initial conditions instituted by nature of linking of heat flows on a tube wall. The quasi-stationary mathematical model is used for the problem of formation (dissociation) of hydrates in gas wells. In this model real gas flow was described in the frame work of tube hydraulic while dynamics of hydrate formation was formulated as generalized Stefan problem in which temperature of phase transition «gas – hydrate» was a function of gas pressure. The model takes into account the dependence of coefficient of heat transfer between gas and hydrate layer on free cross section of a tube, that is, it's changing with time.

Gas production from the fields with essentially different composition of natural gas, reservoir and geothermal conditions, depths of productive horizon was simulated. Initial values of a free cross section of a tube and a mass flow rate were varied. It has been shown that the conjugated model predicts that the time of formation of hydrate plugs essentially increases in comparison with the model where the temperature of surrounding rocks is considered a given function of depth.

ECONOMICAL AND MATHEMATICAL MODELING OF FLOW PROCESS IN INDUSTRIAL ENTERPRISES

Butrin A.G.

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russia;
konf_log@mail.ru*

Today in the course of the integration process, the key development target of the majority of industrial enterprises is to ensure adaptability, sustainability, competitiveness and efficiency. Substantial reserves are enclosed in the application of integrated logistics suppliers, carriers, manufacturers, dealers, distributors, and consumers as a whole. To implement these reserves is necessary to develop a method for optimizing and build a strong economic-mathematical model aimed at defining and achieving optimal parameters of flow processes. Optimization criterion is the minimum integrated cost of flow chain "supplier-producer-consumer." Methods: A systematic, cross-system and synergistic approaches, economic and mathematical modeling, methods of logistics and supply chain management, compilation and synthesis, experiment. The simulation results are presented in Fig. 1

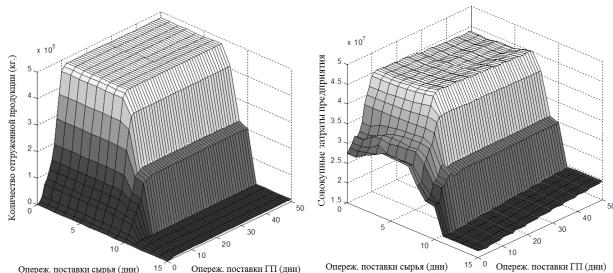


Fig.1

REFERENCES

1. Butrin A.G. Design and optimization of business processes of integrated enterprises: Monograph / A.G. Butrin, V.I. Tsaplin. – Chelyabinsk: Publishing center of South Ural State University, 2011. – 313 p.

FIVE TRENDS IN THE MATHEMATICAL FOUNDATION OF COMPUTATIONAL PDEs

Carstensen C.

Humboldt University of Berlin, Berlin, Germany;
`cc@math.hu-berlin.de`

This presentation concerns five topics in computational partial differential equations with the overall goals of reliable error control and efficient simulation.

The presentation is also an advertisement for nonstandard discretizations in linear and nonlinear Computational PDEs with surprising advantages over conforming finite element schemes and the combination of the two. The equivalence of various first-order methods is explained for the linear Poisson model problem with conforming (CFEM), nonconforming (NC-FEM), and mixed finite element methods (MFEM) and others discontinuous Galerkin finite element (dGFEM). The Stokes equations illustrate the NCFEM and the pseudo-stress MFEM and optimal convergence of adaptive mesh-refining as well as for guaranteed error bounds. An optimal adaptive CFEM computation of elliptic eigenvalue problems and the computation of guaranteed upper and lower eigenvalue bounds based on NCFEM. The obstacle problem and its guaranteed error control follows another look due to D. Braess with guaranteed error bounds and their effectivity indices between 1 and 3.

Some remarks on computational microstructures with degenerate convex minimization problems conclude the presentation.

**DIFFERENTIAL FLUID MECHANICS: COMPATIBLE ANALYTICAL,
NUMERICAL, AND LABORATORY MODELS OF STRATIFIED FLOWS¹**

Chashechkin Yu. D.

IPMech RAS, Moscow, Russia;

chakin@ipmnet.ru

yulidch@gmail.com

Newly created ground- and space-based optical instruments revealed the fine structure of flows of various scales, from light-years in the interstellar medium, to thousands of kilometers in stars atmospheres and meters in the Earth atmosphere and hydrosphere. In the laboratory, registered fine structures of the vortex flows and waves were scaled from centimeters to microns. As illustrations examples of the evolution of flows patterns in compound vortices and fine suspension of standing waves visualized by liquid and solid markers are presented. Another series of works was devoted to the experimental study of the formation of the fine structure in flows induced by diffusion in the topography, and in the fields of periodic or attached internal waves in a continuously stratified fluid. The flow patterns in laboratory stands were visualized by different schlieren and interferometric instruments. Mathematical modeling of substances, momentum, and energy transport in liquids is based on the fundamental system consisting of the equations of continuity, momentum and energy balance, the diffusion of components and closing the equation of state, taking into account the condition of the equations compatibility. As shown by the calculations continuous symmetries of the system, unlike many model systems correspond to the fundamental principles of physics. For the first time a complete mathematical classification of periodic flows components including large-scale wave components supplemented by fine-structure components is given. The degeneracy of the classical equations of continuity and momentum transport in the approximation of a homogeneous fluid is shown. Patterns of internal waves and associated fine components excited in continuously stratified fluids by compact 2D and 3D sources committing linear and torsional oscillations were calculated by methods of singular perturbations. Numerical calculations of two-dimensional flows

¹The work was partly supported by the Russian foundation for basic researches (12-01-00128).

induced by diffusion in a stratified fluid at rest on a sloping strip and on wedge forming a pattern of internal waves were performed on Supercomputer complex M.V. Lomonosov Moscow State University. The formation of large and thin flow components was studied. The geometry of fields of various physical quantities such as velocity, the perturbations of density, pressure, vorticity, rate of baroclinic vorticity generation and dissipation was investigated in details. For comparison, the transformation of the structure of periodic internal wave beams, the occurrence of discontinuities in the density gradient fields and the formation of compact vortex arrays far away from the source in the areas of convergence of fine flow components were also investigated in the experiments. Detailed calculations are consistent with the schlieren visualization of flows in the laboratory and observations of mountain and valley winds, or internal waves in the atmosphere.

**EXPERIMENTAL VALIDATION OF
COUPLE-HEAT-WATER-TRANSFER PDE MODEL BY IN-SITU
DETERMINATION OF SOIL FREEZING CHARACTERISTIC CURVE**

Cheng Q.¹, Sun Y. R.¹, Zhao Y. D.², Xue X. Z.¹, Huang X. F.¹,
Vasilyev V. I.³, Danilov Y. G.³, Eremeev I. S.³, Popov V. V.³

¹*China Agricultural University, Beijing, China;*

davidcheng_1025@163.com

pal@cau.edu.cn

xuexz@nercita.org.cn

huangxingfa@cau.edu.cn

²*Beijing Forestry University, Beijing, China;*

yandongzh@bjfu.edu.cn

³*North-Eastern Federal University, Yakutsk, Russia;*

vasvasil@mail.ru

dan57@rambler.ru

is.eremeev@s-vfu.ru

vv.popov@s-vfu.ru

Many natural phenomena, such as seasonal soil frost penetrating into underground, are commonly modeled by PDEs with specific moving boundary conditions. For solving this type of PDE, the moving boundary conditions have to be treated overall the computing process. This paper focused on validating the couple-heat-water-transfer model using the experimental data determined in situ. Moreover, we proposed that soil freezing characteristic curve (SFCC) acted as the moving boundary condition and a novel dielectric sensor for determining the SFCC was used. The experiment was conducted at three fields (sand, sandy silt loam and silt-loam) in Jilin Province, the northeast of China. The SFCCs were determined at the depths of 10, 20, 30, 40, 50 and 60 cm, respectively. The good results confirmed that the in situ determined SFCCs can greatly benefit to the validations of the PDE models for characterizing soil freezing dynamics.

TRACTABLE TOPOLOGY FOR TASK ASSIGNMENT ON MULTICOMPUTERS WITH DEDICATED CONTROL UNITS¹

Cho S.-Y.

Hankuk University of Foreign Studies, Seoul, South Korea;
sycho@hufs.ac.kr

In a multicomputer system made up of several processors, the interacting task comprising a program should be assigned to the processors so as to make use of the resources of the system efficiently.

Consider a multicomputer consisting of k processors, p_1, p_2, \dots, p_k , which are connected with some topology. We define the *distance* between any two processors p_i and p_j , denoted as $d_{i,j}$, to be the minimum number of communication links that connect them. The interprocessor communication cost between p_i and p_j is assumed to be proportional to $d_{i,j}$. We assume that some processors are equipped with special capabilities or resources such as data files and expensive peripheral devices. It is further assumed that each special capability is associated with only one processor in the system.

Now consider an application program which consists of a set of n interacting tasks t_1, t_2, \dots, t_n . The set of interactions among the tasks is represented by an undirected graph called *task interaction graph*, in which each node corresponds to a task and there exists an edge between two nodes if and only if the corresponding tasks interact. Each edge (t_x, t_y) is labeled by a number $w_{x,y}$ which indicates the amount of information exchanged during the execution of the given program. If two tasks t_x and t_y are assigned to two different processors p_i and p_j , respectively, the interprocessor communication cost due to t_x and t_y can be defined as $w_{x,y} \cdot d_{i,j}$.

Some tasks, called special tasks, may have to be assigned to some special processors in order to take advantage of their special capabilities. We further assume that the application program is communication-intensive. Therefore the main purpose of the problem is to reduce the communication overhead rather than load balancing. The Communication-intensive Task Assignment Problem considers the assignment of each task to a processor

¹The work is supported by SMBA via 2012's Industry-Academic Co-development Plan(C0027742)

in order to minimize the communication cost $\sum_{i < j} w_{i,j} \cdot d_{X(i), X_f(j)}$, where X is an assignment function and $X(i)$ represents the processor to which t_i is assigned.

This problem is an instance of GKP[1] with the following instantiation: a task instantiates a node, a special task instantiates a terminal node, a task interaction instantiates an edge, a processor instantiates a point, and a communication link instantiates a line.

If the topology is full-connected, the problem is the same to the specified k -cut problem. The problem considers an undirected k -terminal graph $G = (V, E)$ with positive edge weights and a set of prescribed $k(\leq n)$ nodes called *terminal* nodes, where $V = \{v_i | 1 \leq i \leq n\}$ and each edge of E is an unordered pair of nodes (v_i, v_j) in V . A k -cut is a set of edges which, when deleted, partitions V into k subsets $\{V_i | 1 \leq i \leq k\}$. The aim is to find a minimum weight k -cut so that each subset contains exactly one node of the given k . The minimum (s, t) -cut problem that can be solved in polynomial time using the max-flow min-cut theorem is therefore an instance of the specified k -cut problem where $k = 2$. The specified k -cut problem is NP-hard even for $k = 3$ [2].

This paper shows that an optimal algorithm can solve the problem for tree topology graphs or general-array topologies in polynomial time. The time complexity of the algorithm is $O(kn^3)$, where n is the number of nodes in a k -terminal graph according to the Goldberg-Tarjan's maximum flow algorithm. Furthermore, the time complexity can be reduced in a special cases of topology graphs.

REFERENCES

1. Cho S.-Y., Kim H.-C. An optimal algorithm for tree geometrical k -cut problem, Proc. of the 10th WSEAS Int. Conf. on MACMESE'08 Part II, 2008. P. 280-285.
2. Goldschmidt O., Hochbaum D. S. Polynomial algorithm for the k -cut problem in Proc. 29th Annu. Symp. on Found. of Comput. Sci., 1988. p.444-451.

**NONSTATIONARY SOLUTIONS OF THE GENERALIZED
KORTEWEG-DE VRIES-BURGERS EQUATION**

Chugainova A. P.

Steklov Mathematical Institute RAS, Moscow, Russia;
A.P.Chugainova@mi.ras.ru

The simultaneous effects of dissipation and dispersion on nonlinear wave behavior in elastic media are considered when the effects are small and manifested only in narrow high-gradient regions. If one constructs solutions of self-similar problems in “hyperbolic” approximation using Riemann’s waves and admissible discontinuities (i.e., discontinuities with structures) one obtains many solutions the number of which unlimitedly grows with growing the relative influence of dispersion (as compared to dissipation) in discontinuity structures.

The numerical analysis (based on PDE with dispersion and dissipation) of nonself-similar problems with self-similar asymptotics is performed to determine which of self-similar solutions is an asymptotic form for the nonself-similar solution.

SPLITTING METHOD FOR SHALLOW WATER EQUATIONS¹

Csörgő G.

*Research Group "Numerical Analysis and Large Networks" at Hungarian Academy of Science and Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary;
csgoaat@inf.elte.hu*

We will take some conditions, show a derivation of shallow water equations, and study the possibilities of the numerically solving of these. Our main tool will be the operator splitting methods. We will investigate, how to apply this numerical method for our problem and how to split the equations. We will point out the advantages and the disadvantages of the splitting for shallow water equations.

¹This research is supported by the European Union and Hungary, TÁMOP 4.2.4.A/1-11-1-2012-0001 "Nemzeti Kiválóság Program"

**APPLICATION OF THE LAGUERRE STEP-BY-STEP
TRANSFORMATION FOR SOLVING DYNAMIC PROBLEMS¹**

Demidov G. V.¹, Mikhailenko B. G.¹, Martynov V. N.¹

¹The Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, SB RAS, Novosibirsk, Russia;
vnm@nmsf.ssc.ru
mikh@sscc.ru

In their previous publications [1], [2] the authors proposed a method of solving dynamic problems that is based on the Laguerre transformation with respect to time. When using the approach proposed there arises a necessity of selecting the four parameters: the number of projections of the Laguerre transformations , the scaling factor, which is required for approximating a solution by the Laguerre functions, the exponential coefficient of the weight function, which is used for finding a solution on a finite temporal interval and the duration of this interval. The authors have proposed a technique of selecting the above parameters for the stability of calculation. On an example of the solution of one-dimensional problems with the use of the given approach it was shown that its application makes possible to obtain a solution with a high accuracy on large time intervals. In this paper we show that the proposed approach of selecting the parameters required for the calculation is applicable when solving dynamic problems of large dimension.

REFERENCES

1. Demidov G.V., Martynov V.N. A step-by-step method of solving evolutionary problems using the Laguerre functions // Siberian Journal of Numerical Mathematics. 2010, V. 13, №4, P. 413-422.
2. Demidov G.V., Martynov V.N., Mikhailenko B.G. The method of solving evolutionary problems using a step-by-step Laguerre transformation // Siberian Journal of Numerical Mathematics, 2012, V. 15, №2 P.191-196
3. Paasonen V.I. Compact difference schemes. Part I. Novosibirsk State University , 2006. 68 p.

¹Supported by the Russian Foundation for Basic Research, (№ 11-05-00937), Project No 15.9 of Presidium of RAS

RELIABLE NUMERICAL MODELS FOR DIFFUSION PROBLEMS¹**Faragó István**

*Eötvös Loránd University and MTA-ELTE Research Group, Budapest,
Hungary;
faragois@cs.elte.hu*

When we construct mathematical and/or numerical models in order to model or solve a real-life problem, these models should have different qualitative properties, which typically arise from some basic principles of the modelled phenomena. In other words, it is important to preserve the characteristic properties of the original process, i.e., the models have to possess the equivalents of these properties. E.g., many processes, varying in time, have such properties as the monotonicity, the non-negativity preservation and the maximum principles. We will examine these qualitative properties for the diffusion equation, having the form

$$Lv \equiv \frac{\partial v}{\partial t} - \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2} = f, \quad \text{in } (0, 1) \times (0, T)$$

$$v(0, t) = v(1, t) = 0, v(x, 0) \text{ is given,}$$

which yields a linear parabolic initial boundary value problem in \mathbb{R}^d .

This continuous model has all the above mentioned qualitative properties [2].

We construct the numerical models by using finite difference and finite element method for the space discretization and the well-known θ -method for the time discretization. Our aim is the qualitative analysis of these numerical models, giving conditions under which the discrete analogues of the different qualitative properties are preserved.

We focus our attention to the investigation of the maximum principles and the non-negativity preservation properties for different values of d .

We give an exact (necessary and sufficient) condition for 1D case ($d = 1$). We denote by q the ratio of the time stepsize and the square of the space stepsize parameters. Our aim is to get the largest value for q under

¹The work is supported by Hungarian National Research Fund OTKA No. K67819 and K81403

which the qualitative properties for some values of the space division N still holds.

Theorem 1. *Under the condition*

$$q \leq \frac{1}{2(1-\theta)}$$

the finite difference + θ -method discrete model preserves the qualitative properties for any $N \geq 1$. Under the condition

$$q \leq \frac{-1 + 2\theta + \sqrt{1 - \theta(1 - \theta)}}{3\theta(1 - \theta)}, \quad (1)$$

the properties are preserved for all $N \geq 2$. There exists a number $N_0 \in \mathbb{N}$ such that the numerical model was qualitatively preserving for each $N \geq N_0$ if and only if the condition

$$q \leq \frac{1 - \sqrt{1 - \theta}}{\theta(1 - \theta)}. \quad (2)$$

is satisfied.

For the linear finite element space discretization we also give the exact condition.

We investigate our model in 3D in more details, too. We formulate those conditions under which numerical model is qualitatively preserving [1].

We illustrate our results by some numerical experiments.

REFERENCES

1. Faragó I. Discrete maximum principle for finite element parabolic models in higher dimensions.
Math. Comp. Sim., 2010. V. 80. P. 1601-1611.
2. Ladyzhenskaya O., V. Solonnikov V, and Ural'tseva N. Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type, Nauka, Moscow, 1967.

LOCALIZED BULGING IN INFLATED MEMBRANE TUBES: CHARACTERIZATION, STABILITY, AND APPLICATIONS

Fu Yibin

Department of Mathematics, Keele University, Keele, UK;

Department of Mechanics, Tianjin University, Tianjin, China;

y.fu@keele.ac.uk

When a membrane tube is inflated by an internal pressure, a localized bulge will form when the pressure reaches a critical value. With continued inflation, the bulge will first grow to a maximum radius and then expand axially at a constant pressure. This phenomenon is well-known and has been studied analytically, experimentally, as well as numerically.

