

На правах рукописи



Храпов Сергей Сергеевич

ЭФФЕКТИВНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ
АЛГОРИТМЫ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛОШНЫХ СРЕД

Специальность 1.2.2 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора технических наук

Волгоград — 2026

Работа выполнена в *Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Волгоградский государственный университет»*.

- Научный консультант:** **Хоперсков Александр Валентинович**
д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедрой информационных систем и компьютерного моделирования ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет»
- Официальные оппоненты:** **Яковлев Николай Геннадьевич**
д-р физ.-мат. наук, доц., вед. науч. сотр. ФГБУН «Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук»
- Елизарова Татьяна Геннадьевна**
д-р физ.-мат. наук, проф., гл. науч. сотр. ФГУ «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»
- Молевич Нонна Евгеньевна**
д-р физ.-мат. наук, проф., гл. науч. сотр. Самарского филиала ФГБУН «Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук»
- Ведущая организация:** ФГАОУ ВО «Южный Федеральный Университет»

Защита состоится 29 июня 2026 в 14:00 часов на заседании диссертационного совета *24.2.283.03* на базе *Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный университет»*, расположенного по адресу: *400062, Волгоград, пр-т Университетский, 100, ауд. 2-05В*.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный университет»* и на официальном сайте <http://www.volsu.ru>

Автореферат разослан «_____» _____ 2026 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д. ф.-м. н., доц.

Янюшкина Н.Н.

Общая характеристика работы

Основные направления и актуальность исследований

Диссертация посвящена разработке методов численного интегрирования уравнений мелкой воды и газодинамики, основанных на лагранжевом и эйлеровом подходах описания сплошной среды. Важной частью работы является создание эффективных параллельных алгоритмов и программных комплексов для моделирования нестационарных течений сплошных сред на гибридных вычислительных системах с графическими сопроцессорами (GPUs), построение численных моделей и исследование на их основе различных многокомпонентных природных, технических и астрофизических систем.

Выделим две основные проблемы, указывающие на актуальность диссертационного исследования:

1. При построении численного решения, описывающего динамику жидкости или газообразной среды в природных, технических и астрофизических системах, возникает проблема устойчивости, сбалансированности и точности численных методов, связанная с наличием в расчетной области крупномасштабных и мелкомасштабных движущихся границ типа «газ – вакуум» или «жидкость – сухое дно». Аналогичные проблемы с устойчивостью и точностью численных методов возникают при моделировании сильных разрывов, таких как ударные и детонационные волны, гидравлические скачки, тангенциальные и контактные разрывы. Учет внешних сил, характерный пространственный масштаб неоднородности которых сравним с размером вычислительной сетки и/или пространственным масштабом неустойчивых волновых структур, также может приводить к снижению точности, сбалансированности и устойчивости численного решения. Релаксационные процессы в неравновесных колебательно-возбужденных и химически активных сплошных средах, приводящие к развитию новых газодинамических неустойчивостей, образованию ударно-волновых и вихревых структур с малыми пространственно-временными масштабами, требуют модификации условий устойчивости численных методов. При моделировании динамики поверхностных вод на реалистичном рельефе местности в областях затопления/осушения, содержащих разрывы и излома профиля дна, известные численные методы интегрирования уравнений мелкой воды могут приводить к некорректным (нефизичным) решениям с отрицательными глубинами и аномально высокой скоростью течения. В неравновесных течениях колебательно-возбужденного и/или химически активного газа, а также в газовых подсистемах астрофизических объектов (аккреционных дисках и струях) важную роль при формировании наблюдаемых ударно-волновых и вихревых структур играют газодинамические неустойчивости. Детальное исследование линейной и нелинейной стадий эволюции этих неустойчивостей при неоднородном распределении параметров течения возможно только с использованием хорошо сбалансированных численных методов, позволяющих создавать равновесные распределения параметров течения без численного шума с неконтролируемой генерацией неустойчивых гармоник. Поэтому разработка эффективных, устойчивых

и хорошо сбалансированных численных схем сквозного счета для моделирования нестационарных течений сплошных сред с перечисленными выше особенностями является важной и актуальной задачей.

2. Для исследования нелинейной динамики нестационарных течений многокомпонентных сплошных сред требуется проведение вычислительных экспериментов с высоким пространственным разрешением и минимальным временем расчетов, что требует использования высокопроизводительных вычислительных систем. Например, в прикладных задачах моделирования аварий на гидротехнических сооружениях и гидрологических режимов крупных водных объектов (морей, озер, водохранилищ, рек и междуречий с обширными поймами) необходимо рассчитывать зоны затопления/осушения на территориях с площадью 10^2 – 10^5 км² с разрешением 1–100 м в течение длительного времени от суток до нескольких месяцев. Для оперативного (часы – дни) получения информации о динамике жидкости на таких территориях требуемая производительность вычислений на операциях с числами двойной точности (FP64) составляет порядка 10 Тфлопс на один вычислительный узел (суперкомпьютер). Такая плотность вычислений достижима только при использовании параллельно выполняющихся программ на гибридных вычислительных системах с графическими процессорами (GPUs). Аналогичная плотность вычислений необходима при исследовании динамики газодинамических неустойчивостей в неравновесных течениях колебательно-возбужденного и/или химически активного газа, детальной структуры ударных и детонационных волн, образующихся на нелинейной стадии развития этих неустойчивостей, когда требуется высокое пространственное разрешение численных моделей ~ 1 –100 мкм при размерах энергетических установок порядка нескольких метров. Такая же проблема возникает в астрофизических приложениях, например, при численном моделировании галактик, когда количество гравитационно взаимодействующих между собой частиц превышает 10^6 . Следовательно, разработка эффективных параллельных алгоритмов для исследования динамики сплошных сред в природных, технических и астрофизических системах на гибридных суперкомпьютерах с GPUs также является важной и актуальной задачей.

Цели и задачи диссертационной работы

Целью диссертационной работы является разработка численных методов и построение эффективных параллельных алгоритмов для моделирования динамики многокомпонентных сплошных сред в природных, технических и астрофизических системах на гибридных суперкомпьютерах с GPUs.

Достижение поставленной цели предусматривает решение следующих задач.

1. Создание нового численного метода интегрирования эволюционных уравнений модели мелкой воды, основанного на совместном использовании лагранжева (SPH — Smoothed Particle Hydrodynamics) и эйлерова (TVD — Total Variation Diminishing) подходов. Проведение анализа вычислительных свойств разработанного комбинированного лагранжево-эйлерова метода CSPH-TVD.
2. Построение математических моделей совместной динамики наносов, поверхностных и грунтовых вод. Разработка параллельных алгоритмов CSPH-TVD ме-

тогда с использованием технологий CUDA (Compute Unified Device Architecture) и OpenMP (Open Multi-Processing) для имитационного моделирования самосогласованной динамики наносов, поверхностных и грунтовых вод на суперкомпьютерах с GPUs. Изучение особенностей динамики нестационарных процессов затопления/подтопления территорий с учетом неоднородностей их характеристик и самосогласованного описания динамики поверхностных и грунтовых вод, транспорта наносов и размыва дамб.

3. Обобщение численного метода CSPH-TVD для интегрирования полных уравнений газодинамики и разработка параллельных алгоритмов (CUDA и OpenMP) для моделирования нестационарных течений газа на суперкомпьютерах с GPUs. Исследование вычислительных свойств обобщенного метода CSPH-TVD и его параллельных реализаций в одномерном и двумерном приближении, сравнение с другими хорошо известными и апробированными методами типа MUSCL (Monotone Upwind Scheme for Conservation Laws).

4. Разработка математических и численных моделей динамики неравновесного колебательно-возбужденного и химически активного газа, дифференциально-вращающихся аккреционных дисков и астрофизических газовых струй, позволяющих изучать различные стадии эволюции газодинамических неустойчивостей при неоднородном квазистационарном распределении параметров течения и их зависимости от плотности и температуры среды. Сравнение численных и аналитических решений режима экспоненциального роста амплитуды неустойчивых мод.

5. Исследование детальной структуры вихревых течений, ударно-волновых импульсов и детонационных волн, образующихся на нелинейной стадии развития газодинамических неустойчивостей (акустической, тепловой и тангенциального разрыва скорости) в неравновесных колебательно-возбужденных и химически активных средах.

6. Построение математических и численных моделей динамики бесстолкновительных и газовых компонентов галактик. Разработка параллельных алгоритмов лагранжевых методов (SPH, N-body) и реализация их в виде комплекса программ для суперкомпьютеров с GPUs. Исследование точности и вычислительной эффективности разработанного программного обеспечения.

7. Разработка алгоритмов и методов суперкомпьютерного моделирования (SPH + N-body) для описания самосогласованной динамики многокомпонентных гравитирующих систем галактик. Численное имитационное моделирование столкновения галактических систем, динамики спиральных галактик и эволюции их спиральной структуры.

8. Построение численных моделей динамики многокомпонентных (газ + звезды + темная материя) галактик, позволяющих объяснить наблюдаемую морфологию/кинематику этих гравитирующих систем и возникающих в них ударно-волновых структур.

Научная новизна.

1. Созданы новые численные методы семейства CSPH-TVD для численного

интегрирования уравнений мелкой воды и полной системы уравнений газодинамики, основанные на комбинированном лагранжево-эйлеровом подходе (SPH + TVD) и обладающие высокой вычислительной эффективностью [A34, A55, A61].

2. Построены новые математические и численные модели динамики: поверхностных вод с учетом придонного трения, транспорта наносов, нелинейной модели инфильтрации и фильтрационных течений грунтовых вод; неравновесного колебательно-возбужденного газа с экспоненциальной моделью релаксации; многокомпонентных (газ + звезды + темная материя) гравитирующих систем в сталкивающихся и спиральных галактиках; аккреционных дисков вокруг компактных релятивистских объектов (черных дыр, нейтронных звезд и белых карликов) и астрофизических струй в активных галактических ядрах и протозвездных системах [A1, A6, A7, A8, A11, A22, A27, A28, A29, A35, A55, A61, A63, A64, A65, A69].

3. Разработаны и реализованы новые параллельные алгоритмы для методов CSPH-TVD, MUSCL, SPH и N-body с прямым методом вычисления гравитационных сил (PPM — Particle-Particle Method), основанные на технологиях параллельных вычислений OpenMP-CUDA и GPUDirect для суперкомпьютеров с GPUs, обладающие высокой производительностью вычислений и эффективностью multi-GPU распараллеливания. Разработан новый иерархический сеточный метод сортировки на основе параллельного каскадного алгоритма нахождения частичных сумм в CUDA блоке, который позволяет повысить производительность вычислений при расчете газодинамических сил в SPH-методе [A1, A5, A6, A9, A36].

4. Созданы три новых комплекса проблемно-ориентированных программ, позволяющих решать широкий круг прикладных и фундаментальных задач гидродинамики, физики неравновесных сред и динамики галактических систем [B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B9, B11].

5. На основе разработанных аналитических методов исследования математической модели неравновесного колебательно-возбужденного и химически активного газа в линейном приближении получены новые оценки инкрементов газодинамических неустойчивостей (акустической, тепловой и тангенциального разрыва скорости) и определены границы устойчивости звуковых, энтропийных и вихревых мод в зависимости от степени неравновесности среды, моделей времени колебательно-поступательной (VT — Vibrational-Translational) релаксации, нагрева и охлаждения [A13, A15].

6. Впервые на основе газодинамического моделирования с использованием численных методов CSPH-TVD/MUSCL исследована динамика звуковых волн, генерируемых источником возмущений, в неравновесной колебательно-возбужденной среде на линейной и нелинейной стадиях развития акустической неустойчивости. Проведена валидация разработанных численных моделей динамики неравновесного газа на основе сравнения результатов вычислительных экспериментов с аналитическими решениями линейной модели. Показано, что на нелинейной стадии развития акустической неустойчивости происходит формирование пилообразной системы слабых ударных волн (УВ), которые в неравновесной колебательно-возбужденной среде оказываются неустойчивыми и распадаются с образованием

системы квазистационарных ударно-волновых импульсов (УВИ) большой интенсивности [A8, A18, A19].

7. Впервые на основе разработанных численных моделей нелинейной динамики неравновесных сред показано, что в колебательно-возбужденном газе с высокой степенью неравновесности из-за взрывного развития тепловой неустойчивости (теплового взрыва) могут квазипериодически образовываться сильные ударные волны с очень малым скачком плотности на фронте, так называемые тепловые ударные волны (ТУВ), которые оказываются нестабильными и быстро эволюционируют к устойчивой квазистационарной системе ударно-волновых импульсов (УВИ). Ударно-волновые импульсы также образуются при дозвуковом натекании неравновесного колебательно-возбужденного газа на твердую стенку. В этом случае сначала образуются нестабильные слабые ударные волны, которые также быстро распадаются с образованием УВИ. Таким образом, предложены (обнаружены) три новых механизма формирования ударно-волновых импульсов. На основе анализа результатов численных экспериментов доказано, что структура ударно-волновых импульсов определяется только параметрами неравновесной среды (в основном степенью неравновесности, моделями времени VT-релаксации и нагрева/охлаждения) и не зависит от параметров и типа начальных возмущений, следовательно, УВИ являются ударно-автоволновыми импульсами (УАВИ). Показано, что в неравновесной среде даже с незначительным химическим энерговыделением УАВИ могут инициировать взрывное развитие тепловой неустойчивости (тепловой взрыв) за фронтом УВ, приводящее к образованию детонационных волн высокой интенсивности. Анализ результатов вычислительных экспериментов и структуры УВ, описываемых неравновесной ударной адиабатой, позволил определить новые критерии существования квазистационарных ударно-волновых структур в колебательно-возбужденном газе. На основе разработанных аналитических и вычислительных методов анализа математических моделей неравновесных газодинамических потоков с тангенциальными разрывами скорости впервые показано, что колебательная неравновесность среды значительно усиливает неустойчивости Кельвина–Гельмгольца и волноводно-резонансных мод сверхзвуковой струи. А на нелинейной стадии эволюции этих неустойчивостей образуются более интенсивные вихревые и ударно-волновые структуры [A4, A7, A14, A8, A18].

8. Соискателем проведено несколько больших серий вычислительных экспериментов самосогласованной эволюции многокомпонентных (газ + звезды + темная материя) галактических систем в различных условиях. Обработка и анализ результатов численного моделирования позволили сделать ряд новых выводов о динамике и морфологии различных галактических систем, согласующихся с данными астрономических наблюдений. При столкновении галактических сфероидальных систем продемонстрированы эффекты существенного обмена газом между двумя сталкивающимися гало галактик и формирования конусов горячего газа из-за сверхзвукового натекания на потенциальную яму с образованием ударных волн. Для нашей галактики Млечный Путь показано образование долгоживущей (~ 3 млрд. лет) спиральной структуры с преобладанием неосесиммет-

ричных трех- и четырех рукавных мод и центрального звездного бара размером около 3 кпк, приводящего к формированию максимума на кривой вращения в окрестности 1 кпк, что хорошо согласуется с данными наблюдений о кинематике и морфологии звездно-газового диска Галактики. Показано, что в карликовых галактиках (dS) с большим содержанием газа в галактическом диске могут формироваться бар и спиральная структура только за счет внутренних процессов, связанных с развитием гравитационной неустойчивости. Впервые получены ограничения на толщину дисков, при которых возможно формирование глобального спирального узора в dS-галактиках. Показано, что при аккреции на галактический звездно-газовый диск ретроградного газа из межгалактического пространства, обладающего противоположным угловым моментом, всего за 1 миллиард лет может сформироваться галактика с противовращающимися звездным и газовым дисками, а часть межгалактического газа образует вокруг этой галактики полярное газовое кольцо. Обнаружено, что при лобовом столкновении галактических дисков с большим содержанием газа могут образовываться газовые мосты с характерной мелкомасштабной волокнистой структурой, наблюдаемые в астрофизических объектах типа Taffy. Впервые продемонстрирована сильная зависимость пространственной структура и термодинамических свойств газа в этих объектах от геометрии столкновения и параметров исходных галактик. Предложены новые возможные механизмы формирования компактных и ультракомпактных галактик (сЕ/UCD) в окрестности массивной спиральной галактикой типа Млечного Пути при многократном прохождении спутника (карликовой дисковой галактики) через диск этой массивной галактики [A6, A11, A12, A20, A28, A27, A29].

Научная и практическая значимость исследования связана с разработкой новых математических методов и численных параллельных алгоритмов для решения уравнений, описывающих динамику сплошной среды в различных приближениях. Созданное программное обеспечение позволяет решать разнообразные задачи моделирования нестационарных течений сплошных сред в различных постановках.

Результаты диссертационного исследования, в частности, «Программный комплекс для моделирования самосогласованной динамики поверхностных вод и наносов на основе CSPH-TVD метода» [B7, B9, B12, B17, B19, B20, B21] успешно внедрен в коммерческих компаниях России (ООО «РИЦ «ТЕЛЕНОВО», АО «Волговодпроект», ООО «Сергиевское карьерное управление») и Казахстана (ТОО «GEOSAT») при проведении научно-технической экспертизы гидротехнических проектов, связанных с моделированием зон затопления/подтопления территорий в период сезонных паводков, размыва дамб хвостохранилищ и русловых деформаций при добыче речного песка.

Полученные результаты использовались при выполнении НИР и НИОКР в рамках грантов, в которых соискатель являлся **руководителем**: РНФ 23-21-00401 «Математическое моделирование газодинамических неустойчивостей в акустически активных средах», РФФИ 18-47-340007 «Суперкомпьютерное гидродинамическое моделирование русловых процессов, размыва и послед-

ствий прорыва заградительных дамб на водных объектах Волгоградской области», РФФИ 16-07-01037 «Суперкомпьютерное моделирование динамики жидкости и газа в природных и технических системах на основе лагранжево-эйлерова CSPH-TVD метода высокого порядка точности», РФФИ 15-45-02655 «Прогнозирование гидрологического режима территории на основе нестационарных моделей динамики поверхностных вод», РФФИ 13-07-97056 «Геоинформационный портал для поддержки научных исследований в области экологии и рационального природопользования», РФФИ 10-07-97017 «Геоинформационная система для математического моделирования нелинейной динамики поверхностных вод суши», ФЦП «Старт» Проект № 11-3-Н1.4-0566 «Разработка программного комплекса для моделирования нелинейной динамики жидкости и газа».