The above phenomenon is a paradigm for a variety of other localization phenomena in Continuum Mechanics, such as phase transformation in shape memory alloys, kink-band formation in fibre-reinforced composites, and collapse of honey-comb structures under impact. The particular application that we have in mind is the mathematical modeling of aneurysms in human arteries. An aneurysm is a localized, pathological, blood-filled dilatation of a blood vessel caused by a disease or weakening of the vessel's wall. Fusiform aneurysms are geometrically very similar to a localized bulge in an inflated membrane tube, but their formation has previously been dismissed as a bifurcation phenomenon on the grounds that the pressure versus volume for arteries does not have a maximum. However, it is recently shown that the existence of such a maximum is in fact not necessary for the formation of a localized bugle provided the axial stretch is held fixed; the latter condition is precisely how arteries are like. This recent finding re-opened the possibility of interpreting aneurysm initiation as a bifurcation phenomenon. We report on our recent progress in this effort. If time permits, we shall also report on our more recent research on the inflation of ellipsoidal membrane shells with a view to model the initiation and final rupture of saccular aneurysms.

REFERENCES

1. E. Chater, J.W. Hutchinson On the propagation of bulges and buckles, ASME J. Appl. Mech. 51 (1984), 269-277.
2. J. Shi, G.F. Moita The post-critical analysis of axisymmetric hyperelastic membranes by the finite element method, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 135 (1996), 265-281.

3. *S. Kyriakides, Y.-C. Chang* The initiation and propagation of a localized instability in an inflated elastic tube, *Int. J. Solid Struct.* 27 (1991), 1085-1111.
4. *Y.B. Fu, S.P. Pearce, K.K. Liu* Post-bifurcation analysis of a thin-walled hyperelastic tube under inflation, *Int. J. Non-linear Mech.* 43 (2008), 697-706.
5. *S.P. Pearce, Y.B. Fu* Characterisation and stability of localised bulging/necking in inflated membrane tubes, *IMA J. Appl. Math.* 75 (2010), 581-602.
6. *Y.B. Fu, Y.X. Xie* Effects of imperfections on localized bulging in inflated membrane tubes, *Phil. Trans. R. Soc. A* 370 (2012), 1896-1911.
7. *Y.B. Fu, G.A. Rogerson, Y.T. Zhang* Initiation of aneurysms as a mechanical bifurcation phenomenon, *Int. J. Non-linear Mech.* 47 (2012), 179-184.
8. *A.T. Il'ichev, Y.B. Fu* Stability of aneurysm solutions in a fluid-filled elastic membrane tube, *Acta Mechanica Sinica* 28 (2012), 1209-1218.
9. *Y.B. Fu, A.T. Il'ichev* Localized standing waves in a hyperelastic membrane tube and their stabilization by a mean flow, submitted to *Journal of Dynamics and Differential Equations*.

**TO ADEQUACY PROBLEM UNSTABILITY OF STEADY-STATE
PLANE-PARALLEL SHEARING FLOWS IN IDEAL STRATIFIED
FLUID¹**

Gavrilieva A. A.¹, Gubarev Yu. G.²

¹ *V. P. Larionov's Institute of Physico-Technical Problems of the North,
Yakutsk, Russia;*

gav-ann@yandex.ru

² *Lavrentyev Institute for Hydrodynamics, Novosibirsk, Russia;
Yu.G.Gubarev@mail.ru*

A problem on linear stability of stationary plane-parallel shearing flows in a continuous stratified in density inviscid incompressible fluid in a gravity field between two immovable impermeable solid parallel infinite plates is considered.

The direct method of Lyapunov it is proved that this flow is absolutely unstable in the theoretical sense with respect to small plane perturbations. Constructive sufficient conditions the linear instability is deduced. A priory lower estimate is constructed that displays exponential in time growth of the considered small perturbations. Strictly describes the application field of the Miles theorem and found that, by its nature, this theorem is a sufficient and the necessary statement.

It should be stressed that from the mathematical point of view the results of this work are, in the main, a priori, because existence theorem of solutions the initial-boundary value studied problems for systems of differential-potential equations with partial derivatives have not been proved.

Finally, with regard to the question of how adequately whether the mathematical model ideal continuously stratified fluid in describes the stationary plane-parallel shear flows in the gravity field, it should be said, that is not adequate, since this model does not have the theoretically stable solutions, which would correspond to the established plane-parallel shear flows, although this kind of flow, and in nature are observed, and in the application are being realized.

¹The article has been prepared with the support of the Ministry of education and science of the Russian federation, the agreement № 14.B37.21.0355

However, if the conditions failure the linear instability of the stationary solutions mixed problem will be stable with respect to small plane perturbations in the form of normal waves on those or any other finite time intervals.

It follows that the mathematical model does not adequately characterizes the steady-state plane-parallel shear flow in the theoretical sense (at the semi-infinite intervals of time), but adequately, in a practical (at the end of time). In the end, constructive sufficient conditions (see on the inequality of the equations system) the linear instability can provide with a foundation for the creation of effective methods of managing the stationary currents in the real-time mode [1, 2].

REFERENCES

1. Yu. G. Gubarev. Liapunov's direct method. The stability of the state of rest and stationary flows of liquids and gases. Saarbrcken: Palmarium Academic Publishing, 2012, 192 p. (ISBN 978-3-8473-9105-0).
2. Gubarev Yu. G. Sufficient conditions for linear long-wave instability of stationary axially symmetric flows of an ideal fluid with free boundary in the azimuth magnetic field. The journal of technical physics, 2011, V. 81, № 3, 28-34.

**COMPUTATIONAL MODELLING OF MULTISCALE PROBLEMS OF
FLUCTUATING HYDRODYNAMICS**

**Goloviznin V. M.¹, Glotov V. Yu., Markesteijn A. P., Karabasov
S. A.**

¹*Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow,
Russia;
gol@ibrae.ac.ru*

In modelling of heat and mass transfer problems in nanodevices, as well as the chemical kinetics processes of large biomolecular systems, such as the conformational changes of proteins in water, the computational scales are in order of a nanometer. At this system size, temperature velocity fluctuations typical of the Brownian motion play an important role. In this case, classical continuum fluid dynamics Navier-Stokes equations are not valid on one hand. On the other hand, molecular dynamics methods are too expensive to compute the collective behaviour of a large system. A popular mathematical model in this case is the Landau-Lifshitz Fluctuating Hydrodynamics equations which is an extension of the classical Navier-Stokes equations to statistical modelling of the molecular system around the equilibrium conditions. In this talk, we will review modern methods for solving the Landau-Lifshitz Fluctuating Hydrodynamics equations and compare their computational efficiency.

STUDY OF SUPERCOMPUTER'S ARCHITECTURE, APPLICATION AND ITS FUTURE USE

Gonsai Atul¹, Goswami Bhargavi², Kar NarayanUdit³

¹*Saurashtra University, India;*

atul.gosai@gmail.com

²*NIMS University, India;*

bhargavigoswami@gmail.com

³*Saurashtra University, India;*

uditnarayankar@gmail.com

Generally there is only one mother super computer in each country and there are many sub super computers attached to the mother super computer. It helps in increasing the speed of calculation and can quickly perform the complex tasks as given by users because of its high processing speed and the parallel computing skills. The super computers are very useful in terms of scientific research and industrial field. It also takes the level of national scientific development to a certain extent of highness. In this paper the architecture and application of the super computer has been discussed and future development of the super computer has been proposed.

REFERENCES

1. Xianghui XIE, Xing FANG and Sutai HU, Dong WU “Evolution of supercomputers,” Froniers of Computer Science in China, vol. 4, no. 4, pp. 428-436, Dec. 2010.
2. Gaston D, Hansen G, Kadioglu S, et al. Parallel multiphysics algorithms and software for computational nuclear engineering. In: Proceedings of SciDAC Workshop 2009, June, San Diego, USA, 2009.
3. Bechtolsheim A. The road from peta to exaflop. In: Proceeding of 2009 International Supercomputing Conference, June, 2009
4. John A. N. Lee, John Impagliazzo “History of computing in education” IFIP International Federation for Information Processing, vol. 145, pp.1-16, 2004
5. Hoffman, Allan R “Supercomputers: direction in technology and applications,” Book, National Academics, pp. 102, Dec 1989.
6. Bechtolsheim A. The road from peta to exaflop. In: Proceeding of International Supercomputing Conference, June, 2009

7. Amarasinghe S, Campbell D, Carlson W, et al. ExaScale software study: software challenges in extreme scale systems. DARPA IPTO, September, 2009
8. Kogge P, Bergman K, Borkar S, et al. ExaScale computing study: technology challenges in achieving exascale Systems. DARPA IPTO, September, 2008
9. Sao-Jie Chen, Guang-Huei Lin, Pao-Ann Hsiung, Yu-Hen Hu Hardware Software Co-Design of a Multimedia Soc Platform, page no 70 – 72
10. Paul B. Schneck "Supercomputer Architecture book review, ACM, New York, USA, vol. 16, no. 4, page no 195-196, Sep 1988.
11. Charlene W. Billings "Supercomputers: Shaping the Future Book, Universities Press, page no 24, 25, Dec 2000.
12. J. T. Devreese "Supercomputers in Theoretical and Experimental Science Springer, page 13, 14, Nov 30, 1985.
13. Anneke Dempsey Cray ISV Alliances, Cray Ansys, page no 1, 2.
14. Yasuo Ishii "Architectural Considerations for Exascale Supercomputing Springer, Sustained Simulation Performance, 2012, page no 13, 24, 2013.
15. J.E. Smith, W.C. Hsu, C. Hsiung Future General Purpose Supercomputer Architecture, Page no 796.

MODELLING OF FILTRATION IN FRACTURED POROUS MEDIA

Grigoriev A. V.

*Center of computational technologies NEFU, Yakutsk, Russia;
re5itsme@gmail.com*

Most oil fields are characterized by fractured porous structures. During development of various types of collectors technogen fracture may occur. In the development of fractured reservoirs are often faced with the phenomena that can not be simulated on the basis of the classical theory of filtration in porous media. This is due to the presence of real reservoirs joint systems which significantly affect the filtration process oil.

In contrast to the classical model of filtering (single porosity), the model of double porosity allows more precisely describe the filtration processes in fractured porous media. Here, after finite element discretization in space, we consider the time approximation of the double porosity boundary value problem. The main feature is the connection among the individual components. Unconditional stability of schemes with weights for double porosity problems is shown. Our main contribution is the construction of splitting schemes, where the transition to a new time level provides standard solutions of elliptic problems for the individual components of the system of equations. Examples of calculations for the two-dimensional model demonstrate the effectiveness of the proposed algorithms.

REFERENCES

1. Каневская Р.Д. Математическое моделирование гидродинамических процессов разработки месторождений углеводородов. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002.
2. Николаевский В.Н. Геомеханика и флюидодинамика. Москва: Недра, 1996.
3. Ромм Е.С. Структурные модели порового пространства горных пород. Ленинград: Недра, 1985.
4. Баренблatt Г.И., Желтов Ю.П., Кошина И.Н. Об основных представлениях теории фильтрации однородных жидкостей в трещиноватых породах. Москва: Прикладная математика и механика. т. 24, вып. 5, 1960.

CUDA FLOW SOLVER BASED ON RKDG METHOD ON TWO-DIMENSIONAL UNSTRUCTURED GRIDS

He Xiaofeng¹, Jian Cheng¹, Tiegang Liu¹

¹*School of Mathematics and System Sciences, Beihang University, China;*
tag.yuan@gmail.com
cjbuaa@163.com
liutg@buaa.edu.cn

Runge-Kutta discontinuous Galerkin(RKDG) method is a kind of high-order algorithm. RKDG has the advantages of capture discontinuities, dealing with hung nodes etc. But due to the calculation burden of DG is large, it takes a long time to solve the flow even with well-structured, efficient serial program.

CUDA is proposed by Nvidia corporation and it becomes an active and popular high-performance parallel computation platform. It's easy to code with CUDA and one can benefit a lot with CUDA involved. Our work is the GPU implement of RKDG method on two-dimensional unstructured grids.

The serial program is compiled with intel c++ compiler with O2 flag, and executed on Intel Xeon X5690(3.47GHz) machine; CUDA program is compiled with NVCC 5.0(intel c++ compiler or gcc 4.4.3 involved) and executed on Nvidia Tesla M2070. The test case is NACA0012 airfoil with 9340 triangles , Mach number 0.4, attack angle 5 degree. The programs calculate flow from time 0 to 15 seconds. Result shows that wall time of serial program is 24823 seconds(6.9 hours), and wall time of CUDA program is 994 seconds(16 minutes). The CUDA program speedup the program with a factor of 25. With the scale of problems increasing, a better acceleration will be obtained.

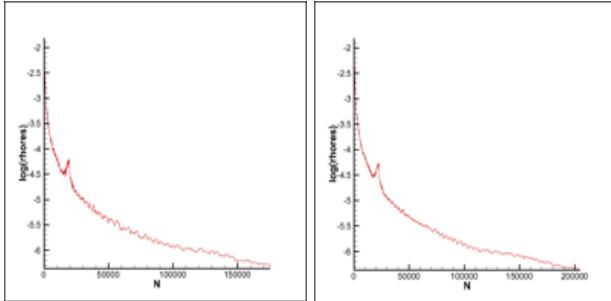


Fig. 1. (a)residual history of serial program; (b) residual history of CUDA program

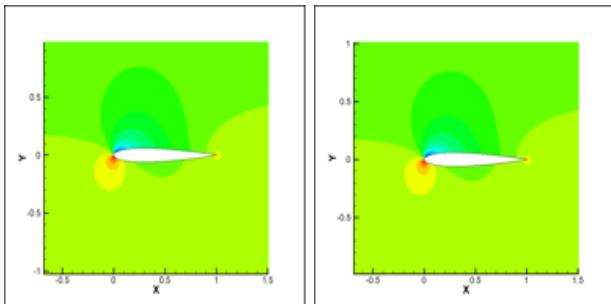


Fig 2. (a)pressure contour of serial program; (b) pressure contour of CUDA program

REFERENCES

1. Z. J. Wang, Yen Liu, Georg May, Antony Jameson. Spectral Difference Method for Unstructured Grids II: Extension to the Euler Equations, Journal of Scientific Computing, Vol. 32, No. 1, July 2007.
2. Jun Zhu, Jianxian Qiu, Chi-Wang Shu and Michael Dumbser. Runge-Kutta discontinuous Galerkin method using WENO limiters II: unstructured meshes. Journal of Computational Physics, Volume 227, Issue 9, 20 April 2008, Pages 4330-4353.
3. Andrew Corrigan, Fernando Camelli, Rainald Lohner, John Wallin. Unstructured Grid Based CFD Solvers on Modern Graphics Hardware. 19th AIAA Computational Fluid Dynamics, 22 - 25 June 2009.

**COMPETITION OF STABILIZING AND DESTABILIZING FACTORS
AND BIFURCATION OF PHASE TRANSITION FRONTS IN
GEOTHERMAL SYSTEMS**

Il'ichev A. T.

Steklov mathematical institute, Moscow, Russia;
ilichev@mi.ras.ru

For a fixed drop of pressure and homogeneous conditions on lower and upper boundaries of a low-permeability horizontal layer we study competition of the Rayleigh-Taylor instability and stabilizing by the vertical flow through the phase transition interface water to vapor in dependance on the width of the low-permeability layer and permeability in geothermal systems. This competition is brought to life by the non-uniqueness of localization of the stationary phase transition fronts, at least one of them is always unstable. The multiple fronts appear as a result of bifurcation from the stable front. In a neighborhood of the bifurcation point dynamics of a narrow band of weakly unstable and weakly nonlinear modes is described by the diffusion equation of Kolmogorov-Petrovsky-Piscounov type.

NUMERICAL MODELLING OF WAVE FIELDS IN POROUS MEDIA (REVERSIBLE CASE)

Imomnazarov Kh. Kh.¹, Nyago V. A.¹

¹*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics
SB RAS, Novosibirsk, Russia;
imom@omzg.sccc.ru*

The development of mathematical models of seismic waves propagation is important for seismic data interpretation. The created models should take into account such seismic properties as velocities of waves, their attenuation as well as lithological properties of rocks, such as porosity, permeability and fluidsaturation. It is known that in the models of porous media of the Frenkel-Biot type, there are two P-waves, whose propagation velocities are expressed through four elastic parameters of porous media [1,2].

In the given paper, for the modeling of seismic waves propagation in porous media we use the model whose equations are characterized by three elastic parameters [3-5]. The problem under consideration is formulated in terms of displacement velocities of an elastic porous body and of a liquid with allowance for stress tensor, and pore pressure [6,7]. In this paper, some aspects of mathematical modeling of the wave mode due to different excitation sources are considered. The results of a series of numerical experiments for a test model of saturated porous media are represented.

REFERENCES

1. Frenkel Ya, I. On the theory of seismic and seismo-electric phenomena in damp soil // Izv. Akad. Nauk USSR, Ser. Geogr. I Geofiz., 1944, v. 8, p. 143–149.
2. Biot M.A. Theory of propagation of elastic waves in a Fluid-Saturated Porous Solid. I. Low-Frequency Range // J. Acoust. Soc. Am. 1956, v. 28, No. 2 p.168-178.
3. Dorovsky V.N. The continuum theory of filtration // Geologiya i Geofizika (Soviet Geology and Geophysics), 1989, v. 30, no. 7, p. 39–45.
4. Dorovsky, V.N., Perepechko, Yu.V. and Romensky, E.I. Wave processes in saturated porous elastically deformed media. Combust. Explosion Shock Waves. v29, p. 93-103.

5. *Imomnazarov Kh.Kh.* Some remarks on system of Biot quations // Doklady RAS 2000, v. 373, No.4, p.536-537 (in Russian).
6. *Imomnazarov Kh.Kh.* About one form of presenting the equations of motion in porous media in terms of velocities, stress tensor and pressure // Proceedings Sci. Confer. «Problems of modern mathematics» Uzbekistan, Karshi, 2011, p. 143-146 (in Russian).
7. Zhabborov N.M., *Imomnazarov Kh.Kh.* Some initial boundary value problems of mechanics of two-velocity media. Tashkent, 2012. 212p (in Russian).

HIGH ACCURACY QUASI INTERPOLATION OF RADIAL BASIS FUNCTIONS

Jiang Ziwu

Department of Mathematics, Linyi University, Shandong, China;
zwjiang@gmail.com

This report is mainly focused on the construction of quasi interpolation operator with radial basis function in high dimensional space and its application in data fitting, surface modeling and solving numerical solution of partial differential equations. Radial basis function as a generally applicable meshless method is currently a hotspot in the field of computer science and engineering, and much headway of its theory has been made. Quasi-interpolation method of radial basis function can avoid solving large scale linear equations and become one of the hot spots in the research of radial basis function method. Firstly, the reporter will introduce the construction approach of high accuracy quasi interpolation operator on one dimensional space. Secondly it's application to data fitting and solving numerical solution of partial differential equations will be studied. Finally, quasi interpolation of radial basis function in high dimensional space will be discussed.

REFERENCES

1. Z. W. Jiang, R. H. Wang, C. G. Zhu and Min Xu, High Accuracy Multiquadric Quasi-interpolation, *Appl. Math. Model.*, 35 (2011), 2185-2195.
2. Z. W. Jiang, R. H. Wang, Numerical solution of one-dimensional Sine-Gordon equation using high accuracy multiquadric quasi-interpolation, *Appl. Math. Comput.*, 218 (2012), 7711-7716.
3. G. E. Fasshauer, Meshfree Approximation Methods with Matlab, World Scientific Publishing, Singapore, 2007.

**DYNAMIC HOMOGENIZATION FOR PERIODIC AND FUNCTIONALLY
GRADED STRUCTURES**

Kaplunov J. D.

Keele University, Keele, UK;
j.kaplunov@keele.ac.ukl

A similarity between asymptotic procedures for thin and periodic structures is developed. The high-frequency long-wave limit, earlier established for elastic plates and shells (e.g. see [1] and references therein), is extended to the homogenization for periodic continua and discrete lattices [2, 3]. The proposed approach is oriented to analysis of micro-scale dynamic phenomena and finds important applications in modelling of meta-materials.

REFERENCES

1. *J.D.Kaplunov, L.Yu.Kossovich, and E.V.Nolde.* Dynamics of Thin Walled Elastic Bodies. Academic Press, N. -Y., 1998, 226 p.
2. *R.V. Craster, J.Kaplunov, and A.V. Pichugin.* High frequency homogenization for periodic media. Proc. R. Soc. Lond. A 466, 2010, 2341-2362.
3. *R.V.Craster, J.Kaplunov, and J.Postnova.* High frequency asymptotics, homogenization and localization for lattices. Quart. J. Mech. Appl. Math. 64, 2010, 497-519.

A DIRECTION SPLITTING ALGORITHM FOR PARTICULATE FLOWS¹

Keating J.¹, Minev P. D.¹

¹ University of Alberta, Canada;

jkeating@ualberta.ca

minev@ualberta.ca

An extension of the direction splitting method for the incompressible Navier-Stokes equations proposed in Guermond and Minev (2011), to flow problems in complex, possibly time dependent geometries will be presented. The idea stems from the idea of the fictitious domain/penalty methods for flows in complex geometry. In our case, the velocity boundary conditions on the domain boundary are approximated with a second-order of accuracy while the pressure subproblem is harmonically extended in a fictitious domain such that the overall domain of the problem is of a simple shape produced by a tensor product of intervals.

The new technique is still unconditionally stable for the Stokes problem and retains the same convergence rate in both, time and space, as the Crank-Nicolson scheme. A key advantage of this approach is that the algorithm has a very impressive parallel performance since it requires the solution of one-dimensional problems only, which can be performed very efficiently in parallel by a domain-decomposition Schur complement approach. Numerical results illustrating the convergence of the scheme in space and time will be presented. Finally, the implementation of the scheme for particulate flows will be discussed and some validation results for such flows will be presented.

REFERENCES

1. Guermond J.L., Minev P.D. A new class of massively parallel direction splitting for the incompressible Navier-Stokes equations. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2011. V. 200. P. 2083-2093.

¹The work is supported by National Sciences and Engineering Research Council of Canada.

**DISCONTINUOUS GALERKIN FINITE VOLUME ELEMENT
METHODS AND ITS APPLICATIONS TO MISCIBLE DISPLACEMENT
PROBLEMS IN POROUS MEDIA**

Kumar Sarvesh

*Department of Mathematics, Indian Institute of Space Science and
Technology, Kerala, India;
sarvesh@iist.ac.in*

In this talk, we first would like to discuss advantages of discontinuous Galerkin finite volume element methods (DGFVEMs) over the standard finite volume element methods (FVEMs). Then, we discuss applications of DGFVEMs in approximation of miscible displacement problems. The mathematical model which describe the miscible displacement of one incompressible fluid by another in a porous medium is modeled by two coupled nonlinear partial differential equations; one is pressure-velocity equation and other is concentration equation. In this talk, we discuss a mixed FVEM for the approximation of the pressure-velocity equation and a DGFVEM for the concentration equation. Also, a priori error estimates for velocity, pressure and concentration will be discussed. Some Numerical experiments will be presented to substantiate the validity of the theoretical results.

**APPLICATION OF HIGH PERFORMANCE COMPUTING IN
COMPRESSIBLE FLOW SIMULATION FOR AEROSPACE
APPLICATIONS**

Kumar Vikas

*Centre for Development of Advanced Computing, Pune, India;
vikask@cdac.in*

High performance computing plays a greater role in solving various computational fluid dynamics problem encountered in aerospace applications. It helps in reducing computation time for solving compressible flow problems encountered in stator and rotor of an axial flow compressor. The proper prediction of stall and surge helps an engineer to achieve better efficiency of a gas turbine. CFD simulation studies have been conducted using a density based compressible flow solver to analyze the flow behavior in stator and rotor. To begin with, the flow solver was tested and validated for benchmark case studies reported by NASA for Sabena Diffuser and Converging Diverging Nozzle. Further, a CFD model was developed to predict the flow behavior of NASA rotor 37. The difference in the mass flow rate of inflow to outflow was observed in the range of 1 -2 %, which requires further investigation. Subsequently, a CFD model was developed to study the flow behavior of a stator. The simulated result of fluid flow in stator was to be found to be in agreement with experimental results. The simulation study of complete stator (360 Degree) was carried out using parallel compressible flow solver. The simulation studies have shown good scale up behavior.

MODELING OF NON-STATIONARY PROCESS OF CONJUGATE HEAT EXCHANGE BETWEEN THE MOUNTAIN RANGE AND MINE AIR WITH THE USE OF COMPUTING ON GRAPHICS PROCESSORS NVIDIA CUDA

Kutcev A. R.

Perm State National Research University, Perm, Russia;
Alexander.Kutcev@gmail.com

The existing models of conjugate heat exchange between the mine air and the mountain range are too reductive and don't take into account some important physical processes taking place in excavations. The main disadvantage of such models is the absence of contingency in the calculation of temperature patterns of the massif and the air when the temperature pattern in a massif is considered to be unchangeable. In this work the conjugate heat exchanged is modeled by the making calculations of more detailed equations.

Finding out the solution to this problem will enable making the forecasts of a heating rate in deeper mines. Besides, it will help to develop the creation of effective methods of normalization of micro-climate in mines' working areas.

The excavation of the cylindrical form is taken as a calculation area. The problem is considered to be axisymmetric. For each area the non-stationary equation of heat conductivity is calculated. They are coordinated with the help of the Newton's boundary condition. The calculation results are presented in epures of the air and massif temperatures depending on the time. The system output on the stationary heating rate is investigated.

REFERENCES

1. Voropayeva A.F. The theory of heat exchange of the mine air and rocks in deep mines // Moscow, 1966, P.54-78

FILTRATION GAS COMBUSTION¹

Laevsky Yu.^{1,2}, Kandryukova T.^{1,2}

¹*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics
SB RAS, Novosibirsk, Russia;*

²*Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia;
laev@labchem.ssc.ru
kandryukovat@gmail.com*

Filtration gas combustion (FGC) may be defined as the propagation of region of gaseous exothermic reaction in chemically inert porous medium, as the gaseous reactants seep into the region of chemical transformation [1]. Many interesting properties of FGC waves were detected theoretically and experimentally. Knowledge of these properties plays essential role in solving many problems of chemical technology, ecology, fire safety, etc. But till now there are serious difficulties in numerical simulation of this process. A source of these difficulties is the great difference between the scales of diffusive and kinetic processes.

The work is devoted to the comparison a number of various algorithms which we have proposed for numerical solution of the FGC problem using different approaches to their construction. All of them provide us with solutions that are consistent with experimental data. Modifications of the original algorithm have reduced the execution time by a factor of 10. From the results of this study it can be concluded that in the case of sequentially running programs the use of the adaptive grids for simulation of FGC provides significant gains. However, one should show carefulness in parallelization of such algorithms to reach at least satisfactory scalability. Another approach based on the splitting with respect to the physical processes provides us with a number of various algorithms and opens great opportunities for further investigations. It also inspires us with hopes for good scalability. Let us note that before discuss the questions of numerical simulation we give a short survey of different mathematical models of FGC, and some theoretical results which were obtained earlier.

¹The work is supported by Russian Foundation for Basic Research (grants 13-01-00019, 12-01-31046)

REFERENCES

1. Babkin V.S and Laevsky Yu.M. Seepage gas combustion // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1987. V.23, No.5. P.531-547.

**NEW APPROACHES TO THE INITIATION OF GASEOUS
DETONATION¹**

Levin V. A.¹, Manuylovich I. S.¹, Markov V. V.¹

¹Institute of mechanics, MSU, Russia;
levin@imec.msu.ru

From the perspective of application of detonation in jet engines and power installations of various purposes investigation of detonation initiation and the search for new mechanisms of its implementation are of great interest. Due to the complexity of the problem the only effective way to solve it is the mathematical modeling on multiprocessor computers. The report presents the results of calculations on a supercomputer of MSU "Lomonosov" of flows of reacting gas mixtures in rotating channels, channels with mobile elements, as well as in supersonic flows in spatial channels of variable cross section. In all cases considered, initiation takes place without energy supply in the volume of combustible mixture, but by interaction with impermeable borders of the stream.

¹This work was supported by RFBR (grants No. 11-01-00068-a, 12-01-31118-mol_a, 12-01-90416-Ukr_a), the Council for Grants of the President of the Russian Federation (NSh-5911.2012.1, MK-3355.2012.1), Programs of the Presidium of Russian Academy of Sciences.

**SIMULATION OF MULTI-DIMENSIONAL STRUCTURES OF GAS
DETONATION: MULTI-HEADED AND SPIN MODES¹**

Levin V. A.¹, Manuylovich I. S.¹, Markov V. V.¹

¹Institute of mechanics, MSU, Russia;
levin@imec.msu.ru

According to experiments, detonation waves in combustible gas mixtures have complicated cellular structure. The front of bow shock wave is an uneven surface on which kinks are moving and which together with the transverse waves in the flow are elements of the ternary wave configurations. The report presents the results of numerical simulations on a supercomputer of MSU "Lomonosov" of the spontaneous formation of two-dimensional and three-dimensional detonation waves in channels of different cross-sections, as well as the spin-wave detonation in a circular cylindrical channel.

¹This work was supported by RFBR (grants No. 11-01-00068-a, 12-01-31118-mol_a, 12-01-90416-Ukr_a), the Council for Grants of the President of the Russian Federation (NSh-5911.2012.1, MK-3355.2012.1), Programs of the Presidium of Russian Academy of Sciences.

NUMERICAL SOLUTION FOR A KIND OF NONLINEAR TELEGRAPH EQUATIONS USING RADIAL BASIS FUNCTIONS

Su LingDe^{1,2}, Jiang Ziwu¹, Jiang Tongsong¹

¹*Department of Mathematics, Linyi University, Shandong, China;*

²*College of Mathematics, Shandong Normal University, Shandong, China;
lingdesu@yahoo.cn*

In this paper, we propose a numerical scheme to solve a kind of the nonlinear telegraph equation by using the Kansa's method with Radial Basis Functions (RBFs). From the numerical results of experiments presented in this paper, we can get that the accuracy between the numerical solutions and the analytical solutions are valid. In this paper, we also give the analysis of the parameter c in IMQ radical basis function for the results.

REFERENCES

1. M. Dehghan A numerical method for solving the hyperbolic telegraph equation, InterScience 24:1080-1093(2008).
2. T. S. Jiang, M. Li, C. S. Chen The Method of Particular Solutions for Solving Inverse Problems of a Nonhomogeneous Convection-Diffusion Equation with Variable Coefficients, Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, vol. 61, issue 5, 338-352(2012).
3. M. Li, T. S. Jiang, Y. C. Hon A meshless method based on RBFs method for nonhomogeneous backward heat conduction problem. Engineering Analysis with Boundary Elements vol. 34 issue 9 September, 785-792(2010).

ON STABILITY OF DIFFERENCE SCHEMES FOR NONLINEAR EVOLUTATIONAL PROBLEMS¹

Matus P. P.^{1,2}

¹ Faculty of Mathematics and Natural Sciences, The John Paul II
Catholic University of Lublin, Lublin, Poland;

² Institute of Mathematics, National Academy of Sciences of Belarus,
Minsk, Belarus;
matus@im.bas-net.by

The concept of stability (continuous dependence of the solution with respect to the input data) is an integral part of the correct definition of the mathematical problem in the sense of Hadamard. Therefore, unlike the linear case, first of all, it is necessary to prove the solvability of the problem (existence and uniqueness of the solution). This natural requirement at equal extent refers to both continuous and discrete model.

As a rule, an analysis of the properties of the solutions of the differential problems and their approximations is carried out under the assumption of weak nonlinearity, i.e., when certain properties are imposed on the nonlinear coefficients depending on the solution for all $u \in R$. In this case many interesting applied problems disappear from consideration, and this cannot be done because the solution does not belong to the input data.

Even for quasi-linear equations we have to estimate in the norm L all highest derivatives in the equation in the norm L_∞ . If we succeed to do this, we find the presence of some physical effects (shock waves [2,3], boundary layers, blow-up in heating problems [4,5] etc.) only in terms of the behavior of input data of the problem.

The results concerning stability of the difference schemes approximating quasi-linear equations of parabolic type with the Dirichlet and Neumann boundary conditions, multidimensional scalar conservation law, equations of gas dynamics will be presented.

In the study of mixed problems for quasi-linear equations in partial derivatives a maximum principle and a method of energy inequalities on the basis of the analysis of the so-called upper and lower solutions or on the basis of the Chaplygin comparison theorems are used. In analysis of

¹Work was supported by the Belarusian Foundation for Basic Research (№ F12R-177 of 15 April 2012)

stability of the difference schemes the grid analogues of the Bihari lemma (generalization of the Gronwall lemma on nonlinear case) and the discrete analogues of the comparison theorems are used. Principles for finding blow-up at a grid level on the basis of analysis of approximate upper solution of difference scheme and the techniques of constructing exact difference schemes for nonlinear ordinary differential equations of the autonomous type are considered.

REFERENCES

1. Matus P.P., Lemeshevsky S. Stability and monotonicity of difference schemes for nonlinear scalar conservation laws and multidimensional quasi-linear parabolic equations. *Comput. Methods Appl. Math.*, 9(3):253-280, 2009.
2. Matus P.P., Panajotova J.N., Polyakov D.B. Stability and monotonicity of the conservative difference schemes for multidimensional nonlinear scalar conservation law. *Differ. Equ.*, 48(7), 2012.
3. Marcinkiewicz G.L., Matus P.P., Chuiko M.M. Stability of difference schemes in terms of Riemann invariants for a polytropic gas. *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* 50, No. 6, 1078-1091 (2010); translation in *Comput. Math., Math. Phys.* 50, No. 6, 1024 5 1037 (2010).
4. Matus P.. On the role of conservation laws in the problem of a unstable solutions for quasi-linear parabolic equations. *Differ. Equ.*, 49(7), 2013.
5. Jovanovich B., Lapinska-Chrzczonowicz M., Matus A., Matus P. Stability of finite-difference schemes for semilinear multidimensional parabolic equations. *Comput. Methods Appl. Math.*, 12(3):289–305, 2012.

**SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES SOLUTION LARGE PROBLEMS
IN THE SIBERIAN SUPER-COMPUTER CENTER¹**

Mikhailenko B. G.¹, Glinsky B. M.¹

¹The Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia;

mikh@sscc.ru

gbm@sscc.ru

The Siberian Supercomputer Center for collective use (SSCC) was founded at the ICMMG, SB RAS. The maximum performance of the SSCC is 115 TFlops. The major tasks of the SSCC are the following: development and using the supercomputer technologies for the numerical modeling of a variety of problems being solved in the research institutes of SB RAS; providing these institutes and Siberian higher education institutions with mathematical modeling techniques in fundamental and applied studies; training specialists of the SB RAS and university students in parallel computation methods on supercomputers as well as in methods of solving large-size problems. Along with the SSCC in Novosibirsk, supercomputer centers have also been founded in the cities of Irkutsk, Krasnoyarsk, Tomsk and Omsk. The development of supercomputer centers of the SB RAS is coordinated by the Supercomputer Council under the auspices of Presidium of the SB RAS. Currently there are two clusters in the SSCC that are exploited by the research institutes of the SB RAS in the multi-access mode. One of the two clusters is based on the Intel Xeon computer units (the MPP-architectures), its maximum performance being 30TFlops, the MPI- and OpenMP-aided programming. The other cluster possesses a hybrid extension to the GPU NVIDIA Tesla M2090 (the GPGPU-architecture), the maximum performance being 84 TFlops, parallel programming in C/C++ CUDA and OpenCL. A characteristic feature of programming on the cluster with the MPP-architecture intended for solving large-size problems (3D problems in the first place) is the use of the MPI and OpenMP parallel languages. This is due to the cluster architecture constructed with multiprocessor servers with shareable memory (SMP). With such an

¹Partially supported by the RFBR under grant 13-07-00589-a, Integration Projects SB RAS №130, №39.

approach two current paradigms of the parallel computation are supported: the MPI for systems with memory allocation (clusters) and OpenMP for systems with shareable memory. The computational scheme allows for the startup of one MPI-process per each cluster computer unit, this MPI-process initiating several OpenMP-aided fluxes inside each computer unit. The other technology of the high-performance computing is associated with implementation of a parallel algorithm on the following hybrid architecture: a supercomputer consists of a set of connected units with application of the MPI for data exchange, each unit consisting of 1 CPU and 3 GPU. One MPI process is initiated at each unit for computation control (the process is carried out on CPU); from the MPI-process the CUDA threads are initiated, each one being intended for execution on its CUDA core. The Multi-GPU technology is used for controlling three GPU from one CPU. The SSCC provides services in computing and consulting to 19 academic institutions of the SB RAS as well as to three Universities, about 200 users are employing the SSCC resources for solving their tasks. From the variety of problems that have been solved in the SSCC are some problems to be solved in ICMMG. A special attention is being given to training specialists involved in supercomputer technologies. In 2012 , the International Conference “Parallel and Computing Technologies 2012” was held by the ICMMG with 242 participants from Russia, Kazakhstan, Ukraine, Germany, France, the USA (site: <http://agora.guru.ru/display.php?conf=pavt2012>) In the April of 2012, a three-day School on NVIDIA CUDA Technology was held. The School was supported by the specialists of NVIDIA on computer resources of the cluster. 118 listeners from the research institutes of SB RAS, Higher Education Institutions and Firms were trained. Program and teaching materials are displayed at: <http://www2.sscc.ru/Seminars/Nvidia%20Cuda-1.htm> In the December of 2012, The Workshop on Parallel Programming of Hybrid Clusters was held: see at: <http://www2.sscc.ru/Seminars/Shool-2012.htm> Specialists are trained in high-performance computing and mathematical modeling at 5 Chairs at ICMMG: Mathematical Methods in Geophysics (NSU); Numerical Analysis (NSU); Parallel Computation (NSU); Computer Systems (NSU); Parallel Computer Technologies (NSTU). The seminars “Architecture, System and Application Software of Cluster Supercomputers” are regularly held on the basis of the SSCC, the Chair of Computer Systems of NSU and the Competence Center on High-Performance Computing of SB RAS/Intel. The Seminars are presented at: <http://www2.sscc.ru/Seminars/NEW/Seminars.htm>

**NUMERICAL MODELING OF ACOUSTIC-GRAVITY WAVES
PROPAGATION IN A MODEL "EARTH-ATMOSPHERE" WITH WIND¹**

Mikhailenko B. G.¹, Mikhailov A. A.¹

¹*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics,
Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia;*

mikh@sscc.ru

alex_mikh@mail.ru

In the numerical modeling of seismic wave fields in the interior of an elastic medium, it is generally assumed that the medium surface borders on vacuum and boundary conditions are assigned on the free surface. Thus, it is assumed that at the interface, seismic waves are absolutely reflected. In this case the effect of generation by elastic waves of acoustic-gravity waves in the atmosphere and their interaction when propagating along the boundary is neglected. In the last decade there came into being the studies showing a high degree of a correlation between the waves in the Lithosphere and those in the Atmosphere.