Соискатель был официальным исполнителем в грантах РНФ 23-71-00016 и РФФИ 18-47-340003, 16-02-00649, 15-47-02642, 15-02-06204, 14-08-97044, 13-0197062, 11-07-97025, 09-02-97021.

Диссертационная работа выполнялась в рамках госзаданий Министерства науки и высшего образования РФ: «Создание программного обеспечения для моделирования физических сред и природных явлений» (проект N 2.852.2017/4.6, 2017–2019 гг.), «Программное обеспечение, суперкомпьютерные вычисления, математическое и компьютерное моделирование» (N 0633-2020-0003, 2020–2022 гг.), «Разработка методов моделирования сложных систем на основе интеграции прямых вычислительных экспериментов и интеллектуального анализа данных» (FZUU-2026-0005, 2026–2028 гг.).

Основные результаты получены на оборудовании ЦКП «Суперкомпьютерный центр коллективного пользования ВолГУ», часть расчетов проводилась с использованием ресурсов ЦКП Сверхвысокопроизводительные вычислительные ресурсы МГУ им. М.В.Ломоносова (РНФ 23-71-00016, RFMEFI62117X0011).

Рассмотренные в диссертационной работе и публикациях вопросы имеют в настоящее время большое практическое значение, поскольку эффективные численные методы и высокопроизводительные параллельные компьютерные алгоритмы имитационного моделирования гидро- и газодинамических течений в природных, технических и астрофизических системах необходимы для решения широкого круга практических задач, связанных, например, с расчетом границ зон затопления и подтопления местности поверхностными и грунтовыми водами, нелинейной динамикой газодинамических неустойчивостей и ударно-волновых структур в неравновесных колебательно-возбужденных и химически активных средах, эволюцией многокомпонентных галактических и аккреционно-струйных систем.

Методология исследования включает теорию гидро- и газодинамики, общие принципы математического моделирования, методы решения уравнений гиперболического типа, эйлеровы и лагранжевы методы численного интегрирования дифференциальных уравнений в частных производных, методы разработки алгоритмов, структурное и объектно-ориентированное программирование, стандарты и технологии параллельного программирования (OpenMP, CUDA C/C++, GPUDirect и HostCopy), геоинформационные технологии для обработки и визуа-

лизации пространственных данных.

Достоверность результатов и выводов диссертационной работы определяется применением строгих математических моделей и хорошо апробированных численных методов/алгоритмов, сопоставлением результатов с полученными ранее, валидацией численных методов на основе данных натурального эксперимента или анализа математических моделей, сравнением численных и аналитических решений в некоторых предельных случаях, а также четким физическим смыслом полученных результатов и согласованностью их с современными представлениями о предмете исследования. Основные результаты, выносимые на защиту, опубликованы в рецензируемых высокорейтинговых журналах, входящих в Перечень ВАК, Белый список и/или индексируемых в международных базах Web of Science (WOS), Scopus, MathSciNet в том числе в изданиях, имеющих квартили Q1/Q2, уровни У1/У2 и категории К1/К2, докладывались на научных семинарах и конференциях российского и международного уровней.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на: Всероссийской научной конференции с международным участием «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2025)» (Москва, 2025); XI Международной конференции «Суперкомпьютерные дни в России 2025» (Москва, 2025); 8-м семинаре по численному моделированию в МГД и физике плазмы: методы, инструменты и результаты (Москва, 2025); Международной научной конференции «Кибер-физические системы: проектирование и моделирование» (CyberPhy-2024) (Казань, 2024); Всероссийской астрономической конференции ВАК-2024 (САО РАН, Нижний Архыз, 2024); 6th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (Липецк, 2024); International conference «Active galaxies at different scales and wavelengths» (САО РАН, Нижний Архыз, 2024); 11 Международном симпозиуме «Неравновесные процессы, плазма, горение и атмосферные явления», NEPCAP- 2024 (Сочи, Адлер, 2024); Всероссийских научных конференциях «Современная звездная астрономия 2021, 2023» (Москва, 2021, Волгоград, 2023); 5th International Conference «Creativity in Intelligent Technologies and Data Science (CIT&DS) 2023» (Волгоград, 2023) Международных научных конференциях Физика.СПб 2021, 2023, 2025 (Санкт-Петербург); IV International conference «Supercomputer Technologies of Mathematical Modelling» (SCTeMM'19)» (Moscow, 2019); Конференции, посвященной 100-летию со дня рождения А.Г. Матвеева (ИНАСАН, Москва, 2018); International Conference «Applied Mathematics, Computational Science and Mechanics: Current Problems» (Воронеж, 2017–2018 гг.); Научной конференции в рамках Летней Суперкомпьютерной Академии (Москва, 2017); Конференции «Современная звездная астрономия 2017» (Екатеринбург, 2017); XII Всероссийской школе-конференции молодых ученых и специалистов «Управление большими системами» (Волгоград, 2015); Научной конференции «Russian Supercomputing Days» (Moscow, 2016–2019 гг.); XII Межрегиональной научно-практической конференции «Проблемы устойчивого развития и эколого-экономической безопасности регионов» (Волжский, 2016); Национальном Суперкомпьютерном Форуме (Переславль-Залесский, 2013–2015 гг.); Интер-

Карто / ИнтерГИС 20 «Устойчивое развитие территорий: картографо-геоинформационное обеспечение» (Белгород, 2014); Международных научных конференциях ИнтерКарто/ИнтерГИС 15–18 «Устойчивое развитие территорий: теория ГИС и практический опыт» (Пермь, 2009, Ростов-на-Дону, 2010, Барнаул, 2011, Сен-Дье-де-Вож, Франция, 2012); Международной научной конференции «Математические методы в технике и технологиях» (Волгоград, 2012); Conference «Dynamics and evolution of disc galaxies» (Pushchino, Russia, 2010); Научно-практической конференции «Актуальные проблемы современной физики и математики» (Элиста, 2010); Международная конференция «Progress in the Study of Astrophysical Disks: Collective and Stochastic Phenomena and Computational Tools» (Волгоград, 2003); IAU Colloquium 184: AGN Surveys (Бюракан, Армения, 2001).

Результаты обсуждались на научных семинарах (ВолГУ, ВолГТУ, КалмГУ, САО РАН, ИПТМУ РАН, МГУ, ЮФУ).

Публикации. Список основных публикаций по теме диссертации содержит 95 наименований, включая 74 научные работы и 21 РИД (результаты интеллектуальной деятельности). Основные результаты диссертации опубликованы в 74 научных работах (из них 9 без соавторов), входящих в Белый список, перечень ВАК и индексируемых в международных базах данных WoS/Scopus/MathSciNet, в том числе 6 статей в изданиях с квартилем Q1, 7 статей — Q2, 2 статьи в журналах уровня У1, 5 статей — У2 и 22 статьи из перечня ВАК, включая 4 статьи в журналах категории К1. Имеется 21 свидетельство о регистрации программ для ЭВМ и баз данных, из них 10 без соавторов.

Соответствие паспорту специальности. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: 2) разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий; 3) реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента; 4) разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели; 5) разработка новых математических методов и алгоритмов валидации математических моделей объектов на основе данных натурального эксперимента или на основе анализа математических моделей; 6) разработка систем компьютерного и имитационного моделирования, алгоритмов и методов имитационного моделирования на основе анализа математических моделей; 7) качественные или аналитические методы исследования математических моделей; 8) комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента; 9) постановка и проведение численных экспериментов, статистический анализ их результатов, в том числе с применением современных компьютерных технологий.

Личный вклад автора. Все основные результаты диссертационной работы получены лично автором. В частности, создан новый численный метод CSPH-TVD для интегрирования уравнений мелкой воды и полной системы уравнений

газодинамики, а также проведено тестирование данного метода. Разработаны и реализованы новые параллельные алгоритмы для численных методов CSPH-TVD/MUSCL, SPH и N-body/PPM, основанные на технологиях параллельных вычислений OpenMP, CUDA, GPUDirect и HostCopy. На основе параллельных алгоритмов CSPH-TVD метода для уравнений мелкой воды построены численные модели самосогласованной динамики наносов, поверхностных и грунтовых вод. На основе параллельных алгоритмов методов CSPH-TVD/MUSCL для уравнений газодинамики построена численная модель неравновесного колебательно-возбужденного и химически активного газа. На основе аналитических и численных моделей детально исследованы динамика газодинамических неустойчивостей и ударно-волновых структур в неравновесных колебательно-возбужденных и химически активных средах. Предложены подходы повышения точности численных алгоритмов сеточных методов семейства TVD при исследовании динамики неустойчивых мод в астрофизических системах (аккреционные диски вокруг компактных объектов, струи из активных галактических ядер) с пространственно неоднородными распределениями параметров течения. На основе параллельных алгоритмов SPH и N-body/PPM методов построены численные модели самосогласованной динамики многокомпонентных гравитирующих систем галактик. В каждой главе подробно описан личный вклад соискателя.

Соискатель является единственным автором 19 научных статей и РИД [A7, A8, A13, A14, A15, A18, A22, A26, A31, B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B11]. В 27 научных работах и РИД [A1, A2, A4, A5, A9, A12, A16, A19, A20, A21, A25, A27, A32, A34, A35, A40, A41, A43, A52, A55, A61, A66, A67, A68, A72, A73, B17] соискатель является либо единственным автором, либо только в соавторстве с научным консультантом. Все эти работы являются ключевыми публикациями для данной диссертации.

Положения, выносимые на защиту:

1. Разработан и теоретически обоснован новый метод численного интегрирования уравнений мелкой воды на базе комбинированного лагранжево-эйлерова подхода CSPH-TVD. Метод обеспечивает инвариантность к числам Фруда и корректное описание динамики фронта на подвижных границах «жидкость - сухое дно» в условиях сложного рельефа. Доказано, что алгоритм обладает свойством строгой консервативности, устойчивостью, вторым порядком точности и сбалансированностью при расчете разрывных решений (гидравлических скачков и волн разрежения) на негладких профилях дна.

2. Создан и верифицирован параллельный OpenMP-CUDA алгоритм метода CSPH-TVD, адаптированный для работы в гетерогенных средах с multi-GPU архитектурой. Использование технологий прямого доступа к памяти (GPUDirect) обеспечило высокую вычислительную эффективность и масштабируемость алгоритма. Это позволило реализовать математическое моделирование самосогласованных гидрологических процессов на обширных территориях с высоким пространственным разрешением в режиме времени, близком к реальному.

3. Разработан и внедрен программный комплекс «EcoGIS-Simulation», реализующий высокопроизводительный параллельный алгоритм CSPH-TVD. Созданный инструментарий обеспечивает эффективное решение широкого класса прикладных задач: от моделирования русловой динамики и эрозионных процессов до прогнозирования катастрофических затоплений (паводков, прорывов гидротехнических сооружений, волн цунами). «EcoGIS-Simulation» позволяет проводить комплексную экспертизу гидротехнических проектов и предиктивное моделирование режимов водных объектов на обширных территориях.

4. Обоснована применимость и эффективность комбинированного лагранжево-эйлерова подхода CSPH-TVD, адаптированного для численного интегрирования уравнений газодинамики в неоднородных внешних полях. Разработанный метод позволяет с высоким разрешением моделировать течения с произвольными числами Маха, включая динамику границ между средой и вакуумом, взаимодействия ударных волн, волн разрежения и тангенциальных разрывов. Доказано, что программная реализация комплекса на базе гибридных OpenMP-CUDA алгоритмов обеспечивает второй порядок точности на гладких решениях, строгую консервативность и высокую вычислительную эффективность на multi-GPU платформах.

5. Разработанная модификация численного метода CSPH-TVD и его параллельная реализация для архитектур multi-GPU обеспечивает высокую эффективность моделирования динамики неравновесных колебательно-возбужденных и химически активных сред. Достоверность метода подтверждена соответствием результатов численного моделирования аналитическим решениям линейного анализа устойчивости. Установлено, что на нелинейной стадии развития акустических, вихревых и энтропийных возмущений в неравновесном газе формируется квазистационарная система ударно-автоволновых импульсов (УАВИ). Наличие УАВИ приводит к интенсификации неустойчивости тангенциальных разрывов, а в химически активных средах выступает механизмом инициирования детонационных волн и управляемого теплового взрыва.

6. Параллельные OpenMP-CUDA-алгоритмы методов численного моделирования самосогласованной динамики многокомпонентных галактических систем (газ + звезды + темная материя), реализованные в программном комплексе «SPH + N-body», обладают высокой производительностью и масштабируемостью вычислений на суперкомпьютерах с несколькими GPUs. Прямой метод вычисления гравитационных сил в коде «SPH + N-body» обеспечивает высокую точность выполнения физических законов сохранения при использовании чисел с двойной точностью (FP64) на гетерогенных суперкомпьютерных системах с multi-GPU архитектурой, что является необходимым условием адекватного моделирования долгоживущих галактических структур на космологических масштабах времени.

7. На основе результатов численных экспериментов проведена верификация разработанных моделей динамики галактик, подтвердившая их способность обеспечивать высокое количественное соответствие расчетных характеристик (геометрии волнового узора, полей скоростей компонентов, дисперсий скоростей звезд

и профилей плотности) данным астрономических наблюдений Млечного Пути и карликовых галактик dS-типа. Установлено, что формирование волновых структур (центрального бара и спиральных рукавов) определяется развитием гравитационной неустойчивости многокомпонентного диска и критически зависит от соотношения масс, толщины и профилей вращения его составляющих.

8. На основе имитационного моделирования выявлены динамические механизмы формирования взаимодействующих внегалактических систем со сложной многокомпонентной структурой. Доказано, что варьирование начальных параметров взаимодействия (аккреция, столкновения, приливные разрушения) в рамках созданных моделей позволяет количественно описать генезис противовращающихся звездно-газовых дисков, газовых полярных колец, волокнистых газовых мостов (типа Taffy) и ультракомпактных карликовых галактик (UCD), подтверждая универсальность разработанного вычислительного подхода.

Структура и краткое содержание диссертации. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 487 страниц машинописного текста. Список литературы содержит 642 источника.

Первая глава посвящена описанию нового численного метода, разработанного и протестированного автором диссертации. Оригинальный численный метод предназначен для моделирования нестационарных течений мелкой воды с произвольными числами Фруда на неоднородном рельефе местности при наличии в расчетной области нестационарных границ между жидкостью и сухим дном. Метод основан на комбинированном лагранжево-эйлеровом подходе (SPH + TVD) и сокращенно назван соискателем CSPH-TVD.

В § 1.1 представлена математическая модель динамики поверхностных вод, основанная на уравнениях модели мелкой воды (уравнениях Сен-Венана), и рассмотрены факторы определяющие динамику течения жидкости на реалистичном рельефе местности. Подробное описание численного алгоритма CSPH-TVD метода приведено в § 1.2 [A55, A61]. Основная идея этого метода заключается в объединении сильных сторон лагранжевого и эйлерова подходов при построении устойчивого, хорошо сбалансированного и эффективного численного алгоритма моделирования динамики поверхностных вод на сложном неоднородном рельефе реальной местности, цифровая модель рельефа (ЦМР) которой содержит изломы и разрывы. В численной схеме CSPH-TVD расчетная область покрывается фиксированной пространственной сеткой, в центрах ячеек которой размещаются подвижные «жидкие частицы» (частицы). Основными характеристиками частиц являются глубина $H_{\mathbf{i}}$, скорость $\mathbf{v}_{\mathbf{i}}$ и положение (радиус-вектор) $\mathbf{r}_{\mathbf{i}}$ ($\mathbf{i} = (i, j)$ — векторный пространственный индекс).

На первом (лагранжевом) этапе динамика «жидких частиц» описывается уравнениями мелкой воды в лагранжевой форме

$$\frac{d\mathbf{U}_{\mathbf{i}}}{dt} = \Phi_{\mathbf{i}}, \quad \mathbf{U}_{\mathbf{i}} = \begin{pmatrix} H_{\mathbf{i}} \\ (H\mathbf{v})_{\mathbf{i}} \end{pmatrix}, \quad \Phi_{\mathbf{i}} = \begin{pmatrix} \sigma_{\mathbf{i}} \\ -gH_{\mathbf{i}}[\nabla_{\perp}(H + b)]_{\mathbf{i}} + H_{\mathbf{i}}\mathbf{f}_{\mathbf{i}} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

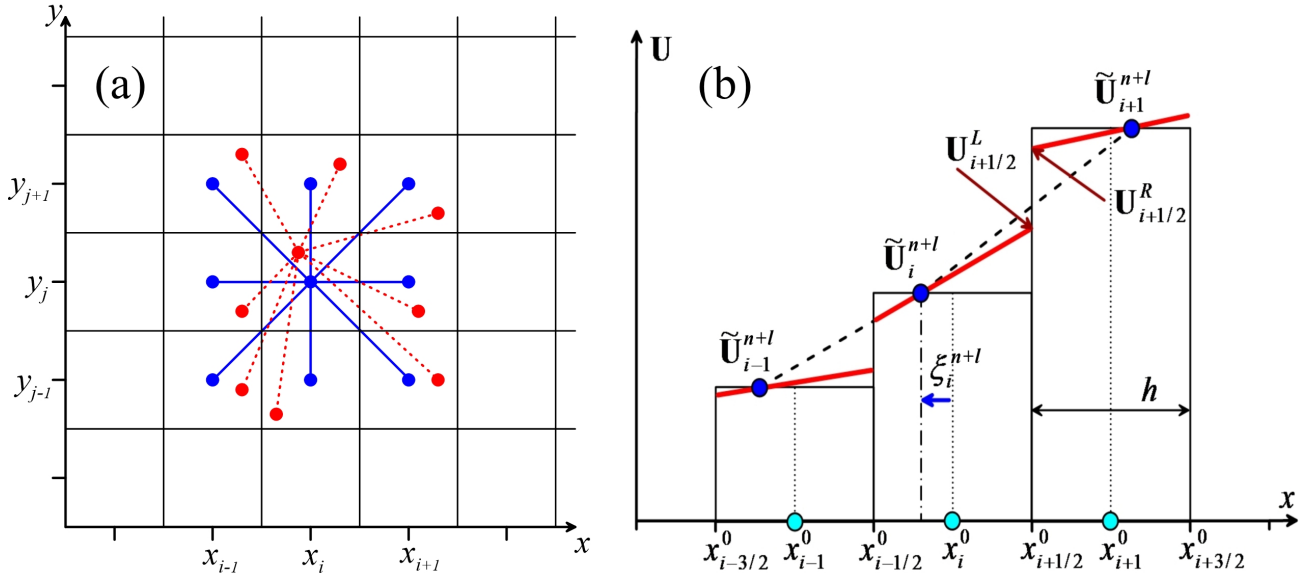


Рис. 1. (a) Пространственный шаблон аппроксимации типа «звезда» на лагранжевом этапе CSPH-TVD метода. (b) Кусочно-линейная пространственная реконструкция сеточных функций на эйлеровом этапе CSPH-TVD метода.

где g — ускорение свободного падения, ∇_{\perp} — дифференциальный оператор набла в плоскости (x, y) , $b(x, y)$ — рельеф дна, σ_i — функция источников и стоков воды. Траектория движения частиц $\mathbf{r}_i(t)$ внутри ячеек определяется из уравнения $d\mathbf{r}_i/dt = \mathbf{v}_i$. После аппроксимации пространственных производных в (1) с использованием SPH-подхода получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, численное решение которой на временном промежутке $[t_n, t_{n+1}]$ (n — индекс временного слоя) строится на основе алгоритма предиктор–корректор второго порядка точности. На данном этапе могут использоваться различные пространственные шаблоны аппроксимации и сглаживающие SPH-ядра (кубический сплайн Монагана или Мюллера), выбор которых определяется достаточным условием хорошей сбалансированности CSPH-TVD метода и зависит от решаемой задачи. На рис. 1 а представлен пример шаблона типа «звезда» в два последовательных момента времени t_n (сплошные синие линии) и t_{n+1} (штриховые красные линии).

На втором (эйлеровом) этапе CSPH-TVD метода вычисляются потоки массы и импульса через границы ячеек фиксированной сетки в результате лагранжева перемещения «жидких частиц». Соответствующие изменения характеристик частиц пропорциональны разности потоков на границах эйлеровых ячеек, определяющих приток/отток массы и импульса внутри ячейки. Для расчета этих потоков применяются TVD-подход и приближенное решение задачи Римана. В конце эйлерова этапа частицы возвращаются обратно в центры ячеек (\mathbf{r}_i^0) и цикл по времени продолжается, а итоговые значения $\mathbf{U}_i(t_{n+1})$ характеристик частиц, совпадающие со средними значениями сеточных функций, имеют вид

$$\mathbf{U}_i(t_{n+1}) = \tilde{\mathbf{U}}_i(t_{n+1}) - \frac{\tau_n}{h} (\bar{\mathbf{F}}_{i+1/2,j} - \bar{\mathbf{F}}_{i-1/2,j} + \bar{\mathbf{G}}_{i,j+1/2} - \bar{\mathbf{G}}_{i,j-1/2}), \quad (2)$$

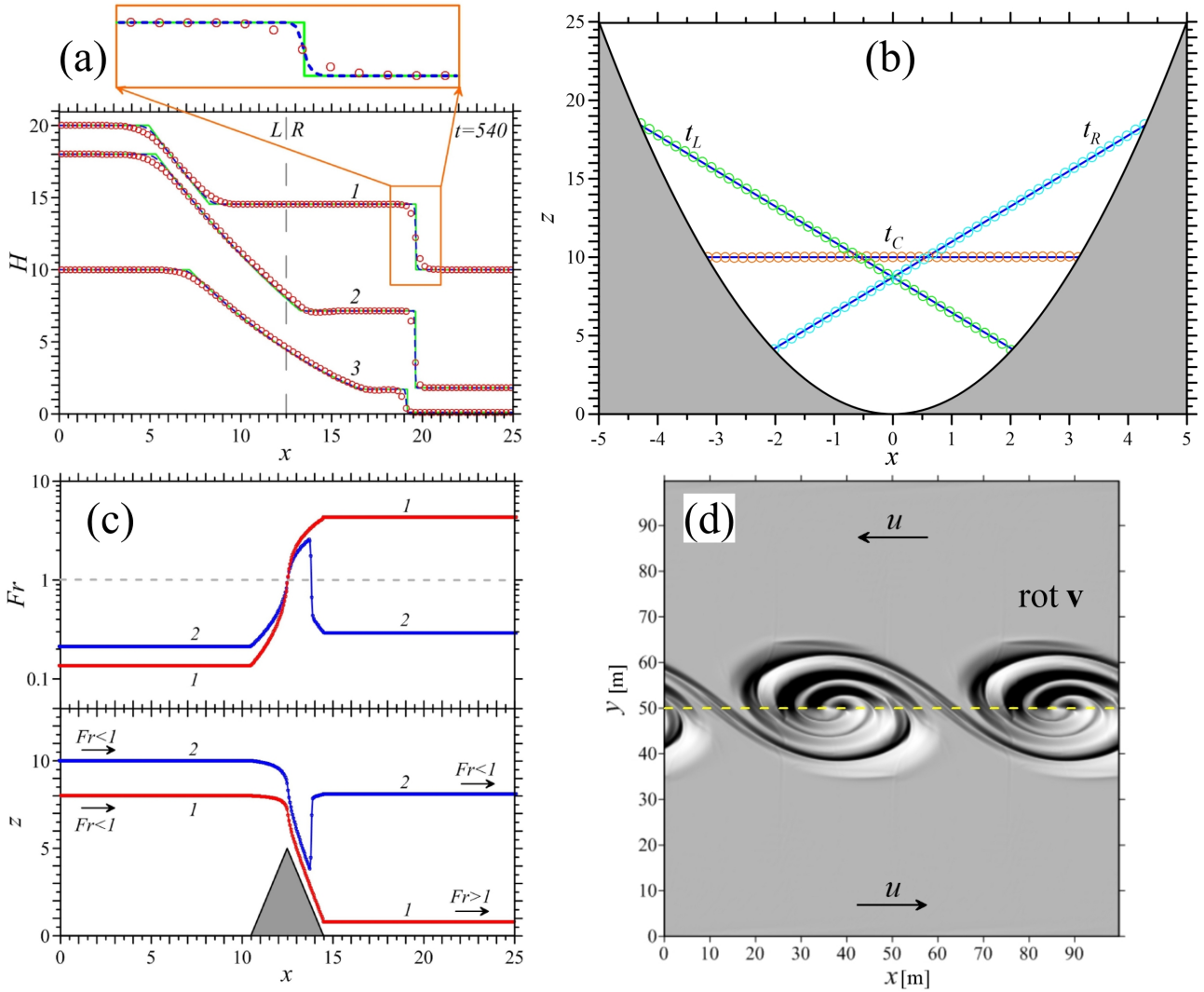


Рис. 2. (а) Распад произвольного скачка глубины. (б) Колебания уровня жидкости на параболическом дне. (с) Транскритические режимы (с различными числами Фруда Fr) обтекания треугольного препятствия в модели мелкой воды [A61]. (д) Вихревое течения мелкой воды при развитии неустойчивости Кельвина–Гельмгольца на тангенциальном разрыве скорости.

где h и τ_n — пространственный и временной шаг, соответственно, $\bar{\mathbf{F}}_{i\pm 1/2,j}$ и $\bar{\mathbf{G}}_{i,j\pm 1/2}$ — средние на временном промежутке $[t_n, t_{n+1}]$ значения конвективных потоков массы и импульса на соответствующих границах ячеек пространственной сетки, величина $\tilde{\mathbf{U}}_i(t_{n+1})$ рассчитывается на лагранжевом этапе и определяет значения характеристик частиц в точках, смещенных относительно центров ячеек пространственной сетки на величину $\Delta \mathbf{r}_i(t_{n+1}) = \mathbf{r}_i(t_{n+1}) - \mathbf{r}_i^0$. Второй порядок точности в (2) достигается за счет применения кусочно-линейной реконструкции сеточных функций при нахождении потоков, как показано на рис. 1 б.

С использованием разработанного автором программного обеспечения [B12, B17] в § 1.3 для оценки точности, устойчивости, сбалансированности и консервативности метода CSPH-TVD проведено тестирование на ряде классических 1D и 2D-задач модели мелкой воды: распад столба жидкости на влажном и сухом дне с образованием гидравлических скачков и волн разряжения; стационарные докритические, сверхкритические и переходные течения при наличии на плоском

дне препятствий в виде ступеньки и треугольного профиля; колебания линейного уровня жидкости на параболическом дне с сохранением исходного профиля во время движения; течение типа «водопад» в окрестности разрывов профиля дна; накат волн типа цунами на наклонный берег с изломом дна; динамика неустойчивых сдвиговых течений; распад цилиндрического столба жидкости большой глубины на сложном рельефе, содержащем разрывы и изломы уровня дна. Некоторые из этих тестов приведены на рис. 2. На основе результатов тестовых расчетов сделан вывод о том, что численный метод CSPH-TVD имеет второй порядок точности, является хорошо сбалансированным, консервативным и устойчивым при моделировании стационарных и нестационарных течений с произвольными числами Фруда на сложном рельефе, содержащем резкие скачки и изломы дна. Показано, что численная схема CSPH-TVD способна хорошо описывать контактные разрывы ($\eta^L = \eta^R$, $H^L \neq H^R$) и сдвиговые неустойчивые течения.

Вторая глава посвящена разработке параллельных алгоритмов и апробации программного обеспечения для численного моделирования самосогласованной динамики наносов, поверхностных и грунтовых вод на основе оригинального лагранжево-эйлерова метода CSPH-TVD. В § 2.1 описываются особенности параллельной реализации CUDA-алгоритма CSPH-TVD метода и структура расчетного модуля программного комплекса «EcoGIS-Simulation» для моделирования динамики поверхностных вод, а также приведена общая структура программного комплекса «EcoGIS-Simulation» [A47, A55, A61, B12, B13, B14, B15, B17, B18, B19, B20, B21]. Разработанные параллельные алгоритмы основаны на технологиях параллельных вычислений OpenMP-CUDA и GPUDirect/HostCopy для гибридных вычислительных систем (суперкомпьютеров) с несколькими графическими сопроцессорами (GPUs), взаимодействующими между собой по интерфейсу PCIe/NVLink. Для оценки эффективности распараллеливания проведено тестирование CUDA-алгоритма CSPH-TVD метода на различных конфигурациях вычислительных систем CPU + GPU Nvidia Tesla (K20/40/80, P100, V100) (рис. 3).

Созданный расчетный модуль программного комплекса «EcoGIS-Simulation», позволяющий проводить быстрое имитационное моделирование динамики поверхностных вод на обширных территориях размером в сотни километров с высоким пространственным разрешением до нескольких метров, использовался в § 2.2 для численного моделирования сезонных паводков на реках с регулируемым и нерегулируемым стоками, катастрофического затопления территорий в результате ливневых осадков, распространения океанического цунами и гидрологического режима пойменных территорий в период весеннего паводка (рис. 4 a,b) [A38, A46, A49, A50, A51, A53, A54, A57, A58, A59, A60].

В § 2.3 построена математическая модель самосогласованной динамики поверхностных вод и наносов, позволяющая рассчитывать гидродинамические течения в водоемах произвольной геометрии и их окрестностях с учетом пространственной неоднородности параметров подстилающей поверхности (донных отложений и грунтов), различные типы течений в руслах рек и при размыве грунта ограждающих дамб, включая как продольный перенос наносов, так и попереч-

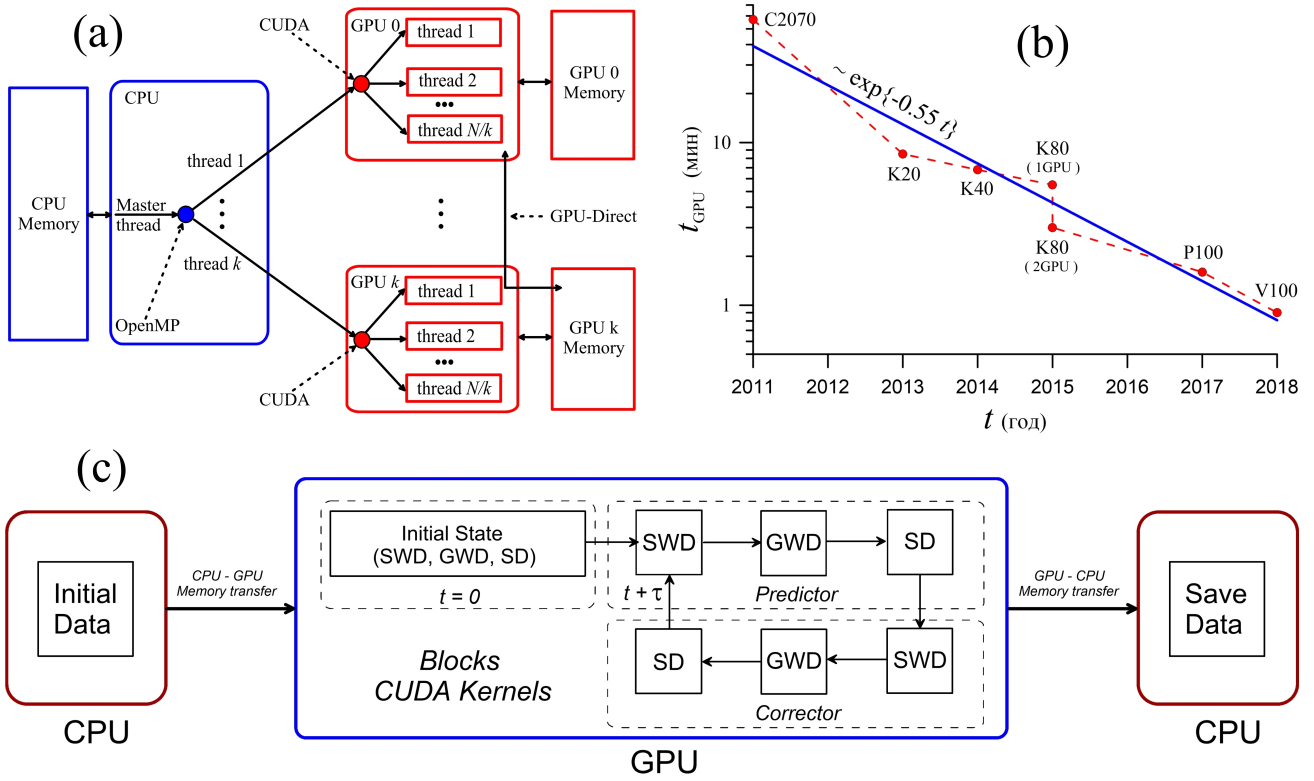


Рис. 3. (а) Двухуровневая схема распараллеливания OpenMP–CUDA. (б) Зависимость времени выполнения параллельного CUDA-алгоритма от даты выхода соответствующего типа GPU. (с) Поточковая диаграмма параллельного CUDA-алгоритма, где «SD», «SWD», «GWD» — динамика наносов, поверхностных и грунтовых вод, соответственно [A31, A32, A40].

ный, связанный с обрушением боковых стенок канала в образовавшемся проране [A22, A25, A26, A32]. Динамика влекомых наносов на наклонном дне описывается модифицированным уравнением Экснера

$$(1 - \psi) \frac{\partial b}{\partial t} + \nabla_{\perp} \mathbf{J}_b = \nabla_{\perp} (c_J |\mathbf{J}_b| \nabla_{\perp} b), \quad (3)$$

где ψ — пористость донного грунта, \mathbf{J}_b — расход наносов на плоском дне, c_J — эмпирическая постоянная, зависящая от типа и состояния грунта.