In this paper, we consider an efficient algorithm for the numerical modeling and studying the propagation of seismic and acoustic-gravity waves for spatial-inhomogeneous model “Atmosphere-Earth” with wind in the Atmosphere. The propagation of seismic waves in the elastic medium is written down by a well-known system of elastic theory equations of first order through the interconnection of components of the displacement velocity vector and the stress tensor components for the 3D Cartesian system of coordinates. The system of equations, describing the acoustic-gravity waves propagation in the inhomogeneous non-ionized atmosphere, is written down in terms of the interconnection of components of the displacement velocity vector, pressure and variation of the air density with the wind directed in the horizontal plane. The algorithm proposed is based on combining integral transformations with a finite difference method. A characteristic feature of this algorithm is the use of the Laguerre transform along the temporal coordinate. For the first time, this method of solving dynamic problems of elasticity theory was considered in [1, 2]. As opposed to the Fourier transform, the application of the Laguerre integral transform

¹Supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant № 11-05-00937) and project of the Russian Academy of Science (№ 4.9)

with respect to time makes possible to reduce the original problem to solving a system of equations, in which a parameter of separation is present only in the right-hand sides of equations and has a recurrent dependence. As a result, the matrix of the reduced system is well-conditioned, thus making possible to use fast techniques of solving systems of linear algebraic equations based on iterative methods like conjugate gradients, converging to the solution with a required accuracy in no more than in a few iterations. A similar approach to solving a problem for a vertically-inhomogeneous model in the cylindrical coordinate system without allowance for wind in the Atmosphere was considered in [3].

This paper presents numerical results of the simulation of seismic wave fields for test medium models that were obtained by carrying out calculations on the multi-processor computer system.

REFERENCES

1. *Mikhailenko B.G.* Spectral Laguerre method for the approximate solution of time dependent problems. *Applied Mathematics Letters*, 1999. № 12. P. 105-110.
2. *Konyukh G.V., Mikhailenko B.G., Mikhailov A.A.* Application of the integral Laguerre transforms for forward seismic modeling. *Journal of Computational Acoustics*, 2001. Vol. 9, № 4. P. 1523-1541.
3. *Mikhailenko B.G., Reshetova G.V.* Mathematical modeling of propagation of seismic and acoustic-gravity waves for an inhomogeneous model Earth-Atmosphere. *Geology and Geophysics*, [in Russian], 2006. Vol. 47, № 5. P. 547-556.

NUMERICAL MODELING OF SEISMIC FIELDS IN VISCOELASTIC AND POROUS MEDIA FOR DISSIPATIVE CASE¹

Imomnazarov Kh. Kh.¹, Mikhailov A. A.¹

¹*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics,
Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia;*

imom@omzg.ssc.ru

alex_mikh@mail.ru

In simulation of seismic fields in real media, one should take into account the absorption mechanisms of elastic energy in a medium and the corresponding dispersion laws. Such a model may be described within the framework of a combined model for a general theory of viscoelastic and porous medium filled with a viscous fluid. This approach makes it possible to explain the effects observed in seismic investigations of the properties of rocks under absorption of the energy of propagating seismic waves.

In this paper, an algorithm to solve numerically the dynamic problem of seismic wave propagation for the combined mathematical model of viscoelastic and porous medium with allowance for energy dissipation is considered. The model proposed in 1989 by V.N. Dorovsky [1] is used as a porous medium model. This model has three types of oscillations: transverse oscillations and two types of longitudinal oscillations. The elastic parameters of the medium are in one-to-one correspondence by these three velocities of elastic oscillations. The propagation of seismic waves in a fluid-saturated porous medium with energy loss is described by a system of first-order differential equations in a Cartesian system of coordinates. The initial system is written as a hyperbolic system in terms of the velocities of the elastic background medium and saturating fluid, components of the stress tensor and fluid pressure [2]. Mathematical statement of the problem of seismic wave propagation in a viscoelastic medium is written as a system of first-order equations in terms of a relation between the displacement velocity vector and stress tensor components using the Boltzmann superposition principle in convolution integrals with aftereffect functions [3]. This makes it possible to consider general relations between stress and strain by specifying arbitrary aftereffect functions.

¹Supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant № 13-01-00689) and project of the Russian Academy of Science (№ 4.9)

To solve this problem numerically, a method for combining the integral Laguerre transform with respect to time with a finite-difference approximation along the spatial coordinates is used. First this method for solving dynamic problems of elasticity theory was considered in [4] and then developed for viscoelasticity problems in [5]. The algorithm used for the solution makes it possible to perform efficient calculations in simulation of a complicated combined viscoelastic and porous medium and study wave effects emerging in such media.

REFERENCES

1. Dorovsky V.N. Continual theory of filtration. Sov. Geology and Geophysics, 1989. Vol. 30, № 7. P. 34-39.
2. Imomnazarov Kh.Kh. A Mathematical Model for the Movement of a Conducting Liquid Through a Conducting Porous Medium: I. Excitation of Oscillations of the Magnetic Field by the Surface Rayleigh Wave. Math. Comput. Modeling, 1996. Vol. 24, № 1. P. 79-84.
3. Carcione J.M., Kosloff D. and Kosloff R. Wave propagation simulation in a linear viscoelastic medium. Geophys. J. Roy. Astr. Soc., 1988. № 95. P. 597-611.
4. Mikhailenko B.G. Spectral Laguerre method for the approximate solution of time dependent problems. Applied Mathematics Letters, 1999. № 12. P. 105-110.
5. Mikhailenko B.G., Mikhailov A.A., Reshetova G.V. Numerical viscoelastic modeling by the spectral Laguerre method. Geophysical Prospecting, 2003. № 51. P. 37-48.

THE RESEARCH OF 3D NANOSTRUCTURE OF MATERIALS USING SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES

Muratova G. V.¹, Soldatov A. V.¹

¹*Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia;*

muratova@sfedu.ru

soldatov@sfedu.ru

One of the important directions of nanotechnologies is creation of new materials with the defined properties. For improving this activity new methods of diagnostics and research of the materials, devices and systems are required. This work is devoted to research methods of 3D- nano atomic and electronic structure of materials based on XAFS spectroscopy with use of x-ray absorption spectrometer Rigaku R-XAS. The XAFS spectroscopy is the only technique among all techniques using x-ray radiation which allows to determine parameters of 3D- nano atomic and electronic structure of the materials which don't have a distant order in an arrangement of atoms. The nanomaterials including the nano - clusters, nanotubes, defects and impurity in solid materials, the active centers in proteins, metal complexes, catalysts are the most important objects for researches. The mathematical modeling with supercomputer technologies gives to the researcher the possibility that is often impossible in experiment. High Performance Computing Center of the Southern Federal University provides to researchers the convenient computing environment for numerical experiments in the field of the nanotechnologies including research of of 3D- nano atomic and electronic structure of materials. Special software is used.

**FINITE DIFFERENCE SCHEMES FOR SYSTEMS OF CONSERVATION
LAWS**

Ostapenko V. V.

Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk, Russia;
ostapenko_vv@ngs.ru

A convergence of high order shock capturing difference schemes is analyzed. Conditions of weak finite difference approximations which conserve a sense on discontinuous solutions are introduced. Necessary and sufficient conditions of these approximations are obtained. It is shown that among the explicit two-layer in time conservative difference schemes there are no schemes which can have high order of weak approximation. A compact scheme of the same third order of classical and weak approximations is constructed. There is demonstrated an advantage of this scheme in comparison to TVD scheme at shock-capturing computations. A difference approximation of ϵ -Rankine-Hugoniot (RH) conditions is investigated. It is shown that TVD type schemes (in contrast to non-TVD schemes, whose numerical fluxes are smooth enough) can approximate ϵ -RH-conditions at most with the first order. Given examples show that non-TVD schemes (in contrast to TVD schemes) can have the second order of integral convergence through the smearing shocks and as a result can conserve a higher accuracy in the post shock regions.

NUMERICAL SIMULATION OF ARTIFICIAL SOIL FREEZING ON HIGH-PERFORMANCE SYSTEMS¹

Pavlova N. V.¹, Vasilyeva M. V.¹

¹*M.K. Ammosov North-Eastern Federal University, Yakutsk, Russia;*
npav@rambler.ru
vasilyevadotmdotv@gmail.com

Artificial freezing of saturated soils widely used in the construction and mining industries. Freezing technology used for the construction of mines, tunnels, subways, pits for laying deep foundations and to create antifiltration screens which used in extraction of mineral resources [1]. In the construction of buildings on permafrost, artificial freezing with cooling devices applied near of piles to ensure stability, through the creation of large blocks of frozen soil around the pile which will protect soil by melting during the summer.

Mathematical model of such process includes the equation for the pore water, Darcy's law and the law of conservation of energy [2]. Numerical implementation is based on the finite element method using the FEniCS package [3].

Example of solutions considered at the model problem of artificial freezing of trunk in underground mine, which is used to pass through the filtration horizons. Because the size of freezing columns are substantially less than the size of the modeled area, we obtain mesh refinement near columns. Due to this, we get a large system of equations which are solved on high-performance systems - at the North-Eastern Federal University computing cluster "Arian Kuzmin".

REFERENCES

1. Vasilyiev V. I., Maksimov A. M., Petrov E. E., Tsypkin G. G. Heat and mass transfer in freezing and thawing soils. Nauka, Moscow, 1996.
2. Samarskii A. A., Vabishchevich P. N. Computational Heat Transfer: Mathematical Modelling. Vol.1. Chichester, Wiley, 1995.
3. Anders Logg, Kent-Andre Mardal, Garth N. Wells Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. Fenicsproject.org, 2011.

¹Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ-Дальний Восток (№ 12-01-98514, № 13-01-00719А)

**DYNAMICS OF HIGH-ORDER HOPFIELD NEURAL NETWORKS
WITH TIME DELAYS**

Qiu Jianlong

Linyi University, Linyi, China;
qjl9916@gmail.com

In this paper, the global exponential stability and the existence of periodic solution are studied for a class of high-order Hopfield neural networks (HHNNs) with time delays by employing Lyapunov method and linear matrix inequality (LMI) technique. Simple sufficient conditions are given ensuring global exponential stability and the existence of periodic solution of HHNNs. The proposed results improve some previous works and do not require the symmetry of weight matrix. Finally, two illustrative examples are given to demonstrate the effectiveness of the obtained results.

REFERENCES

1. *J.L. Qiu* Dynamics of high-order Hopfield neural networks with time delays, Neurocomputing, 2010. V. 73. P. 820-826.

**CABARET-CODE BASED ON MONOTONICALLY INTEGRATED LES
WITH ACOUSTIC POST-PROCESSING FOR AERODYNAMIC AND
AEROACOUSTIC SIMULATIONS ON SUPERCOMPUTER¹**

Semiletov Vasily¹, Karabasov Sergey¹

¹*Queen Mary University of London, London, UK;*

v.semiletov@qmul.ac.uk

s.karabasov@qmul.ac.uk

To model the sound propagation through non-uniform mean flow, a new 3D adjoint linearized Euler solver in the frequency domain is developed. For validation, the problem of sound scattering from a 3D axisymmetric parallel jet flow is considered. The results of numerical convergence study at different mean flow resolutions, frequencies and observer angles are presented. A detailed comparison with the Green's functions obtained from the semi-analytical solution of the parallel-flow problem is performed. Also we present aerodynamic and aeroacoustic validation of scalable CABARET-code with Monotonically-Integrated Large Eddy Simulation (MILES) for flow around NACA0012 airfoil at $Re=400000$ and $M=0.058$ and for jet-pylon-wing-flap interaction based on a model installed jet geometry at $Re=1$ million and $M=0.5$. The flow solution is coupled with the Ffowcs Williams - Hawkings formulation for far-field noise prediction. The computational modeling results for both problems are presented for several computational grid resolutions and the comparison with the experimental data is demonstrated.

¹The work is supported by UK Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC Grant EP/I017747/1). The use of computing time on HECToR supercomputing facility is gratefully acknowledged. SK is also thankful to the Royal Society of London for its continuing support.

**NUMERICAL MODELING OF FILTRATION FLOWS AND
EVAPORATION FRONTS IN LOW PERMEABILITY NONWETTABLE
POROUS MEDIUM**

Shargatov V.¹, Il'ichev A.²

¹*National Research Nuclear University “MEPhI”, Moscow, Russia;*
shargatov@mail.ru

²*Steklov Mathematical Institute, Moscow, Russia;*
ilichev@mi.ras.ru

Instability of vertical flows with a phase transition interface in a horizontally infinite two dimensional domains of a porous medium is studied numerically. The water layer is located over an air-vapor layer in a porous medium. The capillary forces affect the surface of the phase transition. In the case of a nonwettable porous medium the surface of evaporation can have two equilibrium positions, depending on the parameters, the initial and boundary values. We limit our study to the situation, when according [1] the lower interface position is linearly stable and the upper interface position is linearly stable for only short wave perturbations (the most unstable normal mode has the zero wave number). The stability of these interfaces in the case of localized finite amplitude perturbations is studied numerically. If the localized finite amplitude perturbations of the linearly stable lower interface is directed downwards the interface is stable. If the localized finite amplitude perturbations of this interface is directed upwards and the amplitude of these perturbations is greater than some critical value depending on the horizontal size of the perturbation they grow unboundedly with time. This critical value is always greater than the distance between the lower and upper positions of the interface. The upper equilibrium state is destabilized under the impact of any finite size perturbation. Destabilization exists even in the case when the horizontal size of the perturbation is sufficiently small and harmonic perturbation with such a small wave length can not destabilize the interface in compliance with the linear theory.

REFERENCES

1. Il'ichev A.T., Tsypkin G.G. Catastrophic transition to instability of evaporation front in a porous media. European Journal of Mechanics B/Fluids 27, 2008, 665-677

**THEORETICAL STUDIES OF NONSTATIONARY FLOW OF A
HIGHSPEED AIRCRAFT IN THE CONDITIONS OF THE
DESTRUCTION OF THE SURFACE**

Sidnyaev N. I.

Moscow State Technical University n.a. N.E. Bauman, Moscow, Russia;
Sidn_ni@mail.ru

At the present time flue heat insulating coatings are widely used for protection of heat exposed surfaces of aircrafts, the use of which in most cases turns out to be very effective, however significant change of the geometrical form of the streamlined surface is possible and, as a consequence, its strength characteristics. Surface mass exchange at the flow of the hypersonic aircraft, caused by decomposition products thermal barrier coatings due to the high thermal load or forced supply of coolant in the boundary layer causes turbulence and thickening of the latter, but with a sufficiently high intensity of mass transfer - force out of the border of the layer from the surface of the body, the formation of the surface layer of the products of destruction and, as a consequence, significant changes in non-stationary aerodynamic characteristics of the aircraft. [1]. Derivative analysis of aerodynamic moments on the corner of the attack made it possible to establish whether the body of the static stability, as well as explore not only the fluctuations of the aircraft, but also the general case of motion of the trajectory, and stability of this the movement for different intensities of the mass [2]. In the framework of this work the mathematical model of a flow around a flickering in the flow of a body of revolution in the framework of the system of Navier-Stokes equations with account of the influence of the destruction of the surface of the dynamic stability of axisymmetric bodies speed, pressure distribution on the surface of the combined phone and on a rotational derivative with account of amplitude of oscillations of the model. Formulated and substantiated the basic requirements for hypersonic aircraft, when the destructive coating pushes the boundary layer. The methodology of calculation of the intensive mass transfer was established to determine the influence of the intensity of mass transfer in the outer flow, allowing optimization of the gasdynamic characteristics of the aircraft. Flow around various forms of hypersonic aircraft complex geometric shapes with regard for physico-chemical transformations, distributions of the pressure and the heat flow

on the surface, as well as of non-stationary dynamic characteristics were investigated.

REFERENCES

1. *Sidnyaev N.I.* Aerodynamic characteristics of hypersonic aircraft with surface mass-exchange /Mathematical modeling. -2008, T. 20, №4, p. 23-34.
2. *Sidnyaev N.I.* Nonstationary heat conduction over a blunt body with surface mass exchange placed in a supersonic flow/Zhurnal technicheskoi physiki, Vol. 50, No.7, 2005, pp. 828-834.