Численный алгоритм решения уравнения (3) интегрирован в CSPH-TVD метод и параллельный CUDA-алгоритм расчетного модуля «EcoGIS-Simulation» (рис. 3 с) [A5, B7, B9]. Разработанный эффективный вычислительный метод для математического моделирования совместной динамики поверхностных вод и наносов использовался в задачах расчета деформаций речного русла (рис. 4 с) [A25, A26, A32], размыва грунта ограждающих дамб и затопления прилегающих территорий при возникновении аварий на реальных гидротехнических объектах [A22] или во время катастрофического ливневого паводка [A5]. На основе многочисленных вычислительных экспериментов (более 300) по имитационному моделированию русловых течений проводилась верификация и валидация математических моделей посредством сравнения результатов численных расчетов с данными натурных измерений [A3, A10, A24]. Результаты вычислительных экспериментов по имитационному моделированию совместной динамики поверхностных вод и нано-

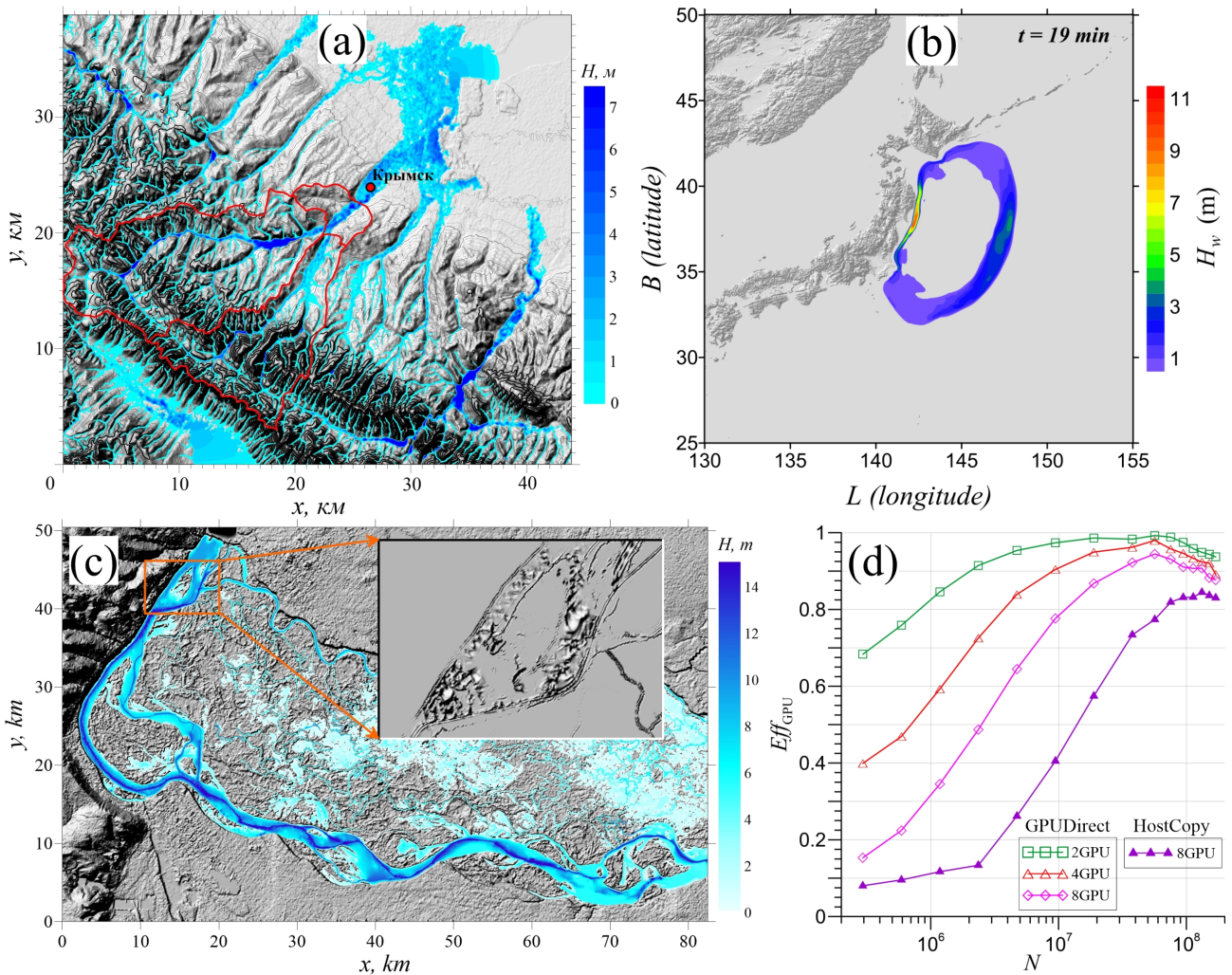


Рис. 4. (а) Распределение воды в период ливневого паводка (Крымск – 2012). (б) Высота волны цунами во время подводного землетрясения (Япония – 2011). (с) Распределение воды на территории Волго-Ахтубинской поймы в период весеннего паводка, на врезке показано изменение рельефа дна (в пределах $\Delta b = \pm 1.5$ м). (д) Эффективность распараллеливания различных реализаций (GPUDirect/HostCopy) параллельного алгоритма в зависимости от количества ячеек N при расчетах на суперкомпьютерах с GPUs [A5, A32, A51].

сов показали высокую эффективность распараллеливания OpenMP-CUDA-алгоритма, реализованного в расчетном модуле программного комплекса «EcoGIS-Simulation», при расчетах на суперкомпьютерных multi-GPU платформах с использованием технологии GPUDirect (рис. 4 d) [A5].

В § 2.4 построена математическая модель самосогласованной динамики поверхностных и грунтовых вод, позволяющая рассматривать гидродинамические течения в водоемах произвольной геометрии и их окрестностях с учетом пространственной неоднородности параметров водопроницаемых грунтов, различные стадии и типы фильтрационных течений (свободная, с подпором, напорная и инфильтрация), а также процессы высачивания воды из грунта на поверхность [A31]. Нелинейная динамика грунтовых вод со свободной поверхностью описывается уравнением Буссинеска

$$\psi \frac{\partial H_g}{\partial t} = \nabla_{\perp} (k_{\phi} H_g \nabla_{\perp} \eta_g) + q_g, \quad (4)$$

где H_g и η_g — глубина и уровень грунтовых вод, соответственно, k_ϕ — коэффициент фильтрации, q_g — источники/стоки воды в слое грунта. Численный алгоритм решения уравнения (4) интегрирован в CSPH-TVD метод и параллельный CUDA-алгоритм расчетного модуля «EcoGIS-Simulation» (рис. 3 с). Программная реализация численного алгоритма расчета самосогласованной динамики поверхностных и грунтовых вод протестирована в 1D и 2D приближениях [A31].

В третьей главе метод CSPH-TVD, описанный в Гл. 1 для модели мелкой воды, обобщается для моделирования газодинамических течений с произвольными числами Маха в неоднородных внешних полях при наличии в расчетной области нестационарных границ между сплошной средой и вакуумом. Особенности реализации CSPH-TVD метода численного решения уравнений газодинамики и результаты тестовых расчетов приведены в §§ 3.1–3.2 для одномерного и двумерного приближений [A18, A19, A34, A41, A52].

На первом этапе метода CSPH-TVD динамика «жидких частиц» описывается системой уравнений газодинамики в лагранжевой форме [A34, A41, A52]

$$\frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = \Phi_i, \quad \mathbf{U}_i = \begin{pmatrix} \varrho_i \\ (\varrho \mathbf{v})_i \\ E_i \end{pmatrix}, \quad \Phi_i = \begin{pmatrix} 0 \\ -\varphi_i [\nabla \varphi]_i + \varrho_i \mathbf{f}_i \\ \frac{\varphi_i}{2} (\mathbf{v}_i [\nabla \varphi]_i + [\nabla(\varphi \mathbf{v})]_i) + \varrho_i \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i \end{pmatrix}, \quad (5)$$

в которых газодинамическое давление представлено в виде $p = \varphi^2/2$, ϱ — плотность, $E = \varrho |\mathbf{v}|^2/2 + p/(\gamma - 1)$, γ — показатель адиабаты. Уравнения (5) имеют вид, аналогичный (1), что позволяет адаптировать численный алгоритм CSPH-TVD, разработанный ранее для модели мелкой воды (см. Гл.1), на случай полной системы уравнений газодинамики как на лагранжевом, так и на эйлеровом этапах (2). В данной главе описаны варианты схемы с использованием различных пространственных шаблонов аппроксимации, сглаживающих SPH-ядер, приближенных методов решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва, TVD-ограничителей. Проведено тестирование на стандартном наборе задач: линейные волны Римана (рис. 5 а), распад сильного разрыва давления, взаимодействия двух сильных ударных волн, формирование стационарного решения для сверхзвукового потока газа через потенциальную яму (рис. 5 б), истечения газа в вакуум, развитие неустойчивостей в потоках с тангенциальными разрывами скорости — неустойчивости Кельвина–Гельмгольца (рис. 5 с) и волноводно-резонансных мод сверхзвуковых струй (рис. 5 d). Исследованы устойчивость, точность и эффективность численной реализации CSPH-TVD метода. Получены оценки для порядка аппроксимации, погрешности и ее накопления, сходимости численной схемы. Показано, что численные схемы CSPH-TVD и MUSCL демонстрируют близкое качество решений в областях с большими градиентами давления и в неоднородных гравитационных полях при наличии в расчетной области сильных разрывов и динамических границ типа «газ – вакуум». Преимуществом CSPH-TVD по сравнению с MUSCL является лучшая сбалансированность численного решения при моделировании установившихся течений в неоднородных внешних полях (см. рис. 5 б), а

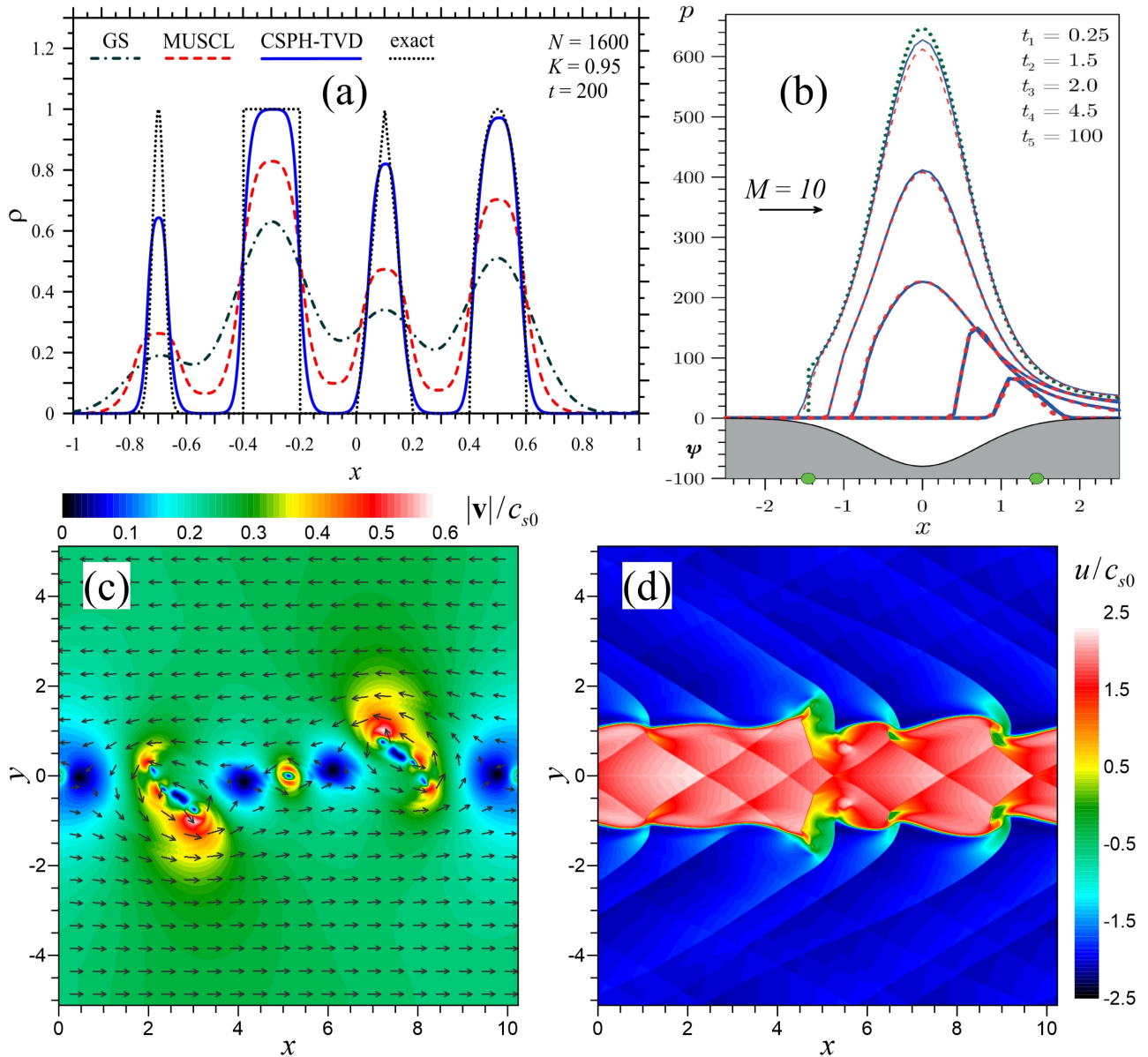


Рис. 5. (а) Перенос произвольных профилей плотности с постоянной скоростью при нулевом градиенте давления. (б) Образование стационарной ударной волны при сверхзвуковом потоке (с числом Маха $M = 10$) газа через потенциальную яму, сравниваются решения методов CSPH-TVD (сплошная зеленая линия) и MUSCL (штриховая красная линия), точечной линией показано точное решение. (в) Вихревая структура течения на нелинейной стадии развития неустойчивости Кельвина-Гельмгольца в сдвиговом потоке газа с $M = 0.5$ (CSPH-TVD/MUSCL). (г) Ударно-волновые структуры на нелинейной стадии эволюции неустойчивости волноводно-резонансных мод в сверхзвуковой струе с $M = 4$ (CSPH-TVD/MUSCL) [A7, A34].

также хорошая точность моделирования, сравнимая с точностью численных схем Годуновского типа при меньших вычислительных затратах. По сравнению с различными модификациями SPH-метода численная схема CSPH-TVD имеет более высокую точность, является менее диссипативной и лучше сбалансированной.

Для быстрого численного моделирования газодинамических течений в § 3.3 разработаны параллельные OpenMP-CUDA-алгоритмы CSPH-TVD/MUSCL методов (рис. 6 а) для суперкомпьютеров с GPUs [A1, A2, A4, A7, A8, A14, A18, A19, B1, B2]. Исследована эффективность реализации этих суперкомпьютерных алго-

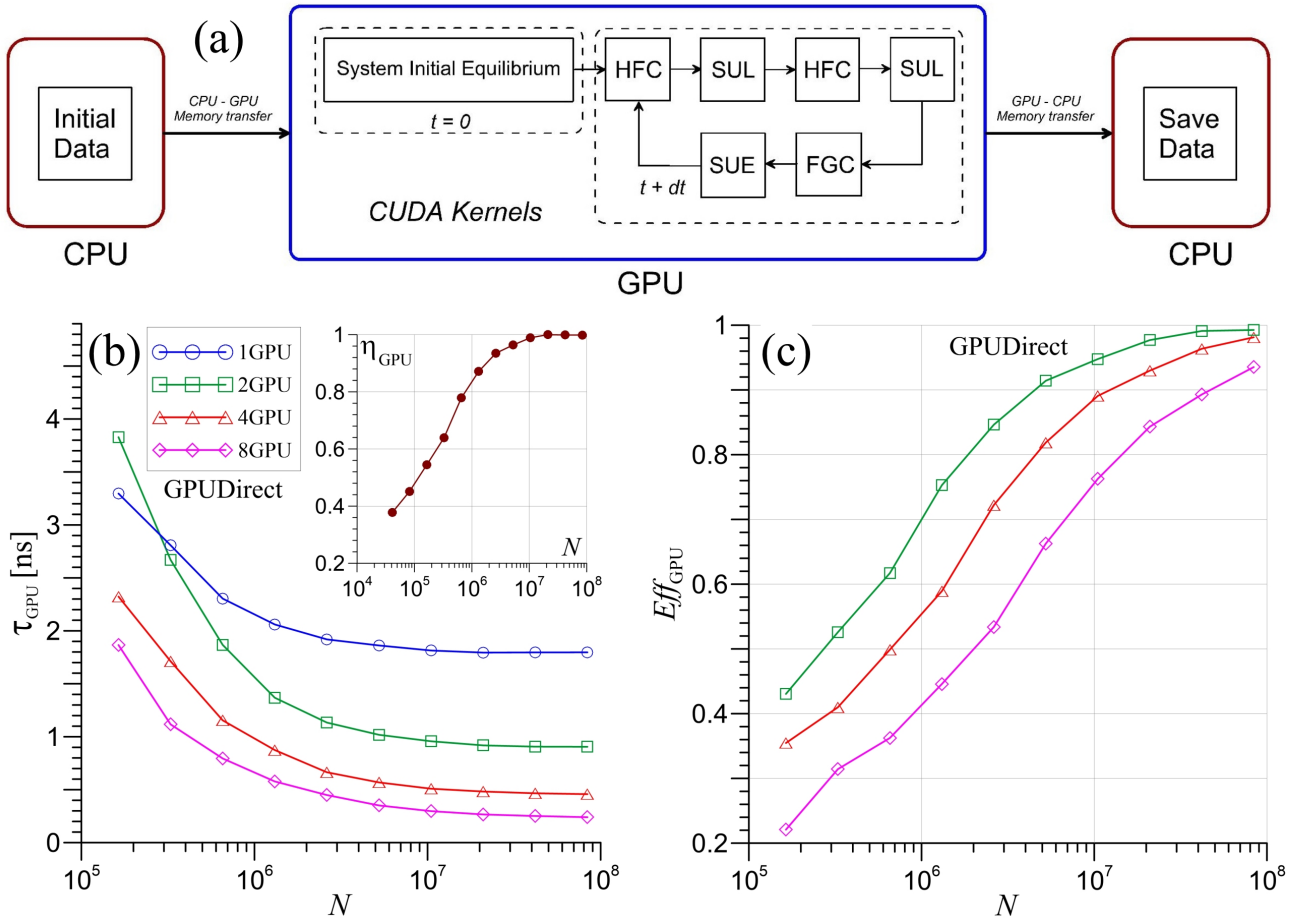


Рис. 6. (a) Поток диаграмма параллельного CUDA-алгоритма CSPH-TVD метода: «HFC» — расчет газодинамических и внешних сил; «SUL» — обновление характеристик частиц на лагранжевом этапе; «FGC» — вычисление потоков массы, импульса и энергии; «SUE» — обновление сеточных функций на эйлеровом этапе. (b) Зависимость времени расчета одной ячейки τ_{GPU} в параллельном алгоритме CSPH-TVD/MUSCL методов на одном и нескольких GPU от количества ячеек N , величина η_{GPU} на врезке — доля использования ресурсов (загрузки) GPU. (c) Эффективность распараллеливания Eff_{GPU} численного алгоритма в зависимости от N для различного количества GPU's [A1, A34].

ритмов и продемонстрирована их высокая вычислительная производительность (рис. 6 b), обеспечивающая время обработки одной расчетной ячейки $\sim 0.3\text{--}1$ нс на 2–8 GPU (V100) при количестве ячеек $N > 10^7$. Эффективность распараллеливания составляет $\sim 90\text{--}98\%$ для 2–8 GPU при $N \sim 10^8$ (рис. 6 c).

В § 3.4 разработаны аналитические и численные методы исследования математических моделей динамики газовых компонентов астрофизических объектов (аккреционных дисков и струй), основанные на замене переменных в исходных уравнениях и позволяющие создавать в численных моделях с неоднородным распределением параметров течения точное равновесие (начальное стационарное состояние) необходимое для исследования различных стадий эволюции газодинамических неустойчивостей [A62, A63, A72, A73, A74]. Предложенные методы позволяют с высокой точностью описывать различные стадии эволюции газодинамических неустойчивостей и проводить валидацию численных моделей при исследовании динамики акустической неустойчивости в тонких аккреционных дис-

ках [A66, A69], волноводно-резонансных мод в сверхзвуковых струях из молодых звездных объектов [A45, A68] и активных ядер галактик [A64, A70, A71].

Четвертая глава посвящена математическому моделированию неравновесных газодинамических течений с использованием аналитических методов линейного анализа устойчивости и численных методов CSPH-TVD/MUSCL, реализованных в виде комплекса программ на основе суперкомпьютерных (параллельных) OpenMP-CUDA-алгоритмов.

В § 4.1 построена обобщенная математическая модель многокомпонентного неравновесного газа с учетом колебательной релаксации, химических реакций, вязкости, теплопроводности, нагрева и охлаждения [A1, A7]. В простейшем случае однокомпонентного колебательно-возбужденного газа с учетом химических реакций система газодинамических уравнений дополняется эволюционными уравнениями на удельную колебательную энергию ε_V газа и долю химически активного реагента Y [A8, A13, A18, A19]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \varepsilon_V \\ \rho Y \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \mathbf{v} \varepsilon_V \\ \rho \mathbf{v} Y \end{pmatrix} = \rho \begin{pmatrix} Q - \dot{\varepsilon}_V \\ \dot{R} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

∇ — векторный дифференциальный оператор Гамильтона, Q — удельная мощность колебательно нагрева газа внешним источником накачки и химическим энерговыделением, $\dot{\varepsilon}_V = (\varepsilon_V - \varepsilon_V^e)/\tau$ — колебательно-поступательный энергообмен, τ — время колебательной релаксации (VT-релаксации), ε_V^e — удельная колебательная энергия газа в равновесном состоянии, \dot{R} — удельная скорость химической реакции. Величина ε_V определяет колебательную температуру газа T_V , которая в неравновесном колебательно-возбужденном газе всегда больше термодинамической температуры T .

В § 4.2 исследуются дисперсионные свойства газодинамических неустойчивостей, возникающих в неравновесном газе [A13, A15, A21]. В рамках линейного анализа устойчивости на исходное стационарное состояние, которое можно достичь посредством добавления в тепловыделяющую систему внешнего теплоотвода (функции охлаждения) Λ , накладываются малые возмущения вида $\tilde{f}(t, x) = \hat{f}(\omega, K) \exp\{-i\omega t + iKx\}$. В результате для покоящейся однородной среды получается аналитический закон дисперсии звуковых и энтропийных волн вида $K(\omega)$ с комплексным волновым числом K и вещественной частотой ω . Инкремент акустической и тепловой неустойчивостей определяется величиной $\alpha = -\text{Im } K$. Условия возникновения этих неустойчивостей, в первую очередь, определяются степенью неравновесности среды $S = \tau_0 \rho_0 Q_0 / p_0$ и зависимостью величин τ , Q , Λ от температуры. Нижним индексом «0» отмечено исходное стационарное состояние. В линейной модели эти зависимости сводятся к параметрам $\tau_T = (\partial \ln \tau / \partial \ln T)_0$, $Q_T = (\partial \ln Q / \partial \ln T)_0$ и $\Lambda_T = (\partial \ln \Lambda / \partial \ln T)_0$.

При проведении численного газодинамического моделирования важно знать границы устойчивости и иметь оценки инкремента акустической и тепловой неустойчивостей, для определения которых в § 4.2 построены карты распределения величины α на плоскости параметров линейной модели ω , S , τ_T и Λ_T . В каче-

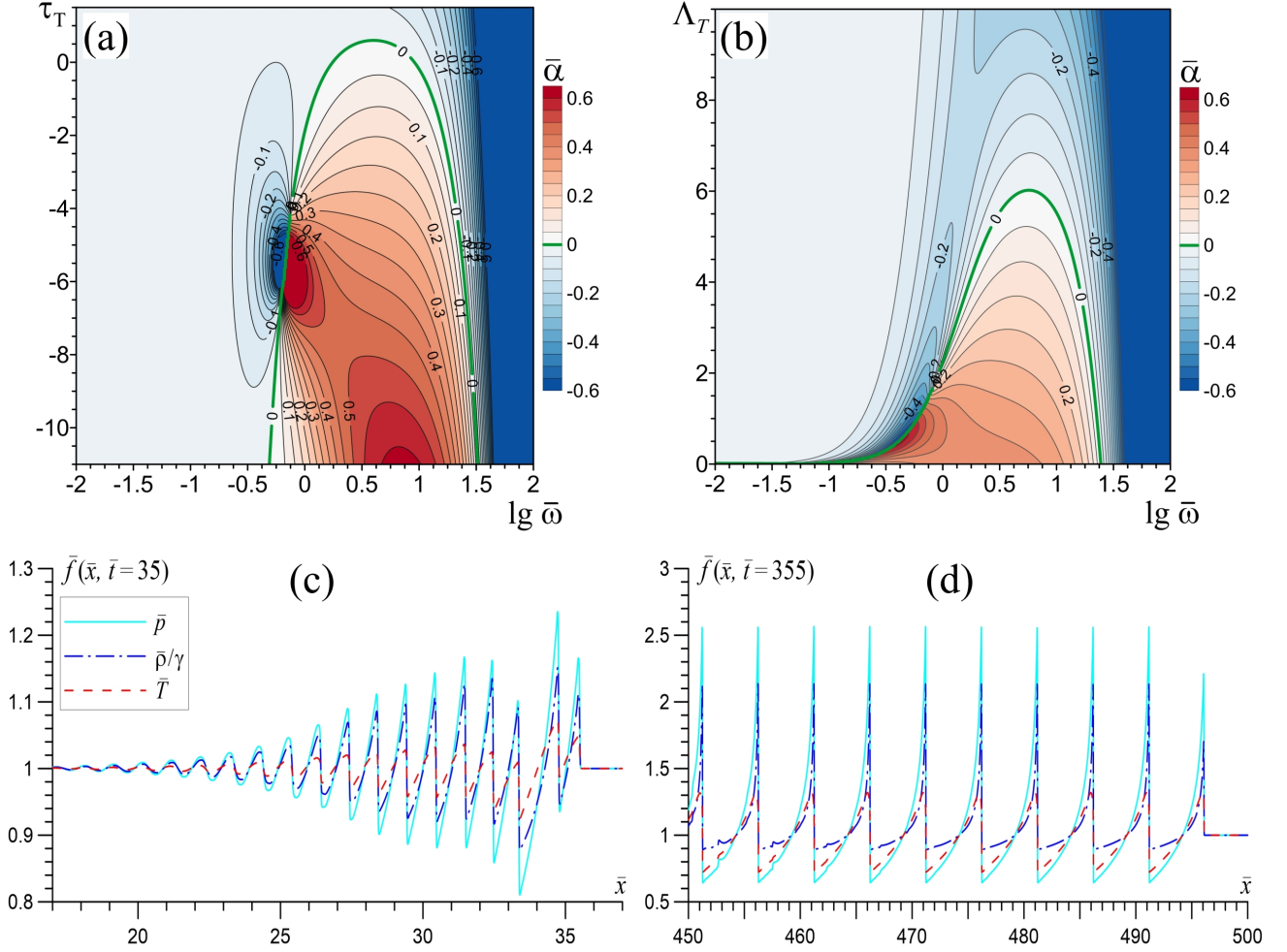


Рис. 7. Акустическая неустойчивость в неравновесном колебательно-возбужденном газе при $S = 1$ [A8, A18]: (a,b) — карты распределения безразмерного инкремента в линейной модели (зеленой линией показаны границы устойчивости); (c,d) — результаты численного моделирования нелинейной динамики акустической неустойчивости и образования УАВИ.

стве примера таких карт на рис. 7 a,b показаны распределения безразмерного акустического инкремента ($\bar{\alpha} = \alpha \tau_0 c_{s0}$) на плоскости безразмерных переменных $(\lg \bar{\omega}, \tau_T)$ и $(\lg \bar{\omega}, \Lambda_T)$, где $\bar{\omega} = \omega \tau_0$. Граница устойчивости на этих картах — зеленая сплошная линия, которая разделяет области с $\bar{\alpha} > 0$ (акустическая неустойчивость) и $\bar{\alpha} < 0$ (затухание звука). Аналогично проведено исследование газодинамических неустойчивостей, возникающих на тангенциальных разрывах скорости, для дозвуковых и сверхзвуковых режимов течения. Показано, что наличие в газе колебательной неравновесности может приводить к значительному усилению неустойчивостей Кельвина–Гельмгольца и волноводно-резонансных мод сверхзвуковой струи в определенном волновом спектре [A13, A15, A21].

В § 4.3 на основе разработанных в Гл. 3 численного метода CSPH-TVD и параллельных OpenMP-алгоритмов CSPH-TVD/MUSCL методов проведено численное моделирование одномерных газодинамических течений в неравновесных средах [A2, A8, A14, A18, A19, B2, B3]. Для численного моделирования неравновесных газодинамических течений методы CSPH-TVD/MUSCL и их параллельные алгоритмы дополнены эволюционными уравнениями (6), а также в системе

(5) учтены вязкость, теплопроводность, релаксационные процессы колебательно-поступательного энергообмена и химического энерговыделения. Основное внимание уделено исследованию динамики акустической неустойчивости на различных стадиях эволюции. На линейной стадии с экспоненциальным ростом амплитуды волны проводилась валидация численной модели посредством сравнения результатов моделирования с линейным анализом устойчивости. Показано, что на нелинейной стадии развития акустической неустойчивости сначала формируется пилообразная система слабых ударных волн, из которой затем образуется квазистационарная система ударно-волновых импульсов (рис. 7 с,d). Детально исследовано влияние параметров модели неравновесного колебательно-возбужденного газа и показано, что на нелинейной стадии развития акустической и тепловой неустойчивостей может формироваться квазистационарная система ударно-автоволновых импульсов (УАВИ), существование и интенсивность которых в основном определяются степенью неравновесности среды и зависимостью времени релаксации от температуры. При этом структура этих УАВИ не зависит от типа, амплитуды и частоты внешних возмущений неравновесной среды. В неравновесном химически активном газе ударно-автоволновые импульсы могут инициировать управляемый тепловой взрыв и образование детонационных волн высокой интенсивности. Исследована сходимость численного алгоритма при описании структуры ударных и детонационных волн в неравновесном газе.

В § 4.4 на основе суперкомпьютерных OpenMP-CUDA-алгоритмов CSPH-TVD/MUSCL-методов проведено численное моделирование двумерных газодинамических течений в неравновесных средах [A1, A4, A7, B1]. Рассмотрены различные режимы и конфигурации неравновесных газодинамических течений в плоских каналах с учетом внешних источников нагрева и охлаждения. В задаче дозвукового натекания неравновесного газа на твердую стенку исследовалась структура ударно-волновых импульсов, возникающих в плоском канале из-за взаимодействия потока с препятствием и развития акустической неустойчивости. В окрестности твердой стенки задавались неоднородные вдоль и поперек канала начальные возмущения скорости набегающего потока, из-за которых возникает сложная ударно-вихревая структура течения как на фронте ударно-автоволновых импульсов, так и за их фронтом (рис. 8 а). Аналогично исследован сверхзвуковой режим натекания колебательно-возбужденного и химически активного газа на твердую стенку. В этом случае образуется устойчивая ударная волна, а за ее фронтом возникает сложная ударно-волновая структура течения.

В задаче с одним или двумя тангенциальными разрывами скорости течения исследовалось влияние колебательной неравновесности газа на ударно-волновые и вихревые структуры, формирующиеся на нелинейной стадии развития неустойчивостей Кельвина–Гельмгольца и волноводно-резонансных мод сверхзвуковых струй. Показано, что наличие в газе колебательной неравновесности может значительно усиливать неустойчивости тангенциального разрыва скорости и приводить к образованию более интенсивных вихревых и ударно-волновых структур как на сверхзвуковых, так и дозвуковых режимах течения (рис. 8 b,c). Возникающие раз-

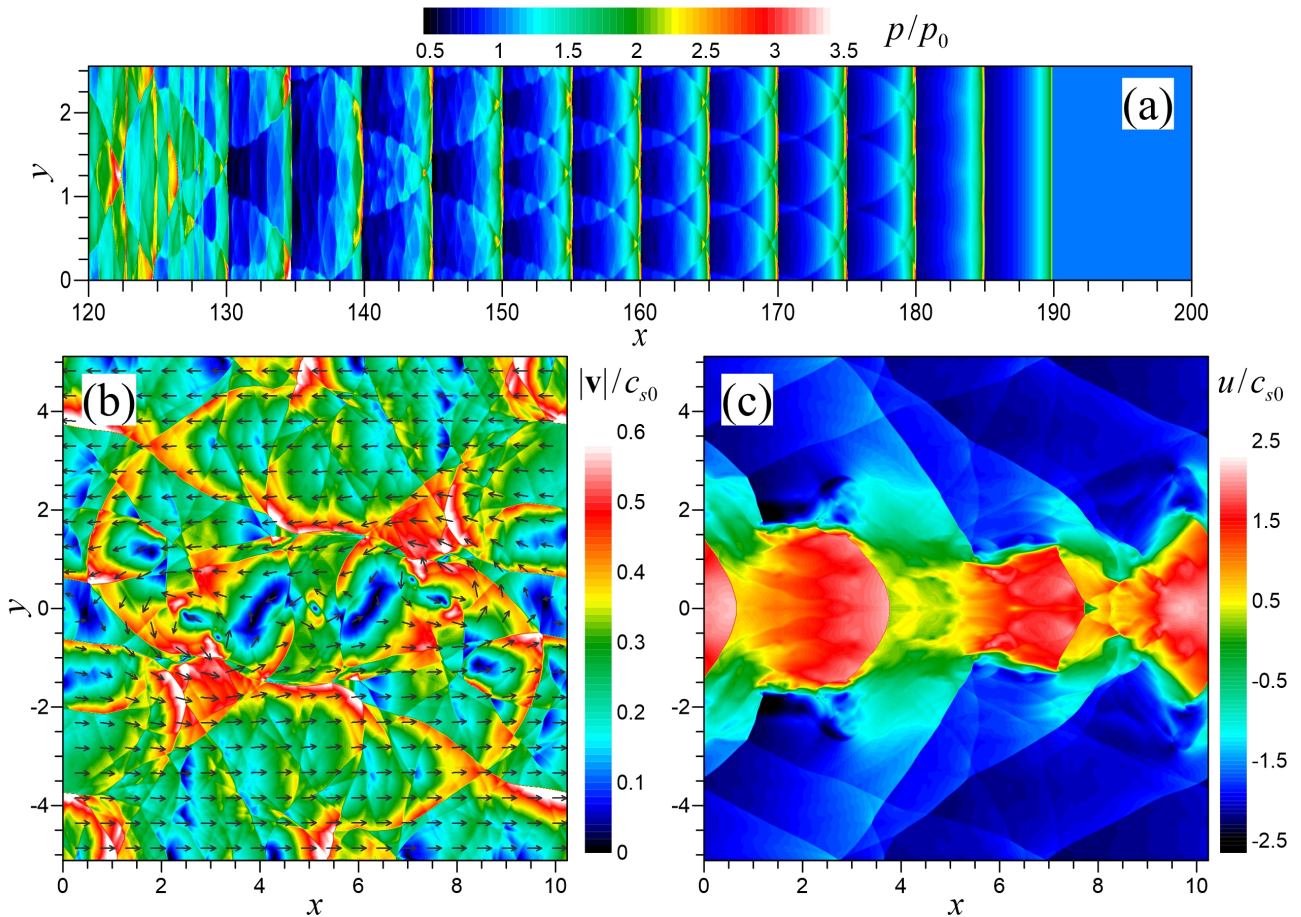


Рис. 8. Результаты численного моделирования двумерных течений неравновесного колебательно-возбужденного газа (CSPH-TVD/MUSCL) [A7]: (a) — ударно-автоволновые импульсы в плоском канале; (b) — вихревая структура течения на нелинейной стадии развития неустойчивости Кельвина-Гельмгольца в сдвиговом потоке газа с $M = 0.5$; (c) — ударно-волновые и вихревые структуры на нелинейной стадии эволюции неустойчивости волноводно-резонансных мод в сверхзвуковой струе с $M = 4$.

личия в структуре течения можно наглядно оценить сравнивая неравновесный газ с равновесным (см. рис. 5 с,d). Аналогично рассмотрена задача о втекании неравновесной сверхзвуковой струи в плоский канал, заполненный равновесным газом. Исследовано влияние колебательной неравновесности на ударно-волновые и вихревые структуры, возникающие в процессе продвижения сверхзвуковой струи по равновесному невозмущенному газу [A1, A4, A7].

Результаты вычислительных экспериментов по математическому моделированию неравновесных газодинамических течений позволили обнаружить новые ударно-волновые и вихревые структуры высокой интенсивности, которые могут иметь важное значение в практических приложениях при проектировании детонационных реактивных двигателей, газодинамических лазеров и ударно-волновых энергетических установок [A16, A17].

В пятой главе рассматриваются особенности параллельной реализации численных моделей N -тел (N-body) и гидродинамики сглаженных частиц (SPH) на графических процессорах (GPU) с использованием технологий OpenMP-CUDA и

GPUDirect/HostCopy для суперкомпьютеров с несколькими GPUs [B6, B8, B11].