**NUMERICAL MODELING OF RAREFIED GAS FLOWS ON
SUPERCOMPUTERS**

Titarev V. A.^{1,2}, Utyuzhnikov S. V.^{2,3}

¹*Dorodnicyn Computing Centre, Moscow, Russia;*

²*MIPT, Moscow, Russia;*

³*University of Manchester, Manchester, UK;*

titarev@mail.ru

titarev@ccas.ru

Computer simulation of three-dimensional rarefied gas flows is based on the numerical solution of the kinetic equation for the velocity distribution function. In [1-2] an implicit single-block method for model kinetic equations was developed, which consists of a non-oscillatory TVD method on hybrid unstructured meshes, conservative procedure for calculation of macroscopic parameters of the gas and fully implicit one-step time evolution method without iterations on the upper time level. The parallel implementation of the method uses the partitioning of the molecular velocity mesh, which allows one to keep all the advantages of the implicit method of solution. Despite its advantages, the parallel method based on the partitioning of the velocity mesh will have restrictions on the size of the spatial mesh on the most of the existing HPC systems. The conventional approach with multiblock spatial meshes is free of such limitations. The main goal of the present work is to analyze the multi-block version of the implicit scheme [1-2], which does not make use of the data exchange between blocks during the solution of the linear system of equations for the solution increments in the implicit scheme. The analysis is based on various calculations for the problem of rarefied gas flow through a circular pipe caused by the pressure drop [3] as well as external supersonic flow over a model re-entry vehicle of TsAGI. The studies focus on the influence of the number of blocks as well as choice of the time step on the convergence to the steady solution. The strong scalability of both versions of the parallel method for up to 2000 CPU cores of the “Lomonosov” supercomputer of the Lomonosov Moscow State University is also investigated.

This work has been supported by the Russian government under grant “Measures to Attract Leading Scientists to Russian Educational Institutions” (contract No. 11.G34.31.0072).

REFERENCES

1. Titarev V.A. Implicit numerical method for computing three-dimensional rarefied gas flows using unstructured meshes // Comput. Math. Math. Phys. 2010. V. 50. N. 10. P. 1719–1733.
2. Titarev V.A. Efficient deterministic modelling of three-dimensional rarefied gas flows // Communications in Computational Physics. 2012. V. 12 N. 1. P. 161–192
3. Titarev V.A., Shakhov E.M. Computational study of a rarefied gas flow through a long circular pipe into vacuum // Vacuum, Special Issue ‘Vacuum Gas Dynamics’. 2012. V. 86. N. 11. P. 1709–1716.

THE TRIANGLE OF KNOWLEDGE APPLIED IN A REMOTE REGION

Tsichritzis D.¹, Hristopulos D. T.¹

¹ *Technical University of Crete, Chania, Greece;*
dennis.tsichritzis@gmail.com
dionisi@mred.tuc.gr

The Triangle of Knowledge signifies Education, Research and Innovation working together for economic advancement. The best known example is the Region of Silicon Valley where this synergy produced phenomenal results. In this paper we analyze all the difficulties for implementing such an environment, especially in a remote region. We claim that it is impossible to duplicate the model of Silicon Valley and it is important to seek a model adapted to the Region, with all its strengths and weaknesses. Finally, we give an example of Technology which can be exported and exploited directly from one remote Region to another.

SEALING OF PERMEABLE POROUS MEDIA AND MULTI-VALUED SOLUTION

Tsyplkin G. G.

Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, Russia;
gtsyplkin@yandex.ru

Processes in porous permeable rock in which solid material is deposited from solution or is removed due to dissolution are very important for different applications. In [1] the TOUGH2-EWASG code has been used to study reduction of rock porosity and permeability due to salt precipitation in porous and fractured geothermal reservoir. In [2] has been considered precipitate formation around gas production well during exploitation of gas reservoir when saline water is present. In [3] the authors modeled of halite formation during the injection of natural gas in storage aquifer. Degradation of soils as a result of salinization is a well-known problem. Essentially salt accumulation in soil occurs when salt, dissolved in the liquid phase, is transported to the ground surface and precipitates when water evaporates.

A mathematical model of salt precipitation at a sharp vaporization front, which develops in geothermal reservoir, has been presented and analytically investigated in [4]. The authors have found that two branches of self-similar solution exist in a wide range of parameters. For a large reservoir pressure which initiate a large mass flux from a far-field towards the front these two branches coincide and above a critical value of the par-field pressure the self-similarity solution ceases to exist. The authors guess that the collapse of the similarity solution corresponds to the regime of reservoir sealing when solid salt fully occupies porous space. In [5] the TOUGH2-EWASG code was used to verify this hypothesis and investigate the precipitate formation near the critical point where asymptotic solution ceases to exit. We found that the numerical solution describes sealing process when solid salt saturation tends to 1 and mass flux through the porous rock vanishes. Analogous problem arises when salty groundwater evaporates near surface [6]. It was found that for the same initial and boundary values two solutions exist. At small humidity of air, large salt concentration and filter velocities, these roots coincide and solution ceases to exist.

Hot dry rock technology and some natural processes deal with water moving into hot rock saturated with superheated vapour. In this work we

consider injection of pure water into geothermal reservoir, saturated with superheated vapour and solid salt. Pure water moves from the injection well and dissolves solid salt. If salty water penetrates into the rock which contains solid salt it reaches saturation state. When saturated solution reaches hot domain water evaporates and salt precipitates at the boiling front. As a result three domains, separated by two phase transition surfaces, form in the geothermal reservoir. In the first domain ahead of boiling – precipitation front solid salt saturation function remains unperturbed. Saturated solution and solid salt at equilibrium state occupies porous space in the second domain, which locates between the first boundary and rear dissolution front. The third domain adjacent to the injection well contains pure water and occupies space between the well and dissolution surface.

We derive similarity solution which describes the process. The solution is two-valued analogously, as it has been found for the problems [4,6]. When parameters of the problem tend to the critical domain two solutions approach each other, then coincide and solution ceases to exist. In this case impermeable plug of solid salt fully occupies porous space behind the boiling surface. We suppose that appearance of multi-valued asymptotic solutions is the characteristic feature of all sealing problems when precipitate formation blocks liquid and gas flow.

REFERENCES

1. Battistelli A., Calore C., Pruess K. The simulator TOUGH2/EWASG for modeling geothermal reservoirs with brines and noncondensable gas // Geothermics. 1997. V. 26, PP. 437-464.
2. Kleinitz W., Koehler M., Dietzsche G. The precipitation of salt in gas producing well // Paper SPE 68953. SPE Europ. Formation Damage Conference, Netherlands. 2001.
3. Lorentz S., Muller W. Modelling of halite formation in natural gas storage aquifers // Proceedings TOUGH2 Symposium, Berkeley, California. 2003.
4. Tsypkin G.G., Woods A.W. Precipitate Formation in a Porous Rock Through Evaporation of Saline Water // J. Fluid Mech. 2005. V. 537, PP. 35-53.
5. Tsypkin G.G., Calore C. Investigation of salt precipitation in geothermal reservoir near sealing conditions // Proc. XXXVI Workshop on Geothermal Reservoir Eng. Stanford. January 22-24. 2007.

6. *Tsyplkin G.G.* Two-valued solutions in the problem of salt precipitation during groundwater evaporation // Fluid Dynamics. 2005. V. 40, PP. 593-599.

THE ITERATIVE SOLUTION OF THE INVERSE PROBLEM FOR THE EQUATION OF OSCILLATIONS OF A STRING

Vasilyev V. I.¹, Popov V. V.¹

¹*North-Eastern Federal University, Yakutsk, Russia;*

vasvasil@mail.ru

vv.popov@s-vfu.ru

The problem of restoring one of the initial conditions for the equation of vibrating string with fixed ends. Also of interest iterative methods for the approximate solution of ill-posed problems inherent scientific school of academician A.N. Tikhonov [1]. The numerical method for solving the Dirichlet problem for the two-dimention equation studied by S.I. Kabanikhina and his disciples [2,3]. For the numerical solution of the conditionally well-posed problem used the idea of the iterative method proposed for the numerical solutions retrospective inverse heat conduction problem [4]. The method is in the construction of an iterative method of variational type that consists on successive refinement of the initial conditions and the solution at each iteration direct problem. Implemented the minimum residual iterative methods (dual-layer) and associated residuals (three layers). The numerical calculations model problems showed significantly faster convergence of the conjugate residuals.

REFERENCES

1. Tikhonov A.N., Arsenin V.Y. Methods for solving ill-posed problems -Mu: Nauka, 1986.
2. Kabanikhin S.I., Bektemesov M.A., Nursetitov D.B., Krivorotko O.I., Alimova A.N. An optimization method in the Dirichlet problem for the wave equation // Journal of inverse and III-Posed Problems. 2012. V. 20, № 2. Pp. 139-270.
3. Kabanikhin S.I., Krivorotko O.I. A numerical method for solving the Dirichlet problem for the wave equation. Sib. Journal of Industrial Mathematics, 2012, v. 15, # 4, p. 90-101.
4. Samarskiy A.A., Vabishchevich P.N., Vasilyev V.I. Iterative solution of the inverse heat conduction problem of retrospective // mathematical modeling. 1997, v. 9, # 5, p.119-127.

RUNGE-KUTTA METHOD APPLIED IN CONTINUITY EQUATIONS

Xin Wen¹, Shaydurov V.¹

¹*School of Mathematics and System Sciences, Beihang University,
Beijing, China;
wenxin1232@gmail.com
shaidurov04@mail.ru*

We consider the hyperbolic equation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(u\rho)}{\partial x} = f(t, x), t > 0, x \in [0, 1] \quad (3)$$

where $u(t, x)$ is known as velocity coefficient. $\rho(t, x)$, $f(t, x)$ and $u(t, x)$ are supposed to be periodical in x .

To solve (1), we use the following difference scheme (2) at time level $t = t_m = m\tau$ on uniform mesh with nodes $x_i = ih$.

$$\frac{1}{\tau}(\rho_i^m - \frac{1}{h} \int_{A_{i-\frac{1}{2}}}^{A_{i+\frac{1}{2}}} \rho_h^{m-1} dx) = f_i^m. \quad (4)$$

Here τ is time step and h is space step. ρ_h^{m-1} is known function at time level $t = t_{m-1}$, and ρ_i^m is nodal value of function $\rho_h^m(x_i)$ at level $t = t_m$. Points $A_{i\pm\frac{1}{2}}$ satisfy the ordinary differential equations.

$$\begin{cases} dx/dt = u(t, x), t \in [t_{m-1}, t_m], \\ x(t_m) = x_i \pm h/2. \end{cases} \quad (5)$$

In previous work [3], we use straight lines instead of curve lines. Now we use Runge-Kutta method to get more accurate results for great values of velocity u . Anyhow, we can only get first order of accuracy since the right-hand side is nonzero.

In numerical experiment, we take

$$u(t, x) = \frac{1}{2} \sin(2\pi x)t + 1.0 \quad (6)$$

and

$$f(t, x) = -\sin(2\pi x)e^{-t} + 2\pi \cos(2\pi x)e^{-t} \cdot u(t, x) + \pi t \cos(2\pi x) \cdot \rho(t, x) \quad (7)$$

where

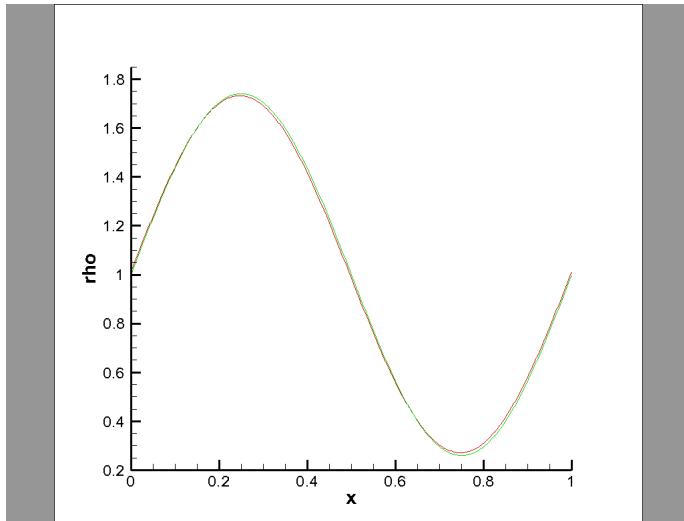
$$\rho(t, x) = e^{-t} \sin(2\pi x) + 1.0 \quad (8)$$

is the exact solution.

Some numerical results show the error at $t = 0.3$ in norm of space $L_1([0, 1])$ as follows.

Error under condition $\tau/h = 0.25$

Nodes	20	40	80	160	320
Error	0.25065	0.13503	0.07013	0.03577	0.01805



T=0.3 N=320

REFERENCES

1. Polyanin A.D. Handbook of linear partial differential equations for engineers and scientists. - Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press. - 2002.
2. Shaydurov V., Liu T., Zheng Z. Four-stage computational technology with adaptive numerical methods for computational aerodynamics // American Institute of Physics. Conference Proceedings. - 2012. - Vol. 1484. - P. 42-48.
3. Синь Вэнъ, Вяткин А.В., Шайдуров В.В. Characteristics-like approach for solving hyperbolic equation of first order // Молодой учёный. - 2013. - №3 (50). - C. 5-12.

MEDICAL IMAGE SEGMENTATION USING MRF-BASED OPTIMIZATION

Yun Il Dong¹, Park Sang Hyun²

¹*Digital Information Engineering, Hankuk University of Foreign Studies,
Seoul, Korea;
yun@hufs.ac.kr*

²*Electrical Computer Engineering, ASRI, INMC, Seoul National
University, Seoul, Korea;
shpark@cvl.snu.ac.kr*

Segmentation of desired objects in medical images is an important task for morphological assessment, inter-subject comparisons, studying pathological changes of organs, and monitoring disease progression. However, the

segmentation with manually from the three dimensional and high resolution medical images is very laborious and time-consuming task. Fortunately, since the medical images with the same modalities include the similar appearance and structure of target objects and limited shape deformations, sophisticated models would be constructed from a finite number of training data. We propose a new hierarchical Markov random field (H-MRF) comprised of local-level MRFs based on adaptive local priors which model local variations of shape and appearance and a global-level MRF enforcing consistency of the local-level MRFs [7,8,9]. The proposed H-MRF can effectively deal with both local and global variations of shape and appearance unlike previous MRF based methods which only utilize the local prior [1,2,3] or the global prior [4,5]. Furthermore, the H-MRF framework is readily combined with well established MRF optimization techniques. Overall, the proposed method mitigates the adverse effect of large object variations and weak boundaries between objects and other tissues on segmentation accuracy to provide robust results. In addition to these strengths, the proposed H-MRF framework has several advantages. First, the H-MRF covers large local variations, such as pathological deformities, even though the training set may not contain subjects with similar deformities in similar positions. Since the multiple localized classifiers based on different characteristics create various candidates for the local variations, some of them are able to find the abnormal deformities. Second, construction of a complex training model is not required, because training set images are

essentially just templates which are searched to find local patches with similar position and appearance that are directly applied as local cues. Therefore, the H-MRF can be applied given various data sets even with a small training set. Third, complex non-rigid registration techniques [6] with extensive computations are not required. Finally, since identical processes are repeated for local regions in our algorithm, the method can easily be optimized by various parallelization techniques, in order to reduce the computation time.

REFERENCES

1. *Pawan Kumar, M. and Torr, P. H. S. and Zisserman, A.* OBJ cut. CVPR, 2005.
2. *Kohli, P. and Rihan, J. and Bray, M. and Torr, P. H. S.* Simultaneous segmentation and pose estimation of humans using dynamic graph cuts. International Journal on Computer Vision, 2008. V. 79. P. 285-298.
3. *Lee, S. and Park, S. and Shim, H. and Yun, I. and Lee, S.* Optimization of local shape and appearance probabilities for segmentation of knee cartilage in 3-D MR images. Computer Vision and Image Understanding, 2011. V. 115. P. 1710-1720.
4. *Freedman, D. and Zhang, T.* Interactive graph cut based segmentation with shape priors. CVPR, 2005.
5. *van der Lijn, F. and den Heijer, T. and Breteler, M. M. and Niessen, W. J.* Hippocampus segmentation in MR images using atlas registration, voxel classification, and graph cuts. NeuroImage, 2008. V. 43. P. 708-720.
6. *Glocker, B. and Komodakis, N. and Tziritas, G. and Navab, N. and Paragios, N.* Dense image registration through MRFs and efficient linear programming. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2008. V. 12. P. 731-741.
7. *Park, S. and Lee, S. and Yun, I. and Lee, S.* Hierarchical MRF of globally consistent localized classifiers for 3D medical image segmentation. Pattern Recognition, 2013. V. 46. P. 2408-2491.
8. *Park, S. and Yun, I. and Lee, S.* Data-driven Segmentation Method based on Structured Patch Model for Medical Images. IPMI, 2013.
9. *Park, S. and Yun, I.* Interactive 3D segmentation method based on uncertain local region updating in hierarchical MRF graph. SPIE M.I., 2013.

**DOMAIN DECOMPOSITION SCHEMES WITHOUT OVERLAPPING
SUBDOMAINS FOR THE PARABOLIC PROBLEMS**

Zakharov P. E.

*Center of computational technologies NEFU, Yakutsk, Russia;
zapetch@gmail.com*

Domain decomposition methods are used for numerical solution of boundary value problem for partial differential equations on parallel computers. There are different methods of domain decomposition: with overlap and without overlap, iterative and iteration-free, on algebraic level and on boundary value problem level.

Unconditionally stable schemes of domain decomposition without overlapping subdomains are considered. As model problem we consider a Cauchy problem for parabolic equation. The initial problem splitted to the boundary value problems within each subdomain and the problem at their common boundaries. On the example of explicit domain decomposition scheme we investigate the complexity and efficiency of the parallel algorithm. An accuracy, complexity and efficiency of parallel algorithms of domain decomposition schemes are compared and is supplemented with numerical experiments.

REFERENCES

1. Vabishchevich P.N. A Substructuring Domain Decomposition Scheme for Unsteady Problems. Computational Methods in Applied Mathematics, Vol. 11 (2011), No. 2, pp. 241-268.
2. Pe?ivac-Grbovi? J. et al. Performance analysis of MPI collective operations. Cluster Computing, №. 10 (2007), No. 2, pp. 127-143.
3. Vabishchevich P.N., Zakharov P.E. Domain Decomposition Scheme for First-Order Evolution Equations with Nonselfadjoint Operators. Numerical Solution of Partial Differential Equations. Vol. 45 (2013), pp. 279-302

**THE DEVELOPMENT OF THE FINITE-ELEMENT ALGORITHM ON
THE BASIS OF A MIXED FUNCTIONAL OF THE SOLUTION OF THE
PLANE PROBLEM OF HEAT CONDUCTIVITY WITH THE USE OF
HIGH-PERFORMANCE COMPUTING ON A SUPERCOMPUTER
"PSU-TESLA"**

Zotina V.O.