В § 5.1 представлено детальное описание структуры разработанного вычислительного модуля «N-body – CUDA» для моделирования динамики бесстолкновительных (звезды + темная материя) компонентов галактик на основе параллельного CUDA-алгоритма метода «частица – частица» (PPM) для системы гравитационно взаимодействующих N -тел [A9, A40]. Бесстолкновительная среда моделируется системой самогравитирующих частиц с $N_c = N_s + N_h$, включающих частицы-звезды (N_s) и частицы темного гало (N_h). Система уравнений движения бесстолкновительной компоненты имеет вид

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{f}_{ij}, \quad \mathbf{f}_{ij} = -G \frac{m_j (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 + \delta^2]^{3/2}}, \quad i = 1, \dots, N_c, \quad (7)$$

где N — суммарное количество частиц с учетом газовой компоненты, G — гравитационная постоянная, m_j — масса j -частицы, \mathbf{v}_i и $\mathbf{r}_i(t) = \int \mathbf{v}_i dt$ — скорость и радиус-вектор i -й частицы, соответственно, $\delta \propto \sqrt{N}$ — шкала гравитационного сглаживания, обеспечивающая бесстолкновительность системы. Для численного интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) (7) используется трехступенчатая схема Ньютона–Штормера–Верле (предиктор-корректор), называемая leapfrog или Kick-Drift-Kick (KDK). Эта схема обладает вторым порядком точности, является экономичной (гравитационные силы вычисляются один раз на каждом временном шаге) и обеспечивает выполнение законов сохранения с высокой точностью. Распараллеливание численного алгоритма проведено с использованием технологий OpenMP-CUDA и GPUDirect/HostCopy для суперкомпьютеров с несколькими GPU, взаимодействующих между собой по интерфейсу PCIe/NVLink. Проведен анализ точности моделирования системы N -тел при использовании в параллельном коде чисел одинарной (FP32) и двойной (FP64) точности. Продемонстрированы эффекты существенного нарушения законов сохранения импульса (рис. 9 а), момента импульса и энергии системы N -тел в расчетах с числами FP32, приводящие к сильным искажениям эволюции галактик. Исследована эффективность распараллеливания суперкомпьютерных OpenMP-CUDA-алгоритмов модуля «N-body – CUDA» в зависимости от количества частиц N и различных технологий (GPUDirect/HostCopy) передачи данных между графическими процессорами на multi-GPU платформах с общей памятью. Продемонстрирована хорошая масштабируемость этих параллельных алгоритмов при $N > 10^6$ (рис. 9 б).

Структура разработанного вычислительного модуля «SPH – CUDA», предназначенного для моделирования динамики газовых подсистем галактик на основе параллельного CUDA-алгоритма SPH-метода, и результаты тестовых расчетов столкновения галактических гало рассмотрены в § 5.2 [A43, A35]. Динамика газовых SPH-частиц описывается уравнениями движения и баланса удельной внутренней энергии ε_i :

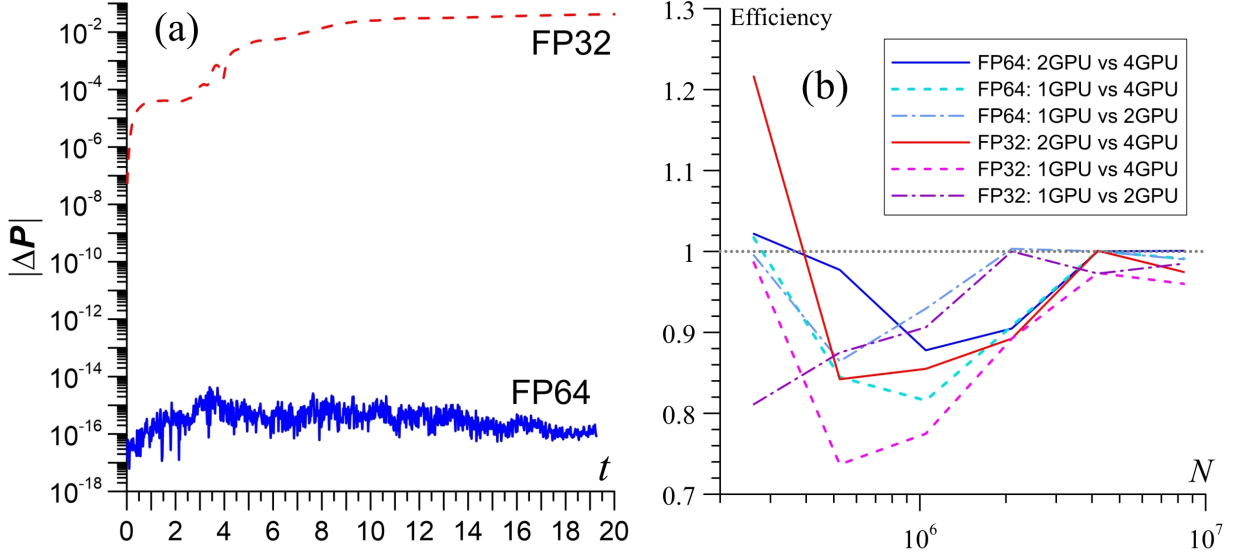


Рис. 9. Анализ вычислительной эффективности суперкомпьютерных OpenMP-CUDA-алгоритмов при использовании чисел одинарной (FP32) и двойной (FP64) точности: (a) — погрешность выполнения закона сохранения импульса системы N-тел $|\Delta P|$ [A40]; (b) — эффективность распараллеливания на multi-GPU платформах [A9].

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{\nabla p_i}{\rho_i} + \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{f}_{ij}, \quad \frac{d\varepsilon_i}{dt} = -\frac{p_i}{\rho_i} \nabla \cdot \mathbf{v}_i, \quad i = N_c + 1, \dots, N, \quad (8)$$

где $N = N_c + N_g$, N_g — количество газовых частиц, $\varepsilon_i = p_i / [(\gamma - 1)\rho_i]$, γ — показатель адиабаты, ρ_i и p_i — плотность и давление i -й газовой частицы, соответственно. Аппроксимация всех величин в системе (8) проводится на основе SPH-подхода с использованием сглаживающих ядер с радиусом (длиной) сглаживания h_i . При аппроксимации плотности применяется кубический сплайн Монагана, а при аппроксимации градиента давления и дивергенции скорости используется ядро Мюллера, которое позволяет устранить численную кластеризацию частиц и повысить устойчивость SPH-метода. Для более точного описания областей сжатия и разрежения газа радиус сглаживания задается как функция плотности $h_i \propto \rho_i^{-1/3}$. После проведения SPH-аппроксимации пространственных производных в (8) получаем систему ОДУ, для численного интегрирования которой используется аналогичная KDK схема предиктор-корректор второго порядка точности, что обеспечивает самосогласованное описание динамики газовых и бесстолкновительных частиц. Параллельный код расчетного модуля «SPH – CUDA» реализован с использованием разработанного иерархического сеточного метода сортировки, основанного на параллельном каскадном алгоритме нахождения частичных сумм в CUDA блоке. Этот метод применяется при вычислении газодинамических сил в SPH-подходе и позволяет повысить производительность вычислений. Разработанный параллельный CUDA-алгоритм SPH-метода и его отдельные CUDA-ядра использовались при разработке комплекса программ для моделирования аэродинамических и гидродинамических течений [A23, A36, B10].

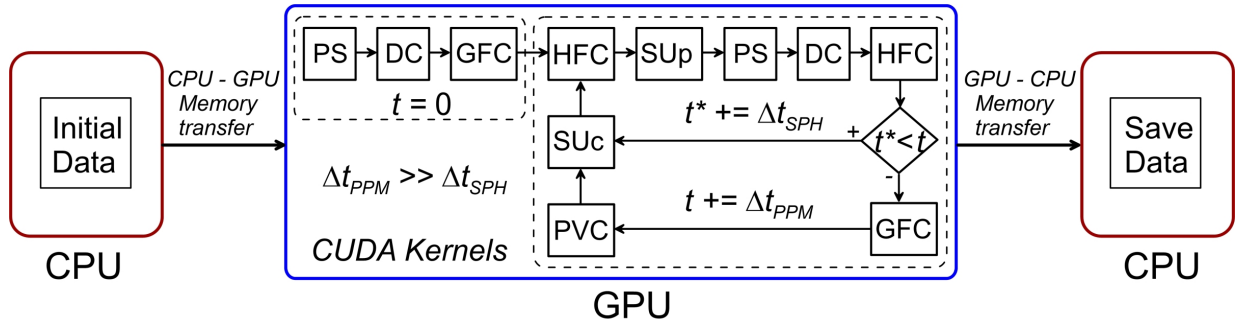


Рис. 10. Поточковая CUDA-диаграмма программного комплекса «SPH + N-body» с последовательностью выполнения CUDA-ядер: «PS» — сортировка газовых SPH-частиц по ячейкам, «DC» — расчет плотности газовых SPH-частиц, «HFC» — расчет газодинамических сил между SPH-частицами; «GFC» — расчет гравитационных сил между всеми частицами прямым методом (PPM); «Sup» — обновление параметров системы всех частиц на этапе предиктор; «SUc» — обновление системы на этапе корректор; «PVC» — корректировка скоростей всех частиц.

В § 5.3 описана структура суперкомпьютерного программного комплекса «SPH + N-body» для моделирования самосогласованной динамики многокомпонентных (газ + звезды + темная материя) галактик. Этот программный комплекс основан на параллельных OpenMP-CUDA-алгоритмах, реализованных в расчетных модулях «N-body – CUDA» и «SPH – CUDA». Общая структура «SPH + N-body» представлена на рис. 10 в виде потоковой CUDA-диаграммы, на которой показана последовательность выполнения вычислений в основных CUDA-ядрах численного алгоритма. В параллельном коде «SPH + N-body» реализована процедура разделение по времени расчета гравитационных и газодинамических сил в соответствующих CUDA-ядрах, которая позволяет значительно повысить производительность вычислений при выполнении условия $\Delta t_{PPM} \gg \Delta t_{SPH}$ благодаря существенным различиям в вычислительной сложности алгоритмов (PPM — квадратичная $O(N^2)$, SPH — линейная $O(N)$). Временной шаг Δt_{SPH} определяется из условия устойчивости SPH-метода, а $\Delta t_{PPM} \sim \delta/|\mathbf{v}_{max}|$, где \mathbf{v}_{max} — максимальная скорость частиц. Реализованный подход повышение производительности вычислений приводит к снижению точности схемы предиктор-корректор (КДК) до первого порядка. Поэтому в параллельный алгоритм добавлена процедура коррекции скоростей частиц («PVC»-ядро на рис. 10), которая позволяет повысить точность вычислений до второго порядка [A37].

Шестая глава посвящена численному моделированию самосогласованной динамики многокомпонентных (газ+звезды+темная материя) систем галактик на основе созданного суперкомпьютерного комплекса программ «SPH + N-body» [B4, B6, B11]. В § 6.1 построена численная модель динамики звездно-газового диска галактики Млечный Путь, которая хорошо согласуется с данными наблюдений о кинематике дисковых компонент и морфологии нашей Галактики [A27, A33]. Построенная модель с хорошей точностью объясняет центральный звездный бар размером $\sim 2.5\text{--}3$ кпк и многорукавную спиральную структуру в звездно-газовом диске, характеризующуюся преобладанием глобальных неосесимметричных мод с числом рукавов $m = 3, 4$ (рис. 11 а,б). Численная модель Галактики позволяет

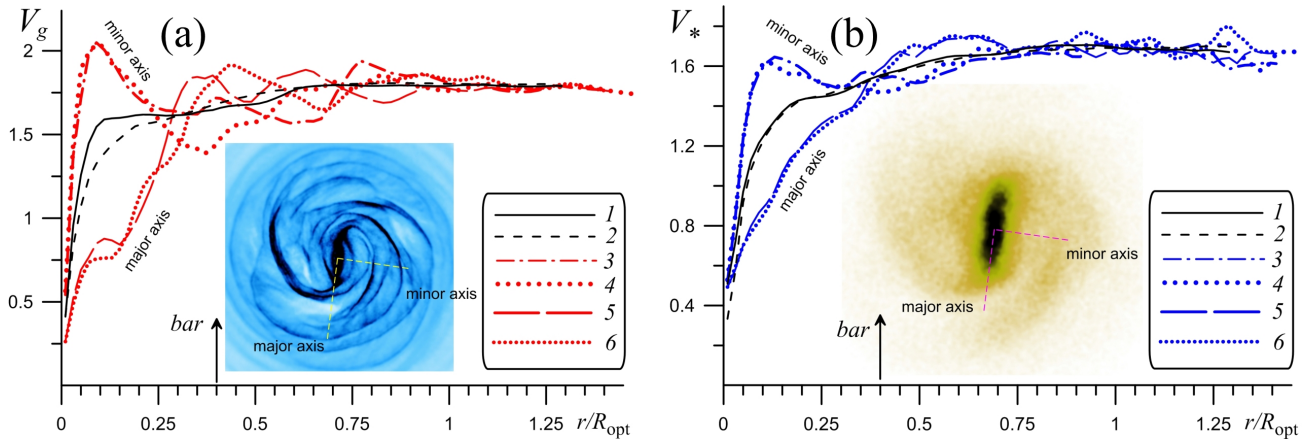


Рис. 11. Кривые вращения в галактике Млечный Путь для газового (a) и звездного (b) дисков в момент времени $t_s \approx 1$ млрд. лет [A27]: кривые (3, 4) — профили азимутальных скоростей вдоль малых полуосей бара; (5, 6) — вдоль больших полуосей бара; 1 — средне-азимутальная кривая вращения в начальный момент времени $t = 0$, 2 — при $t = t_s$. Вертикальной стрелкой показан размер бара ≈ 2.5 кпк (оптический радиус звездного диска $R_{opt} \approx 9$ кпк, единица скорости ≈ 134 км/с). На врезках показана соответствующая спиральная структура с центральным баром.

объяснить наблюдаемые на профилях кривых вращения характерные особенности, связанные с наличием максимума в окрестности 1 кпк, только динамикой центрального бара и проекцией данных наблюдения без необходимости использования некорректных моделей с массивным и центрально сконцентрированным звездным балджем. Аналогичная численная модель динамики звездно-газовых дисков только для карликовых галактик dS-типа построена в § 6.2 [A20, A28]. Характерной особенностью этого типа dS-галактик является редко наблюдаемая в них спиральная структура с центральным баром, которая может формироваться в дисковых подсистемах галактик в результате развития гравитационной неустойчивости и влияния неосесимметричного темного гало [A37, A42, A56, A67]. Результаты многочисленных вычислительных экспериментов позволили определить ограничения на массу газовой компоненты, толщину и скорость вращения галактического диска, при которых возможно формирование спиральной структуры и звездного бара в таких галактиках.

В § 6.3 представлены результаты численного моделирования столкновения галактик [A30, A35], состоящих из сфероидальных газового и бесстолкновительного (звезды + темная материя) гало. При столкновении таких сфероидальных гало могут образовываться горячие (рентгеновские) газовые конусы, наблюдаемые в эллиптических галактиках и возникающие в результате сверхзвукового натекания газа на потенциальную яму с образованием ударных волн. Газовые компоненты в сталкивающихся галактиках интенсивно взаимодействуют между собой, что приводит к значительному обмену газом между галактиками, при лобовом столкновении происходит 80% взаимное замещение газовых компонентов галактик. Аналогично в § 6.4 представлены результаты серии вычислительных экспериментов по моделированию динамики столкновений межгалактических газовых гало со звездно-газовым диском спиральной галактики [A12, A29]. Исследованы

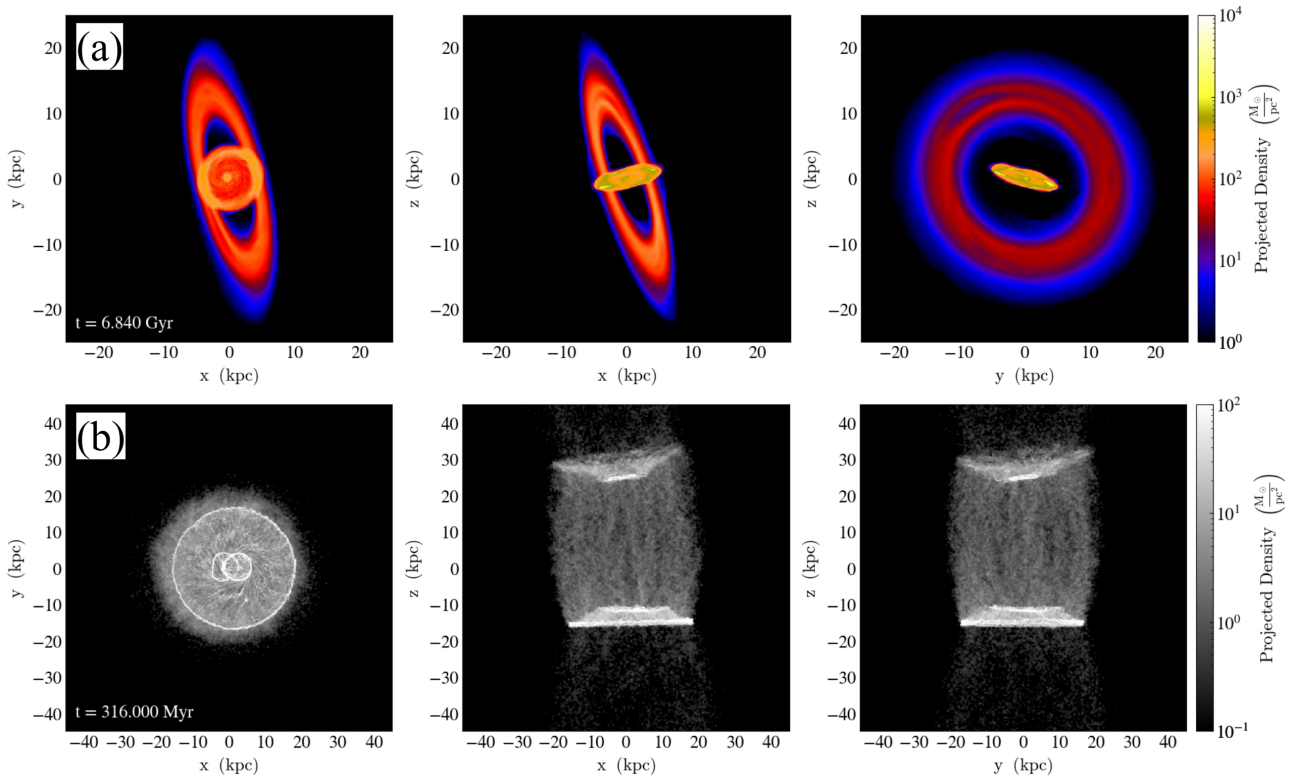


Рис. 12. (а) Полярное газовое кольцо и противовращающийся газовый диск, образующиеся в спиральной галактике при ретроградном падении межгалактического газа на ее звездно-газовый диск. (б) Газовый мост в сталкивающихся спиральных галактиках с характерной волокнистой структурой, наблюдаемой в астрофизических объектах типа Taffy [A6].

механизмы образования полярных газовых колец, противовращающихся звездных и газовых дисков при взаимодействии межгалактического газа с галактическим диском. Подобные структуры наблюдаются в реальных спиральных галактиках, а также возникают в космологических симуляциях Illustris TNG100. Важным фактором определяющим возможность формирования этих структур является ретроградное падение межгалактического газа (рис. 12 а). Ретроградное падение также приводит к увеличению темпа газовой аккреции в центр галактики, что может являться одним из механизмов повышения активности галактических ядер с центральной сверхмассивной черной дырой.

В § 6.5 построены численные модели взаимодействующих спиральных галактик. Рассмотрены столкновения галактик со сравнимыми массами, в результате взаимодействия которых после нескольких ударов (прохождений сквозь друг друга) образуются единая галактика (большой мержинг) [A6]. В результате почти лобового столкновения таких галактик после первого или второго удара могут образовываться газовые мосты, наблюдаемые в астрофизических объектах типа Taffy (рис. 12 а). Характерной особенностью этих газовых мостов является мелкомасштабная волокнистая структура с плотными газовыми сгустками (ГМО — Гигантские Молекулярные Облака), в которых наблюдается интенсивное звездообразование. Для имитационного моделирования этих объектов в математической модели газовых компонентов галактик и численном алгоритме «SPH + N-body»

учтены подсеточная физика звездообразования (звездный feedback), процессы нагрева и охлаждения газа [A6, A44, B4]. Исследована зависимость пространственной структура и термодинамических свойств газа в этих объектах от геометрии столкновения и параметров исходных галактик и показано, что они оказывают сильное влияние на возникающие в Taffy ударно-волновые структуры и области звездообразования. Проведено имитационное моделирование столкновений массивной спиральной галактики типа Млечного Пути с карликовой дисковой галактикой, которые также сливаются после нескольких ударов (малый мержинг) [A11]. В результате такого малого мержинга из-за многократного прохождения карликовой галактики через диск основной галактики образуются компактные звездные ядра размером 100–200 пк, которые могут объяснить наличие компактных и ультракомпактных спутников (сЕ/UCD) у массивных спиральных галактик.

В заключении обсуждаются перспективы дальнейших исследований по рассмотренным в диссертации направлениям, сформулированы положения, выносимые на защиту, и перечислены **основные результаты работы**:

1. Разработан новый комбинированный лагранжево-эйлеров CSPH-TVD метод численного моделирования нестационарных течений в модели мелкой воды, описываемой уравнениями Сен-Венана, с произвольными числами Фруда на неоднородном рельефе местности при наличии в области расчета движущихся границ между жидкостью и сухим дном. Метод содержит два основных этапа лагранжев (модифицированный SPH) и эйлеров (модифицированный TVD), последовательное применение которых наделяет численный алгоритм важными положительными свойствами при меньших вычислительных затратах (§§ 1.1–1.2).

2. Проведено тестирование численной схемы CSPH-TVD на классических задачах модели мелкой воды, связанных с расчетом различных режимов течения, гидравлических скачков и волн разряжения на влажном и сухом дне, содержащем разрывы и изломы профиля. Показано, что численный метод CSPH-TVD имеет второй порядок точности, является хорошо сбалансированным, консервативным и устойчивым, с хорошим разрешением описывает гидравлические скачки, контактные и тангенциальные разрывы, применим для моделирования динамики сдвиговых неустойчивостей, течений типа «водопад», поверхностных вод суши в задачах затопления и осушения на реальном рельефе местности, распространения и наката на берег волн типа цунами (§ 1.3).

3. Разработан параллельный алгоритм оригинального численного CSPH-TVD метода моделирования динамики поверхностных вод в модели мелкой воды, основанный на технологиях параллельных вычислений OpenMP-CUDA и GPUDirect/HostCopy для гибридных вычислительных систем (суперкомпьютеров) с несколькими графическими сопроцессорами (GPUs), обладающий высокой производительностью вычислений и позволяющий ускорить расчеты в сотни раз. Для различных конфигураций вычислительных систем (CPUs + GPUs) исследована эффективность распараллеливания алгоритма OpenMP-CUDA с GPUDirect и продемонстрирована его хорошая масштабируемость на multi-GPU платформах с общей памятью (§ 2.1). На основе параллельного CUDA-алгоритма CSPH-TVD метода

создан расчетный модуль программного комплекса «EcoGIS-Simulation», позволяющий проводить быстрое имитационное моделирование динамики поверхностных вод на обширных территориях размером в сотни километров с высоким пространственным разрешением до нескольких метров. Построены численные модели сезонных паводков для рек с регулируемым и нерегулируемым стоками, катастрофического затопления территорий в результате ливневых осадков, распространения океанических цунами и гидрологического режима пойменных территорий в период весеннего паводка (§ 2.2).

4. Построены математические и численные модели самосогласованной динамики наносов, поверхностных и грунтовых вод, позволяющие моделировать гидродинамические течения в окрестности водоемов произвольной геометрии с учетом пространственной неоднородности параметров подстилающей поверхности, размыва грунта ограждающих дамб и транспорта донных отложений, различные стадии и типы фильтрационных течений, процессы высачивания воды из грунта на поверхность. Динамика грунтовых вод и наносов описывается уравнениями Буссенеска и Экснера, численные алгоритмы решения которых интегрированы в CSPH-TVD метод и в параллельный OpenMP-CUDA-алгоритм расчетного модуля «EcoGIS-Simulation». На основе гидродинамического моделирования проведена научно-техническая экспертиза реальных гидротехнических проектов по определению зон затопления/подтопления территорий при аварийном размыве дамб хвостохранилищ, русловым деформациям при добыче речного песка и обеспечении безопасности судоходства (§§ 2.3–2.4).

5. Оригинальный метод CSPH-TVD обобщен для численного моделирования газодинамических течений с произвольными числами Маха в неоднородных гравитационных полях. Показано, что комбинированный лагранжево-эйлеров подход этого метода позволяет корректно рассчитывать динамику газа на нестационарных границах с вакуумом и обеспечивает сравнимую с методом MUSCL вычислительную эффективность. Результаты тестирования газодинамической версии CSPH-TVD метода показали, что он имеет второй порядок точности, является хорошо сбалансированным, консервативным и устойчивым, с хорошим разрешением описывает ударные волны и волны разрежения, контактные и тангенциальные разрывы, применим для моделирования динамики сдвиговых неустойчивостей и газовых подсистем астрофизических объектов (§ 3.1–3.2).

6. Разработаны параллельные алгоритмы численных методов CSPH-TVD/MUSCL, основанные на технологиях параллельных вычислений OpenMP-CUDA и GPUDirect для гибридных вычислительных систем (суперкомпьютеров) с несколькими графическими процессорами (GPUs) и позволяющие увеличить производительность вычислений при моделировании многомерных газодинамических течений с высоким пространственным разрешением в сотни раз по сравнению с алгоритмами для CPUs. Исследована эффективность распараллеливания параллельных OpenMP-CUDA алгоритмов численных методов CSPH-TVD/MUSCL и продемонстрирована их хорошая масштабируемость на multi-GPU платформах с общей памятью (§ 3.3).

7. Предложен подход, основанный на замене переменных в исходных уравнениях и позволяющий создавать в численных моделях с неоднородным распределением параметров течения точное равновесие (начальное стационарное состояние) необходимое для исследования различных стадий эволюции газодинамических неустойчивостей. Реализации данного подхода в численных моделях газовых компонентов астрофизических объектов (тонких аккреционных дисков и струй) позволила исследовать динамику развития отдельных гармоник газодинамических неустойчивостей (акустической и волноводно-резонансной) и показать, что линейный режим с экспоненциальным законом роста амплитуды возмущений хорошо согласуется с линейным анализом устойчивости. На нелинейной стадии развития этих неустойчивостей происходит формирование системы ударных волн, которые могут объяснить высокий уровень турбулентной вязкости в аккреционных дисках и наблюдаемые волновые структуры в астрофизических струях (§ 3.4).

8. Построена математическая модель многокомпонентного колебательно-возбужденного газа с учетом вязкости, теплопроводности, химических реакций, зависимости времени колебательной релаксации, функций нагрева/охлаждения от плотности и температуры среды (§ 4.1). В рамках линейного приближения изучены дисперсионные свойства неустойчивых мод (акустической, энтропийной и вихревой) неравновесного колебательно-возбужденного и химически активного газа, получены оценки инкремента газодинамических неустойчивостей и определены границы устойчивости малых возмущений в зависимости от степени неравновесности среды, моделей колебательной релаксации, нагрева и охлаждения (§ 4.2).

9. Проведена адаптация параллельных алгоритмов методов CSPH-TVD/MUSCL для интегрирования газодинамических уравнений, описывающих динамику неравновесной среды при наличии источников нагрева (накачки) и теплоотвода (охлаждения), и на их основе проведено численное моделирование динамики звуковых волн, генерируемых локальным источником возмущений, и исследованы основные стадии эволюции акустической неустойчивости в неравновесной среде. Показано, что линейный режим с экспоненциальным законом роста амплитуды возмущений хорошо согласуется с линейным анализом устойчивости, а на нелинейной стадии развития акустической неустойчивости происходит формирование пилообразной системы слабых ударных волн, из которых в результате дальнейшей эволюции образуется квазистационарная система ударно-волновых импульсов (УВИ) большой интенсивности. Доказано, что эти УВИ являются автоволнами или ударно-автоволновыми импульсами (УАВИ), поскольку могут возникать при различных типах начальных возмущений и иметь одинаковую структуру, определяемую только параметрами неравновесной среды. Показано, что в неравновесном химически активном газе УАВИ могут инициировать управляемое образование детонационных волн высокой интенсивности (§ 4.3).

10. На основе параллельных CUDA-алгоритмов CSPH-TVD/MUSCL методов проведено численное моделирование динамики неравновесного колебательно-возбужденного газа в плоских каналах при различных конфигурациях структуры течения и типах начальных возмущений. Показано, что в результате взаимодей-

ствия дозвукового потока неравновесного акустически активного газа с твердой стенкой формируются ударно-автоволновые импульсы как с плоским фронтом в поперечном потоку направлении, так и с изгибно-деформированными УАВИ, на фронте которых возникают локальные максимумы газодинамических величин из-за нарастания акустически неустойчивых поперечных возмущений. Показано, что колебательная неравновесность среды значительно усиливает неустойчивости Кельвина–Гельмгольца и волноводно-резонансных мод струи, которые на нелинейной стадии эволюции приводят к формированию более интенсивных ударно-волновых и вихревых структур как в дозвуковых, так и сверхзвуковых потоках с тангенциальными разрывами скорости (§ 4.4).

11. Разработаны параллельные OpenMP-CUDA алгоритмы прямого метода (PPM — particle-particle method) расчета гравитационных сил в системе N -тел с использованием технологий GPU Direct/Host Copy для гибридных вычислительных систем (суперкомпьютеров) с несколькими графическими процессорами (GPUs) и на основе этих параллельных алгоритмов создан высокопроизводительный вычислительный модуль «N-body – CUDA» для моделирования динамики бесстолкновительных (звезды + темная материя) подсистем галактик. Исследована эффективность распараллеливания суперкомпьютерных OpenMP-CUDA-алгоритмов модуля «N-body – CUDA» и продемонстрирована их хорошая масштабируемость на различных multi-GPU платформах с общей памятью. Анализ вычислительной эффективности численного алгоритма «N-body – CUDA» показал, что из-за особенностей параллельных вычислений на GPU приемлемой (хорошей) точностью моделирования обладают только алгоритмы, основанные на вычислениях с двойной точностью (§ 5.1).

12. Разработан параллельный CUDA-алгоритм метода сглаженных частиц (SPH) и на его основе реализован вычислительный модуль «SPH – CUDA» для моделирования динамики газовых подсистем галактик. Для повышения производительности вычислений модуля «SPH – CUDA» разработан и реализован иерархический сеточный метод сортировки на основе параллельного каскадного алгоритма нахождения частичных сумм в CUDA блоке, используемый при вычислении газодинамических сил в SPH-подходе (§ 5.2). На основе модулей «N-body – CUDA» и «SPH – CUDA» создан суперкомпьютерный программный комплекс «SPH + N-body» для моделирования самосогласованной динамики многокомпонентных (газ + звезды + темная материя) гравитирующих систем галактик, в котором для существенного повышения производительности вычислений используются разные значения временных шагов при вычислении гравитационных (PPM) и газодинамических (SPH) сил между частицами (§ 5.3).

13. На основе разработанного программного обеспечения «SPH + N-body» проведено численное моделирование самосогласованной динамики многокомпонентных спиральных галактик. Построена численная модель галактики Млечный Путь, которая позволяет объяснить наблюдаемую морфологию и кинематику звездно-газового диска нашей галактики. Продемонстрировано образование долгоживущей (~ 3 млрд. лет) спиральной структуры с преобладанием неосесим-

метричных трех/четырёх рукавных мод и центрального звездного бара (§ 6.1). Показано, что в карликовых галактиках dS-типа с большим содержанием газа при определенных условиях могут формироваться бар и спиральная структура из-за развития гравитационной неустойчивости в галактическом звездно-газовом диске. Получены оценки на массу газовой компоненты, толщину и скорость вращения галактического диска, при которых возможно формирование глобального спирального узора и звездного бара в dS-галактиках (§ 6.2).

14. Результаты вычислительных экспериментов, проведенных на основе построенных численных моделей сталкивающихся многокомпонентных галактик и параллельного кода «SPH + N-body», позволяют объяснить наблюдаемую морфологию и кинематику этих гравитирующих систем, а также возникающих в них ударно-волновых структур. Продемонстрированы эффекты существенного обмена газом между двумя сталкивающимися галактическими гало (газ + темная материя) и образования конусов горячего (рентгеновского) газа за фронтом ударных волн, формирующихся при сверхзвуковом протекании газа в потенциальной гравитационной яме галактических гало (§ 6.3). Предложены сценарии образования галактик с полярными газовыми кольцами и противоположно вращающимися звездным и газовым дисками, основанные на численных моделях ретроградной аккреции межгалактического газа на звездно-газовый диск спиральной галактики (§ 6.4).

15. Проведено более 350 вычислительных экспериментов и показано, что при почти лобовом столкновении сравнимых по массе спиральных галактик могут образовываться наблюдаемые в астрофизических объектах типа Taffy газовые мосты с характерной мелкомасштабной волокнистой структурой и очагами интенсивного звездообразования. Предложены механизмы формирования компактных и ультракомпактных галактик-спутников (сЕ/UCD) около массивных спиральных галактик, основанные на численных моделях столкновения (слияния) карликовой дисковой dS-галактики с галактикой типа Млечного Пути (§ 6.5).

Основные публикации по теме диссертации

А. Публикации из перечня ВАК, Белого списка, WOS, SCOPUS:

- A1. Khrapov S., Khoperskov A. Computational Efficiency of Non-Equilibrium Reactive Gas Flows Dynamics Simulations on Multi-GPU Supercomputers: GPUDirect Vs. HostCopy // Lecture Notes in Computer Science. 2026. V. 16196. P. 64–79. https://doi.org/10.1007/978-3-032-13127-0_5 (Scopus: Q2)
- A2. Khrapov S., Radchenko V., Makoveev I., Ivanchenko G., Khoperskov A. Numerical Modeling of Acoustic Instability in Supersonic Flows of Non-equilibrium Vibrationally Excited Gas // Studies in Systems, Decision and Control. 2026. V. 624. P. 201–213. https://doi.org/10.1007/978-3-032-02544-9_15 (Scopus: Q4)
- A3. Khoperskov A., Klikunova A., Khrapov S., Popov I. Method for Determining River Flow Characteristics Based on Gauging Stations Data and Machine Learning // Studies in Systems, Decision and Control. 2026. V. 639. P. 105–116. https://doi.org/10.1007/978-3-032-06787-6_9 (Scopus: Q4)

- A4. Храпов С.С., Хоперсков А.В., Храпов Н.С. Численное моделирование ударно-волновых структур в сверхзвуковых потоках неравновесного колебательно-возбужденного газа // Журнал технической физики. 2025. Т. 95(12). С. 2285–2289. <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/61777> (Белый список: У1)
- A5. Khrapov S.S., Agafonnikova E.O., Khoperskov A.V. Prospects for Improving Computational Efficiency of Hydrodynamic Simulations on Supercomputers by Increasing the Number of GPUs per Compute Node // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2025. V. 12(2). P. 43–59. <https://doi.org/10.14529/jsfi250204> (Scopus: Q4, Белый список: У2)
- A6. Khoperskov A.V., Khrapov S.S., Savin E.S. Numerical Model for Simulations of Taffy Galaxies // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2025. V. 46(8). P. 3698–3709. <https://doi.org/10.1134/S199508022561001X> (Scopus: Q2, WoS, Белый список: У2)
- A7. Храпов С.С. Численное моделирование двумерных газодинамических течений в многокомпонентных неравновесных средах // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2025. Т. 28(1). С. 60–88. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2025.1.5> (MathSciNet, ВАК: К1, Белый список: У3)
- A8. Khrapov S.S. Nonlinear Dynamics of Acoustic Instability in a Vibrationally Excited Gas: Effect of Relaxation Time and the Structure of Shock Waves // Fluid Dynamics. 2025. V. 60. Art. 107. P. 1–26. <https://doi.org/10.1134/S0015462825602645> (Scopus: Q3, WoS: Q4, Белый список: У3)
- A9. Khrapov S.S., Khoperskov A.V. Study of the Effectiveness of Parallel Algorithms for Modeling the Dynamics of Collisionless Galactic Systems on GPUs // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2024. V. 11(3). P. 27–44. <https://doi.org/10.14529/jsfi240302> (Scopus: Q4, Белый список: У1)
- A10. Khoperskov A.V., Khrapov S.S., Klikunova A.Yu., Popov I.E. Efficiency of using gpus for reconstructing the hydraulic resistance in river systems based on combination of high performance hydrodynamic simulation and machine learning // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2024. V. 45(7). P. 3085–3096. <https://doi.org/10.1134/S199508022460376X> (RSCI, Scopus: Q2, WoS, Белый список: У2)
- A11. Khoperskov A.V., Khrapov S.S., Sirotin D.S. Formation of Transitional cE/UCD Galaxies through Massive/Dwarf Disc Galaxy Mergers // Galaxies. 2024. V. 12(1). P. 1–27. <https://doi.org/10.3390/galaxies12010001> (Scopus: Q1, WoS: Q2, Белый список: У2)
- A12. Khrapov S.S., Khoperskov A.V. Retrograde infall of the intergalactic gas onto S-galaxy and activity of galactic nuclei // Open Astronomy. 2024. V. 33(1). P. 20220231. <https://doi.org/10.1515/astro-2022-0231> (Scopus: Q4, WoS: Q4, Белый список: У3)
- A13. Храпов С.С. Газодинамические неустойчивости в неравновесной химически активной среде // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2024. Т. 27(1). С. 26–44. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2024.1.3> (MathSciNet, ВАК: К1)
- A14. Храпов С.С. Численное моделирование ударных волн в неравновесном химически активном газе // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2024. Т. 27(1). С. 86–96. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2024.1.6> (MathSciNet, ВАК: К1)
- A15. Храпов С.С. Линейная динамика акустической неустойчивости в неравновесном газе: границы устойчивости и области запрещенных частот // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2024. Т. 27(4). С. 78–92. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2024.4.6> (MathSciNet, ВАК: К1)
- A16. Khrapov S., Radchenko V., Khoperskov A. Control of the Spectrum of Unstable Acoustic Waves in a Supersonic Channel of Experimental Setup // 2024 6th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA), Lipetsk, Russian Federation. 2024. P. 988–992. <https://doi.org/10.1109/SUMMA64428.2024.10803889> (Scopus)