Perm State National Research University, Perm, Russia;
Veronika.Zotina@gmail.com

The Finite element method (FEM) which is one of the forms of the deflection method as well as the form of the method aimed at calculation of the heat and other fields applying to the composite structures is not always effective because of high gradients near the surface of cohesion.

In this work the realization of the method of the solution to the plane problem of the stationary heat conductivity is described. The edge conditions of the first road, that is the temperature, and the third one, that is the heat exchange with the environment, which are based on the compound functional in the form of the method of subregion are presented. This approach gives an opportunity to satisfy the edge conditions as well as the conditions of the conjugation of a general surface. The area of the solution finding is presented in the combination of the finite number of subregions so that in each subregion the physical and mechanical characteristics stay continuous. The subregions are divided into the basic final elements. The solution to the temperature in the problem of heat conductivity is searched in the whole area of the class of the continuous function while the one to the temperature of the vector gradient must be searched in the class of functions, continuous in subregions.

The programme is written in the programming language Fortran 90 with the usage of highly productive calculations on the graphic processors NDIVIA-CUDA.

REFERENCES

1. Larry J. Segerlind. Applied finite element analysis. – 1979. – P. 219-240.
2. Pestrenin V.M., Pestrenina I.V. Mechanics of composite materials and constructional elements. // Perm.: PSU. – 2005. – P. 254-265.
3. Barteniev O.V. Modern Fortran// Moscow.: 2000. – P. 350-400

**СОВРЕМЕННЫЕ ТЕНДЕНЦИИ РАЗРАБОТКИ
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ: ОВЗОР
НОВЕЙШИХ ПРОГРАММНЫХ ИНСТРУМЕНТОВ INTEL, ПРИМЕРЫ
ИХ ЭФФЕКТИВНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ И СПЕЦИАЛЬНЫЕ
ПРОГРАММЫ INTEL ДЛЯ ПОДДЕРЖКИ РАЗРАБОТЧИКОВ**

**MODERN TRENDS IN HPC (HIGH-PERFORMANCE COMPUTING)
APPLICATION DEVELOPMENT: OVERVIEW OF INTEL SOFTWARE
PROGRAMMING TOOLS, EXAMPLES OF THEIR EFFECTIVE USAGE
AND SPECIAL INTEL RUSSIA/WORLDWIDE PROGRAMS FOR
DEVELOPERS**

Авдеев А. В.

Intel Corporation, Russia;
alexander.v.avdeev@intel.com

В докладе будет рассказано о современных тенденциях разработки высокопроизводительных приложений и дан обзор новейших программных инструментов Intel - Intel®Parallel Studio XE 2013 и Intel®Cluster Studio XE 2013, которые включают оптимизированные компиляторы, математические библиотеки и средства оптимизации и распараллеливания программ. Эти инструменты позволяют разработчикам оптимизировать скорость работы приложений в системах на базе процессоров текущего и будущих поколений, включая новейшие сопропцессоры Intel®Xeon Phi™. Наборы инструментов помогают специалистам с наименьшими усилиями повышать производительность приложений, запускаемых на серверах, вычислительных кластерах, рабочих станциях, настольных ПК и на устройствах Ultrabook™. Будут показаны примеры эффективного использования программных инструментов Intel. Особое внимание будет уделено вопросам лицензирования программных инструментов Intel и различным вариантам предоставления лицензий на программные инструменты Intel. Также в докладе будет рассказано об университетских, академических и партнерских программах Intel.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Intel®Software Tools Information:*
<http://www.intel.com/software/products>

2. Intel®Software online trainings, forums and other resources:
<http://software.intel.com/en-us/intel-learning-lab/>
<http://software.intel.com/en-us/articles/intel-sdp-resources/>
<https://premier.intel.com>
<http://software.intel.com/en-us/forums/>
3. Intel®Software Development Products Registration Center:
<https://registrationcenter.intel.com>

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ТЕМПЕРАТУРНОГО
ПОЛЯ МНОГОЛЕТНЕМЕРЗЛЫХ ГРУНТОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ
БЕСКАНАЛЬНЫХ ПОДЗЕМНЫХ ТРУБОПРОВОДОВ
ТЕПЛОСНАБЖЕНИЯ**

**STUDY OF PERMAFROST TEMPERATURE FIELD DYNAMICS
AROUND UNDERGROUND HEAT SUPPLY PIPELINE**

Акимов М. П.

*Северо-Восточный Федеральный Университет им. М.К. Аммосова,
Якутск, Россия;
mir_akimov@mail.ru*

При исследовании влияния подземного полимерного трубопровода с теплоизоляцией в процессе эксплуатации на вечномерзлый грунт температурную задачу обычно решают методом конечных разностей в декартовой системе координат. При таком подходе возникают сложности с аппроксимацией границ рассматриваемой области. В плоском случае границы расчетной области представляют собой отрезки прямых и полуокружностей, что затрудняет выбор системы координат для построения расчетной сетки. При использовании декартовой системы координат приходится аппроксимировать окружности ломаными линиями, что, естественно, влияет на точность определения температурного поля в многослойной трубе ввиду наличия условий теплового контакта между трубой и теплоизоляцией. При исследовании влияния теплоносителя в трубе на тепловое состояние грунта, приближенное задание границ в непосредственной близости от теплообменной поверхности может привести к существенным погрешностям при определении границ оттаивания. Для более точного описания температурного поля в окрестности трубы с теплоносителем перспективным представляется решать задачу в полярных координатах. Естественно, при этом будут приближенно описаны прямые участки границ области, что также снизит точность расчета, но можно предположить, что их влияние на определение границ оттаивания грунта будет значительно ниже.

На основе решения двумерной задачи Стефана в полярных координатах исследуется процесс оттаивания-промерзания грунта вокруг подземного трубопровода теплоснабжения из полиэтилена с тепловой изоляцией из пенополиуретана в полиэтиленовой оболочке. Адекватность математической модели реальному тепловому процессу подтверж-

ждена сопоставлением расчетных и экспериментальных температурных данных, полученных около действующего теплопровода в г. Якутска. Приводятся результаты вычислительных экспериментов по исследованию влияния толщины теплоизоляции и заглубления теплопровода на оттаивание-промерзание многолетнемерзлого грунта. Установлено, что при воздействии бесканальных подземных полимерных трубопроводов теплоснабжения на многолетнемерзлый грунт существует толщина теплоизоляции и глубина заложения, определяемая расчетом, при которых глубина оттаивания в регионах холодного климата восстанавливается до глубины сезонного оттаивания к началу отопительного сезона.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСМЕМБРАННОЙ ДИФФУЗИИ МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ¹

STUDY OF TRANSMEMBRANE TRANSPORT USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Антонов М. Ю.¹, Науменкова Т. В.² , Левцова О. В.² ,
Шайтан К. В.²

¹ Северо-Восточный федеральный университет, Якутск, Россия;

² Биологический факультет МГУ, Москва, Россия

mikhail@s-vfu.ru

Методы компьютерного моделирования давно доказали свою эффективность при моделировании поведения различных систем, в том числе биологических [1, 2]. В работе метод молекулярной динамики применялся для изучения трансмембранный диффузии малых молекул через липидные бислои, имитирующие клеточные мембранны.

Моделирование мембранных систем методом молекулярной динамики сопряжено с рядом сложностей. Параметры и протокол молекулярной динамики должны быть подобраны таким образом, чтобы адекватно воспроизводить структурные характеристики моделируемых бислоев. Ограниченностю множества бислоев, для которых экспериментально установлены структурные характеристики, дополнитель но затрудняет разработку корректных протоколов для молекулярно - динамических исследований [3, 4].

В рамках работы при помощи методов молекулярного моделирования изучена динамика и основные физико-химические свойства липидных бислев, имитирующих модельные клеточные мембранны эукариот и прокариот. Рассматривались бислои, образованные молекулами липидов различной длины, как насыщенные, так и ненасыщенные, в том числе со смешанным липидным составом, что позволило исследовать влияние липидного состава на структурно-функциональные характеристики бислоя.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (госконтракт № 07.514.11.4127) и Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 12-04-31934).

Апробирована методика изучения транспорта молекул через бислой с использованием метода управляемой молекулярной динамики на примере молекул воды и аммиака. В рамках подхода произведена оценка кинетических параметров проникновения молекул, проведено сравнительное изучение эффективных вязкостных характеристик различных мембранных структур и диффузионных свойств малых молекул, что труднодоступно в натурных экспериментах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Антонов М.Ю., Шайтан А.К., Боздаганян М.Е., Орехов Ф.С., Шайтан К.В. Использование параллельных вычислений для решения задач молекулярного моделирования. The application of parallel calculations for the study of the dynamics of biomacromolecules using molecular modeling. Труды Международных конференций по математическому моделированию. Якутск: Издательство «Сфера», 2012, ISBN 978-5-91794-049-6, с.263-278.
2. Levtsova OV, Antonov MY, Naumenkova TV, Sokolova OS Interaction of zervamicin IIB with lipid bilayers. Molecular dynamics study. Comput. Biol. Chem. 2011 Feb;35(1):pp.34-39.
3. К.В. Шайтан, М.Ю. Антонов, Е.В. Турлей, О.В. Левцова, К.Б. Терёшкина, И.Н. Николаев, М.П. Кирпичников. Сравнительное изучение молекулярной динамики, диффузии и проницаемости по отношению к лигандам для биомембран с различным липидным составом. Биологические мембранны, 2008, 25(1), с. 75-83.
4. К.В.Шайтан, М.Ю.Антонов, Е.В.Турлей, О.В.Левцова, К.Б.Терешкина, И.Н.Николаев Молекулярная динамика и диффузия в биомембранах с различным липидным составом. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Под ред. В.А.Иванова, А.Л.Рабиновича и А.Р.Хохлова, М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009, ISBN 978-5-397-01119-8, с. 491-503.

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ
ВОЛНОВОЙ ДИНАМИКИ ПРИРОДНЫХ СТРАТИФИЦИРОВАННЫХ
СРЕД: ТЕОРИЯ, НАТУРНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ, ПРИЛОЖЕНИЯ**

**FUNDAMENTAL PROBLEMS OF NATURAL STRATIFIED MEDIUM
WAVE DYNAMICS: THEORY, MEASUREMENTS, APPLICATIONS**

Булатов В. В.¹, Владимиров Ю. В.¹

¹Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва,
Россия;
bulatov@index-xx.ru

В настоящее время наблюдается рост интереса к математическому моделированию волновых движений неоднородных природных стратифицированных сред, обусловленный проблемами геофизики, океанологии, физики атмосферы, охраны и изучения окружающей среды, эксплуатации сложных гидротехнических сооружений, в том числе морских нефтедобывающих комплексов и рядом других актуальных задач науки и техники. Доклад посвящен изложению фундаментальных проблем волновой динамики природных стратифицированных сред (океана). Исследованы основные математические модели, описывающие процессы возбуждения и распространения негармонических пакетов внутренних гравитационных волн в стратифицированных по вертикали, неоднородных по горизонтали и нестационарных средах, изложены асимптотические методы, являющиеся обобщением пространственно-временного лучевого метода (метода геометрической оптики). Значительное место в докладе уделено сравнению получаемых аналитических результатов с данными натурных измерений гидрофизических полей в океане [1-3]. Внутренние гравитационные волны в океане изучаются уже достаточно давно, и по данной тематике опубликовано значительное число работ. Тем не менее, в последнее время интерес к ним в какой-то степени угасает, что можно судить по общему количеству публикаций, посвященных данной проблематике. Вместе с тем, сейчас возникают новые направления в исследовании внутренних волн, о которых ранее не говорилось. Во-первых, стало понятным, что в поле внутренних волн могут появляться аномально большие короткоживущие волны-убийцы, природа которых напоминает природу волн-убийц на поверхности моря. Во-вторых, сдвиговые течения во внутренних волнах приводят к большим изгибающим моментам на опоры нефтяных

платформ, что уже приводит к деформации подводных технологических конструкций в ряде районов Мирового океана. Сейчас разрабатывается система мониторинга интенсивных внутренних волн в этом море, в какой-то мере аналогичная системе мониторинга цунами. В третьих, внутренние волны способны вызвать транспорт донных насосов в глубоководных районах, где эффект поверхностных волн на дно минимален. Наконец, классические задачи воздействия внутренних волн на морскую поверхность по-прежнему остаются актуальными [1-3]. На распространение внутренних гравитационных волн в океане существенное влияние оказывают как неоднородности и нестационарность гидрофизических полей, так и изменение рельефа дна. При этом точные аналитические решения волновых задач получаются только в случае, если распределение плотности воды и форма дна описываются достаточно простыми модельными функциями. Когда характеристики среды и границы произвольны, можно построить только численные решения таких задач. Однако последнее не позволяет качественно анализировать характеристики волновых полей, особенно на больших расстояниях, что необходимо для решения, например, проблемы обнаружения внутренних волн дистанционными методами, в том числе с помощью средств аэрокосмической радиолокации. В этом случае описание и анализ волновой динамики можно осуществить на основе асимптотических моделей и аналитических методов их решения, изложенных в докладе. Промышленная деятельность на континентальном шельфе, связанная с добывчей ископаемых является важной причиной исследований внутренних волн, так как их характеристики используются для оценки волнового воздействия на окружающую среду и технологические морские конструкции. Знания о волновой динамике важны для обеспечения безопасности при строительстве и эксплуатации морских платформ на континентальном шельфе, и для этих целей также необходимо контролировать воздействие волн. При строительстве нефтяных платформ необходимо проводить систематическое измерение внутренних волн и течений, поэтому решение фундаментальной проблемы моделирования волновой динамики позволяет избежать дорогостоящих натурных измерений. Особый интерес к моделированию динамики внутренних волн связан с интенсивным освоением Арктики и ее природных богатств. Эти волны пока недостаточно изучены в Арктике, так как двигаются подо льдом и сверху практически не видны, однако доступная информация о движении подводных объектов свидетельствует об их наличии. Внутренние волны достигают льда и

поднимают или опускают его с определенной периодичностью, что доступно наблюдению с помощью средств радиолокационного зондирования. Воздействие волн способно привести к расколу ледового покрытия в Арктике, они способствуют движению айсбергов и распространению различного рода загрязнений. Поэтому исследования особенностей волновой динамики в области Арктического бассейна является важной фундаментальной научной и практической задачей, в том числе для обеспечения безопасности при строительстве и эксплуатации морских платформ [1-3]. Построенные авторами математические модели волновой динамики позволяют описывать поля внутренних волн для реальных параметров океана. Универсальный характер предложенных асимптотических методов моделирования полей внутренних волн позволяет эффективно рассчитывать волновые поля, и, кроме того, качественно анализировать полученные решения. Тем самым открываются широкие возможности анализа волновых картин в целом, что важно и для правильной постановки математических моделей волновой динамики, и для проведения оценок при натурных измерениях волновых полей в морской среде. Особая роль разработанных асимптотических методов обусловлена тем обстоятельством, что параметры природных стратифицированных сред, как правило, известны приближенно, и попытки их точного численного решения по исходным уравнениям гидродинамики с использованием таких параметров могут привести к заметной потере точности получаемых результатов. Помимо фундаментального интереса построенные математические модели представляют значительную ценность для практики, поскольку позволяют решать задачи моделирования волновых гидрофизических полей в широком классе приложений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Булатов В.В., Владимиров Ю.В. Динамика негармонических волновых пакетов в стратифицированных средах. М.: Наука, 2010.
2. Булатов В.В., Владимиров Ю.В. Волновая динамика стратифицированных сред: теория и приложения. Saarbrucken: Palmarium Academic Publishing, 2012.
3. Bulatov V.V., Vladimirov Yu.V. Wave dynamics of stratified mediums. Moscow: Nauka Publishers, 2012.

Вычислительные технологии: подготовка специалистов¹

COMPUTATIONAL TECHNOLOGIES: TRAINING OF SPECIALISTS

Вабищевич П. Н.¹, Васильев В. И.²

¹ИБРАЭ РАН, Москва, Россия;

vabishchevich@gmail.com

²СВФУ им.М.К. Аммосова, Якутск, Россия;

vasvasil@mail.ru

В настоящее время сложились новая методология научных исследований - математического моделирования и вычислительного эксперимента. Сущность этой методологии состоит в замене исходного объекта его математической моделью и исследовании современными вычислительными средствами математических моделей. Методология математического моделирования бурно развивается, охватывая все новые сферы - от разработки больших технических систем и управления ими до анализа сложнейших экономических и социальных процессов.

Перед высшей школой стоит первостепенная задача подготовки и переподготовки специалистов, прежде всего, инженерного-технического и естественно-научного профиля, которые владеют современными вычислительными технологиями.

В СВФУ им.А.К. Аммосова (Центр вычислительных технологий, Институт математики и информатики) разработана программа подготовки магистрантов по направлению *Вычислительные технологии*.

Базовая часть общенационального цикла включает курсы:

- Современные вычислительные технологии;
- Численные методы линейной алгебры;
- Метод конечных элементов.

Вариативная часть представлена обязательными дисциплинами:

- Численные методы решения нестационарных задач;
- Параллельные системы научных вычислений;
- Компьютерные системы подготовки научных публикаций.

¹Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 13-01-00719)

Дисциплины по выбору:

- Численные методы решения обратных задач;
- Численные методы оптимизации.

Базовая часть профессионального цикла состоит из курсов:

- Математические модели в естествознании;
- Геометрические модели и расчетные сетки;
- Программное обеспечение решения систем линейных и нелинейных уравнений.

Обязательные дисциплины вариативной части представлены курсами:

- Практика научных вычислений;
- Студенческий научно-исследовательский семинар.

С учетом тематики проводимых научных исследований в СВФУ предлагаются следующие дисциплины по выбору:

- Математическое моделирование процессов тепло- и массопереноса;
- Математическое моделирование фильтрации.

Современные вычислительные технологии отрабатываются на основе использования метода конечных элементов и свободного программного обеспечения научных исследований.

ЭРМИТОВ ТРЕУГОЛЬНЫЙ ЭЛЕМЕНТ С 13-Ю СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

THE TRIANGULAR HERMITIAN ELEMENT WITH 13 DEGREES OF FREEDOM

Гилева Л. В.¹, Шайдуров В. В.¹

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск,
Россия;

gileva@icm.krasn.ru
lena@icm.krasn.ru

В методе конечных элементов в двумерном случае наибольшее число элементов, обеспечивающих межэлементную непрерывную дифференцируемость приближенного решения, разработаны для треугольников. Из четырехугольных элементов наиболее известен элемент Богнера-Фокса-Шмита. Он широко используется в конформном методе конечных элементов для решения бигармонического уравнения. Но его использование ограничивается геометрическими областями простой структуры, например, областями, составленными из прямоугольников со сторонами, параллельными координатным осям. Это условие не выполняется даже для простых многоугольных областей, где пересечение границы с прямоугольниками порождает треугольные ячейки.

Мы предлагаем использовать эрмитовы треугольные элементы с 13-ю степенями свободы, дополняющие элементы Богнера-Фокса-Шмита в следующем смысле. Они используются только около границы многоугольной области и обеспечивают межэлементную непрерывную дифференцируемость между двумя этими типами конечных элементов. При этом сам рассматриваемый треугольный элемент, вообще говоря, не принадлежит классу C^1 . В целом по многоугольной области Ω будет обеспечена принадлежность интерполянтов и приближенных решений классу $C^1(\bar{\Omega})$ функций, непрерывно дифференцируемых на замыкании области $\bar{\Omega}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ф. Съярле Метод конечных элементов для эллиптических задач. – М.:Мир, 1980.
2. S. Zhang *On the Full $C_1 - Q_k$ Finite Element Spaces on Rectangles and Cuboids*, Adv. Appl. Math., Vol. 2, No. 6 (2010), pp. 701-721.

3. Z.C. Li, N. Yan *New error estimates of bi-cubic Hermite finite element methods for biharmonic equations*, J. Comp. Appl. Math., 142 (2002), pp. 251-285.

**СУПЕРСХОДИМОСТЬ РЕШЕНИЙ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ
ЭЛЕМЕНТОВ С ЭРМИТОВЫМ БАЗИСОМ¹****SUPERCONVERGENCE OF THE HERMITIAN FINITE ELEMENT
METHOD SOLUTIONS****Добронец Б. С.***Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия;*
BDobronets@yandex.ru

Целью данной статьи является представление стратегии увеличения точности численного решения краевых задач с использованием эрмитовых кубических конечных элементов. Это делается путем постобработки численного решения. В работе на примере решения краевой задачи для эллиптического уравнения второго порядка

$$Lu = f, \quad x \in \Omega, \quad (9)$$

$$u(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad (10)$$

где $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$. показана возможность повышения точности решений метода конечных элементов (МКЭ) с эрмитовыми кубическими функциями. Техника основана на решении специальной задачи наименьших квадратов в ячейке сетки Ω'

$$\|s - u^h\|_{L_2(\Omega')}^2 + \alpha \|Ls - f\|_{L_2(\Omega')}^2 \rightarrow \min. \quad (11)$$

Предложенный алгоритм обладает свойством суперсходимости и не требует больших вычислительных затрат.

Известно, что решения МКЭ с полиномиальными базисными функциями степени больше второй обладают в негативных нормах сходимостью более высокой, чем в нормах L_2 . Более того, для ошибки $u - u^h$ и некоторого конечномерного пространства V^h выполнены следующие свойства: $(u - u^h, v) = 0, \forall v \in V^h$. В силу этого свойства, решение s задачи (3) в ячейке сетки Ω' обладает свойством суперсходимости.

Результаты постобработки могут быть использованы для апостериорной оценки погрешности численных решений.

¹Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 11-01-00224-а)

ЛИТЕРАТУРА

1. Азиз X., Сеттари Э. Математическое моделирование пластовых систем. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004.
2. Chen Z., Huan G., Ma Y. Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2006.

**ЭФФЕКТИВНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ЗАДАЧАХ МЕХАНИКИ
СПЛОШНОЙ СРЕДЫ НА ОСНОВЕ РЕГУЛЯРИЗОВАННЫХ
УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ**

**NUMERICAL METHODS ON REGULARIZED SHALLOW WATER
EQUATIONS**

Елизарова Т. Г.¹, Булатов О. В.²

¹ Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН,
Москва, Россия;
telizar@yahoo.com

² Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Физический факультет, Москва, Россия;
dombulatov@mail.ru

В работе [1] был предложен новый численный метод для решения задач в рамках модели мелкой воды. Этот метод основан на осреднении уравнений по малому временному промежутку, в результате которого получаются регуляризованные уравнения мелкой воды. Похожие численные методы применялись к широкому кругу гидродинамических и газодинамических задач [2-4]. Уравнения аппроксимируются с использованием интегро-интерполяционного метода, получившаяся явная по времени схема хорошо себя показала для нестационарных задач, удобна для распараллеливания и адаптирована для неструктурированных сеток. Численный метод на основе регуляризованных уравнений также адаптирован для задач с сухим дном, которые нашли свое применение при расчете набегания волн цунами на берег.

ЛИТЕРАТУРА

1. Elizarova T.G., Bulatov O.V. Regularized shallow water equations and a new method of numerical simulation of the open channel flows // Computers & Fluids. 2011. N 46. p. 206–211
2. Четверушкин Б.Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: Макс Пресс, 2004.
3. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
4. Шеретов Ю.В. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика" 2009.

МЕТОД ИМИТАЦИИ ОТЖИГА ДЛЯ КОМБИНАТОРНОЙ ЗАДАЧИ НАХОЖДЕНИЯ МАКСИМАЛЬНОГО ПОТОКА

SIMULATED ANNEALING FOR COMBINATORIAL MAXIMUM FLOW PROBLEM

Емец О. А.¹, Емец Е. М.¹, Олексийчук Ю. Ф.¹

¹Полтавский университет экономики и торговли, Полтава,
Украина;

yemetsli@mail.ru
olexijchuk@gmail.com

Комбинаторная задача нахождения максимального потока [1-2] является обобщением известной задачи нахождения максимального потока и является NP-трудной [1].

Для решения комбинаторной задачи нахождения максимального потока предложены полиномиальный жадный метод, метод ветвей и границ [2], также она может быть сведена к задаче евклидовой комбинаторной оптимизации на перестановках. Кроме того, для решения рассматриваемой задачи применим метод имитации отжига. Преимуществом этого метода является возможность распараллеливания работы. Возможны, в частности, следующие способы распараллеливания:

- 1) параллельный запуск алгоритма и выбор лучшего результата;
- 2) параллельный запуск с обменом результатов;
- 3) разбиение задачи на подзадачи и решения каждой из них. В этом случае возможна комбинация с методом ветвей и границ.

Актуальным является оптимальный подбор параметров метода имитации отжига для рассматриваемой задачи и выбор метода распараллеливания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Емец Е. М., Олексийчук Ю.Ф. NP-трудность комбинаторной задачи нахождения максимального потока // Таврический вестник информатики и математики. — 2012. — №2. — С. 36-44.
2. Емец О. А., Емец Е. М., Олексийчук Ю.Ф. Комбинаторная задача нахождения максимального потока // Одиннадцатый международный семинар «Дискретная математика и ее приложения», посвященный 80-летию со дня рождения академика О. Б. Лупанова (Москва, 18-23 июня 2012 г.) — С. 243-245.

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ - ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ
INVERSE PROBLEMS - THEORY AND APPLICATIONS

Кабанихин С. И.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск, Россия;
kabanikhin@sscc.ru

Изложены основы теории обратных задач математической физики. Приведена классификация обратных задач по виду дополнительной информации относительно решения соответствующих прямых задач. Рассмотрены обратные задачи об источнике, некорректные задачи Коши, граничные и спектральные обратные задачи, коэффициентные обратные задачи для уравнений эллиптического, параболического и гиперболического типов. Изложены результаты работ сотрудников ИВМиМГ СО РАН и ИМ СО РАН по обратным задачам геофизики, биологии, теплофизики, электродинамики, акустики, фармакокинетике. Приведены примеры применения высокопроизводительных вычислений при решении обратных и некорректных задач.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Сибирское научное издательство, 2009.
2. S.I. Kabanikhin Inverse and Ill-Posed Probems. Theory and Appli

СТРУКТУРНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ
OPTIMIZATION OF THE STRUCTURE OF NEURAL NETWORK
MODELS

Касаткина Е. В.¹, Насридинова Д. Д.¹

¹*Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова, Ижевск, Россия;*
e.v.trushkova@gmail.com
daiana1604@yandex.ru

Предлагается эволюционный метод настройки структуры моделей искусственных многослойных нейронных сетей на основе генетического алгоритма (ГА). Использование ГА обоснованно его высокими адаптивными свойствами.

Особи в ГА представляют собой векторы с данными о количестве нейронов на каждом скрытом слое. В качестве генов выступают количества нейронов на скрытых слоях сети. При этом не применяется дополнительных методов кодирования генетической информации. Функцией приспособленности является время обучения нейронной сети методом обратного распространения ошибки до заданного уровня погрешности. Начальная популяции инициализируется неоднородным образом – каждая особь представляет собой случайную топологию сети. В ходе работы ГА происходит эволюция популяции путем изменения информации, содержащейся в хромосомах за счет вероятностного применения генетических операторов (селекции, скрещивания, инверсии, мутации), адаптированных под решаемую задачу. В этом случае поиск необходимой структуры нейронной сети ведется во всех “направлениях”, как в сторону упрощения имеющихся структур, так и в сторону их усложнения.

Данный алгоритм предполагается применять для построения искусственной нейронной сети, позволяющей прогнозировать динамику инвестиционных процессов в социально-экономических системах на краткосрочную перспективу.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЗАДАЧ ЭКОЛОГИИ РЕГИОНА

Крукиер Л. А.¹, Муратова Г. В.¹, Чикин А. Л.¹, Дацюк В. Н.¹

¹Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия;

krukier@sfedu.ru

muratova@sfedu.ru

Решение задач моделирования экологических процессов в регионах является одной из важнейших проблем контроля уровня среды обитания населения. Задачи экологии, как правило, связаны с движением водной и воздушных сред, переносом в них загрязнений, изменением других гидро- и газо-физических параметров. Математические модели экологии описываются системами нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, которые надо решать в трехмерных областях. Такие задачи, после аппроксимации приводят к необходимости решения систем линейных алгебраических уравнений, содержащих сотни миллионов неизвестных. Эффективное решение задач такого типа могут обеспечить только суперкомпьютерные высокопроизводительные вычислительные системы. Сотрудники ЮФУ в течение нескольких десятилетий занимаются моделированием экологических объектов Ростовской области. Разработаны и программно реализованы на высокопроизводительных кластерах ЮФУ двух- и трехмерные модели гидрофизики Азовского моря, Цимлянского водохранилища, Керченского пролива [1]. Создана, протестирована и реализована на кластере модель движения воздуха в окрестностях объектов ядерной энергетики [2], разработаны специальные алгоритмы, позволяющие эффективно решать задачи данного класса [3] на кластерных системах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Крукиер Л.А., Чикин А.Л., Чикина Л.Г., Шабас И.Н. «Моделирование гидрофизических процессов в водоемах с обширными районами мелководья»- Ростов на Дону, Из-во ЮФУ, 2009, 245 с.
2. Крукиер Л.А., Муратова Г.В., Андреева Е.М. и др. «Математическое моделирование процессов конвективно-диффузационного переноса в задачах экологии»- Ростов на Дону, Из-во ЮФУ, 2008, 299 с.

3. Крукиер Л.А., Чикин А.Л., Чикина Л.Г., Крукиер Б.Л. «Развитие специальных итерационных методов для решения задач моделирования процесса изменения донной поверхности водоемов»- Ростов на Дону, Из-во ЮФУ, 2011, 256 с.

ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПЕРЕНОСА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ОБЛАКО¹

TRANSFERRING HPC TO THE CLOUD

Кудрявцев А. О.¹, Аветисян А. И.¹

¹ Институт системного программирования РАН, Москва, Россия;
alexk@ispras.ru
arut@ispras.ru

Облачные системы позволяют достичь существенной экономии за счет отсутствия необходимости покупки, установки, обслуживания собственного оборудования пользователем. Все больше приложений становятся доступны в облачной концепции, включая даже офисные приложения (например, Office 365).

Одной из тенденций является использование облачных систем для приложений, в том числе, с высоким уровнем параллелизма. В настоящее время так называемые «высокомощные» задачи уже решаются в коммерческих облаках. При этом для решения сильносвязанных параллельных приложений существующие облачные системы неприменимы. Возникающие накладные расходы, связанные с работой системы виртуализации и облачной системы в целом, не позволяют эффективно решать такие задачи.

Целью данной работы является исследование и разработка методов снижения накладных расходов, возникающих при переносе высокопроизводительных приложений в облачную среду, построенную на основе технологий виртуализации.

Основные результаты работы:

1. Разработаны методы, обеспечивающие высокую производительность параллельных приложений в виртуализированной среде. В частности, разработан метод оптимизации производительности ввода-вывода при передаче коммуникационного адаптера в виртуальную машину, основанный на обходе аппаратного устройства виртуализации ввода-вывода IOMMU.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки по государственному контракту от 15.06.2012 г. № 07.524.11.4018 в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы»

2. Разработан метод планирования виртуальных машин в облаке, учитывающий топологию «толстое дерево» коммуникационной среды Infiniband при высокопроизводительных вычислениях. Метод позволяет повысить производительность групп виртуальных машин за счет их размещения в рамках отдельных коммутаторов коммуникационной среды.
3. На основе разработанных методов реализована облачная система для решения высокопроизводительных задач. Достигнута производительность на уровне не менее 90% от производительности вычислительной системы на наборе тестов и ПО для решения задач механики сплошной среды OpenFOAM при использовании не менее 1024 процессорных ядер для вычислений.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.О. Кудрявцев, В.К. Кошелев, А.О. Избышев, И.А. Дудина, Ш.Ф. Курмангалеев, А.И. Аветисян, В.П. Иванников, В.Е. Велихов, Е.А. Рябинкин Разработка и реализация облачной системы для решения высокопроизводительных задач. Труды Института системного программирования РАН, том 24, принято к публикации, Москва, 2013.
2. А.О. Кудрявцев, В.К. Кошелев, А.И. Аветисян Перспективы виртуализации высокопроизводительных систем архитектуры x64. Труды Института системного программирования РАН, том 22, с. 189-209, Москва, 2012.
3. И.А. Дудина, А.О. Кудрявцев Разработка и реализация облачного планировщика, учитывающего топологию коммуникационной среды при высокопроизводительных вычислениях. Труды Института системного программирования РАН, том 24, принято к публикации, Москва, 2013.

**ФОРМУЛА ГРИФФИТСА ДЛЯ ПЛАСТИНЫ ТИМОШЕНКО,
СОДЕРЖАЩЕЙ КРИВОЛИНЕЙНУЮ ТРЕЩИНУ**

Лазарев Н. П.

*Научно-исследовательский институт математики при
Северо-Восточном федеральном университете, Якутск, Россия;
nyurgun@ngs.ru*

Рассматривается задача о равновесии трансверсально-изотропной пластины Тимошенко, содержащей криволинейную трещину. На кривой, описывающей трещину, ставятся граничные условия вида неравенств, которые моделируют взаимное непроникание берегов трещины (условия типа Синьорини). С помощью гладкого отображения моделируется возмущение трещины вдоль заданной кривой. Доказана сходимость решений задач равновесия с возмущенной трещиной к решению задачи равновесия с невозмущенной трещиной в пространстве Соболева. Выведена формула производной функционала энергии пластины по отношению к параметру, описывающему возмущение трещины.

**СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧАХ
ГИДРОМЕХАНИКИ¹**

SUPERCOMPUTER SIMULATIONS IN HYDRODYNAMICS

Мельник О. Э.^{1,2}, Афанасьев А. А.^{1,2}, Вагнер А. В.²

¹НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия;
melnik@imec.msu.ru

afanasyev@imec.msu.ru

²ЗАО Т-Сервисы, Москва, Россия;
Andrey.Vagner@t-services.ru

В докладе будет сделан обзор применения пакетов инженерного анализа для моделирования течений жидкости и газа, а также к многофазной многокомпонентной фильтрации в пористых средах.

В последнее время пакеты инженерного анализа, основанные на методах конечных объемов (ANSYS CFX, STAR-CCM+ и др.) и методах конечных элементов (COMSOL Multiphysics и др.) широко применяются для расчетов течений жидкости и газа как в научных так и в промышленных задачах. Возможность учета реальной трёхмерной геометрии течения, сопряженного теплообмена, многофазности течения и наличия границ раздела двух сред делает эти пакеты мощным инструментом для проведения виртуальных экспериментов. Нами накоплен многолетний опыт использования пакетов инженерного анализа в промышленных задачах. В докладе будут рассмотрены задачи течения в контактном резервуаре озонирования воды, вихревом реакторе для уменьшения жесткости воды, воздействия лазерного импульса на каплю жидкого металла и определения буксировочного сопротивления судов. В решенных задачах течение жидкости осложняется различными факторами, включая многофазные и масштабные эффекты. Это приводит к необходимости построения детализированных расчетных сеток, что в свою очередь выдвигает повышенные требования к вычислительным ресурсам.

Разрабатываемый нами комплекс программ MUFITS (www.mufits.msu.ru) предназначен для расчетов неизотермических течений бинарных смесей в пористых средах. MUFITS основан на решении уравнений

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (контракт № 07.514.11.4157).

многофазной фильтрации (двух законов сохранения массы компонент смеси, уравнения энергии для смеси в целом и двух законов Дарси для жидкой и газовой фаз смеси) в широком диапазоне давлений и температур включая до- и закритические условия. Для этого вычислительный алгоритм формулируется в переменных давления-энталпия [1], а удельный объем и температура вычисляются как производные термодинамического потенциала - энтропии [2], которая сохраняется в виде табличной форме в виде коэффициентов многомерного сплайна. Задача определения состава фаз сводится к нахождению максимума энтропии при заданном давлении, энталпии и доли компонент смеси в условиях термодинамического равновесия.

Комплекс программ MUFITS использовался для расчетов закачки углекислого газа в водонасыщенный пласт с учетом реальных геологических свойств формации Johansen в Северном море. Показано, что в проект захоронения углекислого газа заложено неоптимальное расположение нагнетательной скважины. При ее смещении на 3 км на запад возможно сохранение всего закачанного углекислого газа, в то время как в исходной конфигурации 15 % CO₂ покинет пласт в течении 2600 лет [3].

В результате мощных доисторических извержений образовались кимберлитовые трубки, часто содержащие алмазы. Минералы их слагающие сильно преобразованы (например, оливин превращается в серпентинит). Путем проведения расчетов показано, что наблюдаемый состав пород может быть объяснен охлаждением кимберлитовых трубок водой из вмещающих пород, а не требует, как традиционно считается, выделения воды из магматического расплава.

Приведенные примеры показывают, что использование современной высокопроизводительной техники позволяет решать задачи, решение которых на персональных компьютерах крайне затруднительно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Афанасьев А.А , Мельник О. Э. О математическом моделировании многофазной фильтрации при околокритических условиях. Вестник МГУ, Серия Математика и механика, 2013, № 2.
2. Афанасьев А.А., Мельник О.Э. Об одном методе расчёта теплофизических свойств при до- и закритических условиях. Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013, Т.14

3. Andrey A. Afanasyev Application of the reservoir simulator MUFITS for 3D modelling of CO₂ storage in geological formations. Energy procedia, 2013, in press

**НАИБОЛЕЕ ЗНАЧИМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ 2012 ГОДА,
ПОЛУЧЕННЫЕ НА ФАКУЛЬТЕТЕ ВМК МГУ ИМЕНИ М.В.
ЛОМОНОСОВА**

Моисеев Е.И.¹, Ложкин С.А.¹, Тихомиров В.В.¹

¹Факультет вычислительной математики и кибернетики МГУ им.
М.В.Ломоносова, Москва, Россия;
zedum@cs.msu.su

Ниже приведены некоторые наиболее значимые результаты научно-исследовательской деятельности на факультете ВМК МГУ в рамках направления "Стратегические информационные технологии". Исследованы обратные задачи для дифференциальных уравнений в частных производных (геофизики, электрофизиологии сердца, электроимпедансной томографии и обработки изображений). Предложены и программно реализованы численные методы их решения. Сформулированы принципы функционирования компьютерного симулятора для демонстрации параметров кровотока на пространственном графе системы кровообращения, находящейся в силовом поле тяготения. Разработаны консервативные численные методы расчета переноса веществ, растворенных в несжимаемой жидкости, по произвольному графу эластичных сосудов. Разработан и реализован метод интегральных уравнений для численного решения трехмерных краевых задач в средах с переменной проводимостью. Предложен и исследован регуляризованный биспектральный метод восстановления изображений для задач микроскопии. Проведены численные эксперименты по исследованию плазмообразования в условиях стратосферы и зависимости поджига пропан-воздушной среды от влажности воздуха. Проведено численное моделирование фокусировки ударных и взрывных волн для различных типов фокусирующих объемов в связи с задачами взрывобезопасности различных объектов. Выполнена работа по созданию и практическому применению облачных технологий для обработки и визуализации данных большого объема. Созданы приложения для решения задач вычислительной экологии. На основе метода сингулярных интегральных уравнений разработан алгоритм для расчёта диаграмм направленности отражённого электромагнитного поля от локально неоднородного хорошо проводящего участка границы раздела сред. С помощью метода дискретных источников разработана, обоснована и реализована

математическая модель анализа плазмонных резонансов структур, состоящих из нескольких металлических частиц. Показано, что возможно получить плазмонный резонанс на любой длине волны за счет выбора материала частиц, их формы и взаимного расположения. Проведено численное исследование зарождения колебательного течения в области фюзеляжа сверхзвукового самолета для чисел Маха и углов атаки, соответствующим реальным экспериментам. Осуществлена разработка суперкомпьютерной версии мозаично-скелетонного метода аппроксимации матриц на основе быстрого пересчета скелетонных разложений блоков. На основе математического моделирования проведено исследование устойчивости и динамики вихревых структур в подвижных средах. Разработана параллельная версия программы расчета трехмерных нестационарных течений несжимаемой жидкости вихревым методом. В результате 3D математического моделирования проведено исследование вихревых структур гидродинамического распределения поля скоростей в средах алюминий-электролит в алюминиевом электролизере. Разработаны и исследованы новые математические модели важнейших гетерогенных каталитических реакций. На основе моделирования получены выводы, имеющие большое практическое значение. Разработан и изучен новый гибридный алгоритм для расчёта кинетики каталитических реакций в случае квазиравновесного распределения частиц на поверхности катализатора. В результате математического моделирования электрохимических и электродиффузационных процессов в литий-ионных батареях было обнаружено явление гистерезиса при циклической зарядке и разрядке пористых электродов. Исследована задача распределения ресурсов в двухсекторной экономической модели с производственной функцией Кобба-Дугласа для функционала типа Майера в случае различных коэффициентов амортизации. Разработаны алгоритмы построения единого стабилизирующего регулятора для конечного семейства линейных стационарных объектов с соизмеримыми запаздываниями в управлении и фазовых переменных. Найдена комбинаторная характеристика селективных матриц и развиты методы их построения, оценены параметры сжатия недоопределенных данных. Разработаны новые методы аппроксимации преобразований Фурье-Стилтьеса, с помощью которых получены моментные оценки точности нормальной аппроксимации с уточненной структурой. Найдена новая характеристика сверток гауссовских и пуассоновских распределений, получены критерии сходимости случайных блужданий с конечными дисперсиями к процессам Леви с тяжелохвостыми распределениями. Решены но-

вые конкретные задачи стохастической томографии, теории массового обслуживания, статистики выборок случайного объема, анализа высокочастотных и сильно зашумленных данных. Разработаны алгоритмы структурного обучения по слаборазмеченым массивам данных. Сформулирована и решена задача обучения модели формы для сегментации бинарных изображений. Получены новые комбинаторные оценки вероятности переобучения. Разработан обобщённый метод построения вероятностных моделей тематических коллекций текстовых документов. Разработан эффективный метод для поиска областей нуклеотидных последовательностей с периодичностями. Получено точное значение 8 билинейной сложности умножения в алгебрах обобщенных кватернионов над полем отличной от 2 характеристики. Найдена точная нижняя оценка схемной сложности построения полиномов булевых функций в классе схем с разделенными переменными. Получены асимптотические оценки высокой степени точности для сложности формул стандартного базиса с глубиной альтернирования 3, реализующих булевы функции из классов, связанных с автоматными языками. Для реальной модели рынка электроэнергии и мощности предложен метод расчета оптимальной структуры мощности с учетом постоянных и переменных издержек генераторов. Разработан алгоритм для суперкомпьютера "Ломоносов" с помощью которого впервые в мире решена задача поиска оптимальной стратегии в семифигурных шахматных окончаниях. Разработаны программные инструменты многоуровневого анализа текстов на естественном языке, в том числе - систем извлечения информации из текстов. Разработаны алгоритмы отображения структур параллельных программ на структуры суперкомпьютеров в целях развития программной инфраструктуры доступа к вычислительным системам петафлопсной производительности. Разработаны алгоритмы обнаружения вредоносного исполнимого кода в сетевом трафике, веб-приложениях и средств обнаружения вредоносных веб-сайтов. Построены полиномиальные по времени алгоритмы сводимости в задаче взлома крипtosистемы Мак-Элиса. При проведении исследований активно использовалось оборудование, полученное факультетом по программе развития МГУ (модернизированный суперкомпьютер Blue Gene/P, комплекс подготовки и визуализации материалов научных исследований), а также суперкомпьютер "Ломоносов". На базе коллектива лаборатории вычислительных комплексов образован Центр прикладных исследований компьютерных сетей, который получил статус резидента Сколково.

**ПРИМЕНЕНИЕ РАЗРЫВНОГО МЕТОДА ГАЛЕРКИНА ДЛЯ
РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ НА НЕРЕГУЛЯРНЫХ
СЕТКАХ**

Тишкин В.Ф.

*Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН,
Москва, Россия
v.f.tishkin@mail.ru*

Разрывный метод Галеркина в настоящее время широко применяется для решения широкого круга задач математической физики. К достоинствам метода можно отнести возможность получения алгоритмов заданного порядка точности, в том числе на нерегулярных сетках, и компактность шаблона получающихся алгоритмов. Следует отметить однако, что при расчете разрывных решений уравнений газовой динамики для подавления возникающих колебаний необходимо использовать так называемые лимитеры, которые в ряде случаев могут снизить порядок точности метода. В настоящем докладе на примере модельных задач исследуется влияние различных типов лимитеров на точность получаемых разрывным методом Галеркина численных решений. Для треугольных и тетраэдральных сеток предложен новый тип лимитера, являющийся обобщением моментного лимитера, предложенного в работе Криводоновой для ортогональных сеток. Обсуждаются также альтернативные возможности подавления осцилляций при расчете сильных разрывов

**Высокопроизводительные вычисления и
математические модели в задачах механики
сплошной среды**

Четверушкин Б. Н.

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,
Москва, Россия;
chetver@imamod.ru*

Вычислительные системы сверхвысокой производительности, использующие более 100 TFLOPS на расчет одного варианта, требуют логически простых и в тоже время эффективных алгоритмов. Выполнение этих требований к алгоритмам обязательно к любым системам с экстрамассивным параллелизмом независимо от того используются в них процессы общего назначения (CPU) или графические ускорители (GPGPU). Построение логически простых и одновременно эффективных алгоритмов представляется непростой задачей. Одним из путей построения таких алгоритмов является использование естественных вытекающих из физической постановки ограничений снизу на используемые пространственно-временные масштабы. Построенные на основе этих ограничений математические модели позволяют уже в настоящее время эффективно использовать для расчета одновременно 10^5 - 10^6 ядер процессоров (GPGPU). Приводятся результаты расчетов гидро- и газовой динамики, течений жидкости в пористых средах, использующие в 3D постановке для своей аппроксимации более 10^9 пространственных узлов.

**АППРОКСИМАЦИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА:
КОМБИНАЦИЯ МЕТОДОВ ТРАЕКТОРИЙ И КОНЕЧНЫХ
ЭЛЕМЕНТОВ^{1,2}**

**APPROXIMATION OF NAVIER-STOKES EQUATIONS: THE
COMBINATION OF TRAJECTORY METHOD AND FINITE ELEMENTS**

Шайдуров В.В.

*Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск,
Россия;*

*Beihang University, Beijing, China;
shaidurov04@mail.ru*

В докладе рассматриваются двумерные нестационарные уравнения Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости и вязкого теплопроводного газа. В большинство этих уравнений входит группа конвективных слагаемых, включающая производную по времени и сумму первых производных вида

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(u\rho)}{\partial x} + \frac{\partial(v\rho)}{\partial y}.$$

В последние десятилетия последовательно развивается подход, состоящий в одновременной аппроксимации совокупности этих слагаемых как единой наклонной производной от ρ . Несмотря на десятки статей в этом направлении единого названия для этого подхода еще не сложилось, и он часто называется полу-лагранжевым методом или модифицированным методом характеристик, реже – методом траекторий. Мы изложим его в постановке, обеспечивающей выполнение закона сохранения на дискретном уровне и отсутствие ограничения Куранта-Фридрихса-Леви на соотношение между шагами по времени и пространству. Применение этого подхода сводит решение нестационарной задачи к последовательности систем эллиптических уравнений второго порядка без конвективных слагаемых, что принципиально облегчает аппроксимацию уравнений и процесс решения получаемых дискретных систем алгебраических уравнений.

¹Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Грант № 11-01-00224).

²Work is supported by Thousand Talents Program of China.

Во второй части доклада рассматривается применение метода конечных элементов для аппроксимации получаемых эллиптических систем уравнений. Сначала будет проиллюстрировано использование простых билинейных конечных элементов для решения задач газовой динамики. А затем будут обсуждены перспективы применения этих и более сложных эрмитовых конечных элементов, в том числе, в рамках алгоритмов получения апостериорных оценок и адаптации триангуляций для достижения требуемой точности приближенного решения при минимизации вычислительных затрат.

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ**THE ALGORITHM OF SOLVING 2 DIMENSIONAL
THERMOELASTICITY PROBLEM****Эверстов В. В.**

*Северо-Восточный Федеральный Университет, Институт
математики и информатики, Якутск, Россия;
vovan_evv@mail.ru*

В данной работе рассматривается задача начального распределения тензора напряжений при постоянном температурном поле. Перед тем как решать задачу термоупругости в динамическом температурном поле, необходимо задать первоначальное распределение тензора напряжений.

Распределение тензора напряжений среды определяется следующими уравнениями:

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = m \beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} = m \beta \frac{\partial P}{\partial y} + \rho^* g \end{cases} \quad (12)$$

Условие совместимости деформаций мы возьмем в следующем виде:

$$\Delta(\sigma_x + \sigma_y) = -(1+\nu) \left(\frac{\partial X}{\partial x} + \frac{\partial Y}{\partial y} \right) \quad (13)$$

В данном условии правая часть не равна нулю, т.к. сила тяжести не является единственной объемной силой действующей на среду[3].

Для численного решения вышеописанной задачи применим следующий алгоритм:

1. Первоначально задаваемыми параметроми задачи в данном алгоритме является пористость среды и температура:

$$m = m_0, T = T_0$$

2. Вычисляем давление:

$$P = P_0 + \frac{T_0 - T}{\eta}$$

3. Задаем первоначальное приближение: $\tau_{xy} = 0$ и $\beta_w = 1$

4. Для решения механической задачи строим итерационный процесс:

(а) Находим σ_y из уравнения

$$\frac{\partial^2 \sigma_y}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} \right) + g \frac{\partial \rho^*}{\partial y} - \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y}$$

при этом τ_{xy} берем из предыдущей итерации,

(б) находим σ_x из уравнения

$$\frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial y^2} = \Phi - \frac{\partial}{\partial x} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial y} \right) - \frac{\partial^2 \sigma_y}{\partial x^2} - g \frac{\partial \rho^*}{\partial y} + 2 \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y}$$

(с) находим τ_{xy} текущей итерации из уравнения

$$\frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(m\beta_w \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x \partial y}$$

(д) Находим влагонасыщенность текущей итерации

$$\beta_w = 1 - \frac{\sqrt{\sigma_x^2 - \sigma_x \sigma_y + \sigma_y^2 + 3\tau_{xy}^2} - (1-m)\sigma_{s,sc}}{m\sigma_{s,i}}$$

(е) Итерационный процесс завершается если

$$\text{Max} |\tilde{\tau}_{ij}^{xy} - \tau_{ij}^{xy}| < \varepsilon$$

Таким образом, по завершении итерационного процесса мы получим распределение тензора напряжений и влагонасыщенности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мордовской С.Д. Петров Е.Е. Взаимовлияние механических и температурных полей в рамках модели образования двухфазной зоны/Матем. заметки ЯГУ.-1994г.-Том.1, №1. С.45-56.
2. Соколовский В.В. Теория пластичности. М., «Высш. школа», 1969
3. Тимошенко С.П., Гудьеर Дж. Теория упругости. М.: «Наука», 1975
4. Everstov V.V., Mordovskoy S.D. Two dimensional problem of thermoelasticity/Proceedings of International Conferences on Mathematical Modeling - Yakutsk, 2012 p. 25-31

ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА КАБАРЕ НА ТРЕУГОЛЬНЫЕ СЕТКИ¹
A GENERALIZATION OF THE CABARET ON TRIANGULAR GRIDS

Яковлев П. Г.

Центр вычислительных технологий ИМИ СВФУ, Якутск, Россия;
yakovlevpg@s-vfu.ru

Актуальной проблемой при решении задач газовой динамики являются большие диссипативные и дисперсионные ошибки [1,2]. Одним из часто используемых подходов по улучшению диссипативных и дисперсионных свойств является использование схем повышенного порядка аппроксимации. Основными недостатками данного подхода являются использование расширенного шаблона для аппроксимации исходных уравнений, что приводит к проблемам, как при задании граничных условий, так и при аппроксимации на произвольных расчетных сетках. При этом отличающиеся неявностью схемы высокого порядка оказываются неудобными для распараллеливания. Также, одним из перспективных направлений является класс схем, записанных в дивергентной форме и с использованием коррекции потоков. Здесь одной из самых многообещающих схем является явная схема Кабаре [3,4], обладающая вторым порядком аппроксимации для произвольно неоднородных сеток по пространству и времени. Несмотря на простоту реализации и «небольшой» порядок аппроксимации, она хорошо проявила себя в ряде задач газодинамики и аэроакустики [5-7]. Отличительными чертами схемы Кабаре являются её чрезвычайно компактный вычислительный шаблон, малодисперсионность и бездиссипативность. Для решения задач нелинейного переноса в схеме Кабаре используется малодиссипативный алгоритм нелинейной коррекции потоков на основе принципа максимума для потоковых переменных. Однако, несмотря на все достоинства, применение данной схемы ограничено набором вычислительных шаблонов, обычно состоящим в двумерном случае из четырехугольных и в трехмерном из гексагональных элементов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений. М.: Наука, 1978.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект РФФИ №12-02-31650).

2. Hirsch C. Numerical Computation of Internal and External Flows. The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics. 2nd Edition, John Wiley&Sons, Ltd 2007.
3. Самарский А.А., Головизнин, В.М. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной, Матем. моделирование, 1998, 10:1, 86–100.
4. Самарский А.А., Головизнин, В.М. Некоторые свойства разностной схемы “кабаре”, Матем. моделирование, 1998, 10:1, 101–116.
5. Karabasov, S. A. and Goloviznin, V.M. “A New Efficient High-Resolution Method for Non-Linear problems in Aeroacoustics”, AIAA Journal, 2007, vol. 45, no. 12, pp. 2861 – 2871.
6. Головизнин В.М., Карабасов С.А., Яковлев П.Г. "Прямое моделирование взаимодействия вихревых пар" // Журнал Математическое моделирование т.23 №11 2011г. стр. 21-32.
7. Яковлев П.Г. "Излучение звука плоским локализованным вихрем" // Акустический журнал, том 58, № 4, Июль-Август 2012, стр. 563-568

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Вторая международная конференция

Суперкомпьютерные технологии математического моделирования

Компьютерная верстка *П. А. Попов*
Оформление обложки *П. Е. Захаров*

Подписано в печать 3.07.2013. Формат 60 × 84/16.

Печать цифровая. Печ. л. 7,3. Уч.-изд. л. 9,1. Тираж 100 экз. Заказ №238.

Издательский дом Северо-Восточного федерального университета
677891, г. Якутск, ул. Петровского, 5.

Отпечатано в типографии ИД СВФУ