- A17. Radchenko V., Khrapov S., Khoperskov A. CAD Model of an Experimental Setup for Studying Acoustic Instability in a Nonequilibrium Chemically Active Medium: Optimization of the Cooling System // 2024 6th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA), Lipetsk, Russian Federation. 2024. P. 533–538. <https://doi.org/10.1109/SUMMA64428.2024.10803831> (Scopus)
- A18. Khrapov S.S. Nonlinear Dynamics of Acoustic Instability in a Vibrationally Excited Gas: Influence of Heating and Cooling // Fluid Dynamics. 2024. V. 59. N 4. P. 899–915. <https://doi.org/10.1134/S0015462824602584> (Scopus: Q3, WoS: Q4, Белый список: У3)
- A19. Khrapov S.S., Ivanchenko G.S., Radchenko V.P., Titov A.V. Numerical modeling of acoustic instability in a nonequilibrium vibrationally excited gas // Technical Physics. 2024. V. 69. N 6. P. 1596–1601. <https://doi.org/10.1134/S1063784224060173> (Scopus: Q4, WoS: Q4, Белый список: У2)
- A20. Khrapov S.S., Khoperskov A.V., Zaitseva N.A., Zasov A.V., Titov A.V., Formation of spiral dwarf galaxies: observational data and results of numerical simulation // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2023. V. 16(S1.2). P. 395–402. <https://doi.org/10.18721/JPM.161.260> (Scopus: Q4, WoS, Белый список: У4)
- A21. Храпов С.С., Иванченко Г.С., Радченко В.П., Маковеев И.С. Динамика малых возмущений в неравновесном колебательно-возбужденном газе // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2023. Т. 26(4). С. 83–105. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.4.7> (MathSciNet, ВАК: К3)
- A22. Khrapov S.S. Numerical Modeling of Hydrodynamic Accidents: Erosion of Dams and Flooding of Territories // Vestnik St.Petersb. Univ.Math. 2023. V. 56. P. 261–272. <https://doi.org/10.1134/S1063454123020085> (Scopus: Q4, WoS, Белый список: У4)
- A23. Savin E., Asrankulov A., Khrapov S., Khoperskov A. Simulation of Free-Surface Fluid Dynamics: Parallelization for GPUs // Lecture Notes in Computer Science. 2023. V. 14388. P. 217–231. https://doi.org/10.1007/978-3-031-49432-1_17 (Scopus: Q2)
- A24. Klikunova A.Yu., Polyakov M.V., Khrapov S.S., Khoperskov A.V. Problem of building high-quality predictive model of river hydrology: the combined use of hydrodynamic simulations and intelligent computing // Communications in Computer and Information Science. 2023. V. 1909. P. 191–205. https://doi.org/10.1007/978-3-031-44615-3_13 (Scopus: Q4)
- A25. Храпов С.С., Агафонникова Е.О., Кликунова А.Ю., Радченко В.П., Баскаков Е.В., Савин Е.С., Маковеев И.С., Храпов Н.С. Численное моделирование самосогласованной динамики поверхностных вод, влекомых и взвешенных наносов: I. Влияние промышленной добычи песка // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2022. Т. 25(3). С. 31–57. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2022.3.3> (MathSciNet, ВАК: К3)
- A26. Храпов С.С. Численное моделирование самосогласованной динамики поверхностных вод, влекомых и взвешенных наносов: II. Исследование поперечных деформаций русла и перераспределения расходов воды по рукавам р. Волги при промышленной добычи песка // Математическая физика и компьютерное моделирование. 2022. Т. 25(4). С. 52–65. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2022.4.5> (MathSciNet, ВАК: К3)
- A27. Khrapov S., Khoperskov A., Korchagin V. Modeling of Spiral Structure in a Multi-Component Milky Way-Like Galaxy // Galaxies. 2021. V. 9(2). id. 29. P. 1–28. <https://doi.org/10.3390/galaxies9020029> (Scopus/WoS: Q2)
- A28. Zasov A.V., Khoperskov A.V., Zaitseva N.A., Khrapov S.S. On the formation of spiral arms in dwarf galaxies // Astronomy Reports. 2021. V. 65(12). P. 1215–1232. <https://doi.org/10.1134/S106377292112009X> (Scopus/WoS: Q3)
- A29. Khoperskov S., Zinchenko I., Avramov B., Khrapov S., Berczik P., Saburova A., Ishchenko M., Khoperskov A., Pulsoni C., Venichenko Yu., Bizyaev D., Moiseev A. Extreme kinematic

- misalignment in IllustrisTNG galaxies: the origin, structure, and internal dynamics of galaxies with a large-scale counterrotation // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2021. V. 500(3). P. 3870–3888. <https://doi.org/10.1093/mnras/staa3330> (Scopus/WoS: Q1)
- A30. Titov A., Khoperskov A. and Khrapov S. Major merging of galaxies in multicomponent numerical models: mass loss and exchange // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. V. 2103. id. 012041. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2103/1/012041> (Scopus)
- A31. Храпов С.С. Численное моделирование самосогласованной динамики поверхностных и грунтовых вод // *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2021. Т. 24(3). С. 45–62. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2021.3.5> (MathSciNet, BAK)
- A32. Khrapov, S.S., Khoperskov, A.V. Application of Graphics Processing Units for Self-Consistent Modelling of Shallow Water Dynamics and Sediment Transport // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2020. V. 41. P. 1475–1484. <https://doi.org/10.1134/S1995080220080089> (Scopus: Q3)
- A33. Khoperskov S., Gerhard O., Di Matteo P., Haywood M., Katz D., Khrapov S., Khoperskov A., Arnaboldi M. Hic sunt dracones: Cartography of the Milky Way spiral arms and bar resonances with Gaia Data Release 2 // *Astronomy & Astrophysics Letters*. 2020. V. 634(L8). P. 1–9. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201936645> (Scopus/WoS: Q1)
- A34. Khrapov S., Khoperskov A., Khoperskov S. Lagrange-Eulerian method for numerical integration of the gas dynamics equations: parallel implementation on GPUs // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. V. 1392. id. 012041. P. 1–6. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1392/1/012041> (Scopus)
- A35. Khrapov S.S., Khoperskov A.V., Korchagin V.V. Numerical Modelling of the Dynamics of the Galactic Halos in the Colliding Galaxies // *Bulletin of the South Ural State University Series-Mathematical Modelling Programming & Computer Software*. 2019. V. 12. N 2. P. 123–135. <https://doi.org/10.14529/mmp190210> (Scopus/WoS: Q3)
- A36. Titov A., Khrapov S., Radchenko V., Khoperskov A. Aerodynamic Models of Complicated Constructions Using Parallel Smoothed Particle Hydrodynamics // *Communications in Computer and Information Science*. 2019. V. 965. P. 173–184. https://doi.org/10.1007/978-3-030-05807-4_15 (Scopus/WoS: Q3)
- A37. Butenko M.A., Khoperskov A.V., Khrapov S.S. Modeling stellar-gaseous disks: rows in spiral patterns of galaxies // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. V. 1203. id. 012062. P. 1–10. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1203/1/012062> (Scopus)
- A38. Klikunova A.Yu., Khoperskov A.V., Agafonnikova E.O., Kuz'mich A.S., Dyakonova T.A., Khrapov S.S., Gusev I.M. Creation of cadastral maps of flooding based on numerical modeling // *Journal of Computational and Engineering Mathematics*. 2019. T. 6(2). С. 3–17. <https://doi.org/10.14529/jcem190201> (MathSciNet, BAK)
- A39. Khoperskov S.A., Venichenko Yu.A., Khrapov S.S., Vasiliev E.O. High performance computing of magnetized galactic disks // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2018. V. 5(4). P. 103–106. <https://doi.org/10.14529/jsfi180412> (Scopus: Q4)
- A40. Khrapov S.S., Khoperskov S.A., Khoperskov A.V. New features of parallel implementation of N-body problems on GPU // *Bulletin of the South Ural State University, Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*. 2018. V. 11(1). P. 124–136. <https://doi.org/10.14529/mmp180111> (Scopus/WoS: Q3)
- A41. Khrapov S., Khoperskov A. Dynamics of unstable sound waves in a non-equilibrium medium at the nonlinear stage // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. V. 973. id. 012007. P. 1–11. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/973/1/012007> (Scopus)

- A42. Khoperskov S.A., Khrapov S.S. Global enhancement and structure formation of the magnetic field in spiral galaxies // *Astronomy & Astrophysics*. 2018. V. 609. id. A104. P. 1–15. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201629988> (Scopus/WoS: Q1)
- A43. Khrapov S., Khoperskov A. Smoothed-particle hydrodynamics models: implementation features on GPUs // *Communications in Computer and Information Science*. 2017. V. 793. P. 266–277. https://doi.org/10.1007/978-3-319-71255-0_21 (Scopus/WoS: Q3)
- A44. Khoperskov S.A., Vasiliev E.O., Khrapov S.S. GMCs in Galactic scale simulations // *Memorie della Societa Astronomica Italiana – Journal of the Italian Astronomical Society*. 2017. V. 88. P. 739–740. (Scopus)
- A45. Кузьмин Н.М., Мусцовой В.В., Храпов С.С. Гидродинамический механизм формирования и коллимации струй в молодых звездных объектах // *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2017. Т. 20(6). С. 51–62. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2017.6.5> (MathSciNet, ВАК)
- A46. Преснякова А.Н., Писарев А.В., Храпов С.С. Исследование динамики затопления территории Волго-Ахтубинской поймы по данным космического мониторинга // *Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 1: Математика. Физика*. 2017. N 1(38). С. 66–74. <https://doi.org/10.15688/jvolsu1.2017.1.7> (ВАК)
- A47. Dyakonova T., Khoperskov A., Khrapov S. Numerical Model of Shallow Water: The Use of NVIDIA CUDA Graphics Processors // *Communications in Computer and Information Science*. 2016. V. 687. P. 132–145. https://doi.org/10.1007/978-3-319-55669-7_11 (Scopus/WoS: Q3)
- A48. Дьяконова Т.А., Храпов С.С., Хоперсков А.В. Проблема граничных условий для уравнений мелкой воды // *Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки*. 2016. Т. 26(3). С. 401–417. <https://doi.org/10.20537/vm160309> (Scopus)
- A49. Воронин А.А., Васильченко А.А., Писарев А.В., Храпов С.С., Радченко Ю.Е. Проектирование механизмов управления гидрологическим режимом Волго-Ахтубинской поймы на основе геоинформационного и гидродинамического моделирования // *Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 1: Математика. Физика*. 2016. N 1(32). С. 24–37. <https://doi.org/10.15688/jvolsu1.2016.1.3> (ВАК)
- A50. Дьяконова Т.А., Хоперсков А.В., Храпов С.С. Компьютерное моделирование динамики затопления территорий в случае чрезвычайных ситуаций с использованием технологий параллельных вычислений // *Кибернетика и программирование*. 2016. N 3. С. 17–34. <https://doi.org/10.7256/2306-4196.2016.3.18235> (ВАК)
- A51. Агафонникова Е.О., Хоперсков А.В., Храпов С.С. Проблема прогноза и управления гидрологическим режимом на горной территории в период ливневого паводка на основе гидродинамических численных экспериментов // *Кибернетика и программирование*. 2016. N 3. С. 35–53. <https://doi.org/10.7256/2306-4196.2016.3.18855> (ВАК)
- A52. Храпов С.С., Кузьмин Н.М., Бутенко М.А. Сравнение точности и сходимости для метода CSPH - TVD и некоторых эйлеровых схем для решения уравнений газодинамики // *Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 1: Математика. Физика*. 2016. N 6(37). С. 166–173. <https://doi.org/10.15688/jvolsu1.2016.6.15> (ВАК)
- A53. Воронин А.А., Васильченко А.А., Писарева М.В., Писарев А.В., Хоперсков А.В., Храпов С.С., Подщипкова Ю.Е. Проектирование системы эколого-экономического управления территорией Волго-Ахтубинской поймы на основе гидродинамического и геоинформационного моделирования // *Управление большими системами: сборник трудов*. 2015. N 55. С. 79–102. (ВАК)
- A54. Воронин А.А., Васильченко А.А., Храпов С.С., Агафонникова Е.О. Анализ эффективности природовосстановительных проектов в эколого-экономической системе «Волжская ГЭС — Волго-Ахтубинская пойма» // *Управление большими системами: сборник трудов*. 2014. N 52. С. 133–147. (ВАК)

- A55. Khrapov S., Pisarev A., Kobelev I., Zhumaliev A., Agafonnikova E., Losev A., Khoperskov A. The Numerical Simulation of Shallow Water: Estimation of the Roughness Coefficient on the Flood Stage // *Advances in Mechanical Engineering*. 2013. V. 2013. id. 787016. P. 1–11. <https://doi.org/10.1155/2013/787016> (Scopus/WoS: Q2)
- A56. Khoperskov A.V., Khoperskov S.A., Zasov A.V., Bizyaev D.V., Khrapov S.S. Interaction between collisionless galactic discs and nonaxisymmetric dark matter haloes // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2013. V. 431(2). P. 1230–1239. <https://doi.org/10.1093/mnras/stt245> (Scopus/WoS: Q1)
- A57. Писарев А.В., Храпов С.С., Агафонникова Е.О., Хоперсков А.В. Численная модель динамики поверхностных вод в русле Волги: оценка коэффициента шероховатости // *Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки*. 2013. N 1. С. 114–130. (БАК)
- A58. Воронин А.А., Елисеева М.В., Храпов С.С., Писарев А.В., Хоперсков А.В. Задача управления гидрологическим режимом в эколого-экономической системе «Волжская ГЭС – Волго-Ахтубинская пойма». Ч. 2. Синтез системы управления // *Проблемы управления*. 2012. N 6. С. 19–25. (БАК)
- A59. Хоперсков А.В., Храпов С.С., Писарев А.В., Воронин А.А., Елисеева М.В., Кобелев И.А. Задача управления гидрологическим режимом в эколого-экономической системе «Волжская ГЭС – Волго-Ахтубинская пойма». Ч.1. Моделирование динамики поверхностных вод в период весеннего паводка // *Проблемы управления*. 2012. N 5. С. 18–25. (БАК)
- A60. Воронин А.А., Елисеева М.В., Писарев А.В., Хоперсков А.В., Храпов С.С. Имитационные модели динамики поверхностных вод с использованием данных дистанционного зондирования: влияние рельефа местности // *Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии*. 2012. N 3(19). С. 54–62. (БАК)
- A61. Храпов С.С., Хоперсков А.В., Кузьмин Н.М., Писарев А.В., Кобелев И.А. Численная схема для моделирования динамики поверхностных вод на основе комбинированного SPH-TVD-подхода // *Вычислительные методы и программирование*. 2011. Т. 12(2). С. 282–297. (БАК)
- A62. Bisengaliev R.A., Esina Ya.V., Kuz'min N.M., Mustsevoi V.V., Khrapov S.S. Beats of magnetohydrodynamical and Rossby waves and their possible effect on the formation of solar cyclicity // *Astrophysical Bulletin*. 2010. V. 65(3). P. 256–268. <https://doi.org/10.1134/S1990341310030077> (Scopus/WoS: Q4)
- A63. Afanasiev, V. L.; Dodonov, S. N.; Khrapov, S. S.; Mustsevoi, V. V.; Moiseev, A. V. Formation of ionization-cone structures in active galactic nuclei: I. Stationary model and linear stability analysis // *Astrophysical Bulletin*. 2007. V. 62(1). P. 1–14. <https://doi.org/10.1134/S1990341307010014> (Scopus/WoS)
- A64. Afanasiev V.L., Dodonov S.N., Khrapov S.S., Mustsevoi V.V., Moiseev A.V. Formation of ionization-cone structures in active galactic nuclei: II. Nonlinear hydrodynamic modelling // *Astrophysical Bulletin*. 2007. V. 62(1). P. 15–25. <https://doi.org/10.1134/S1990341307010026> (Scopus/WoS)
- A65. Kuz'min N.M., Mustsevoi V.V., Khrapov S.S. Numerical modeling of the evolution of unstable modes of jets from young stellar objects // *Astronomy Reports*. 2007. V. 51. N 12. P. 985–993. <https://doi.org/10.1134/S1063772907120037> (Scopus/WoS-Q3)
- A66. Khoperskov A.V., Khrapov S.S. Computer modeling of non-stationary gas quasi-Keplerian disk / Ed.: A.M.Fridman et al. // *Astrophysics and Space Science Library*, Springer. 2006. V. 337. P. 217–229. https://doi.org/10.1007/1-4020-4348-1_12 (WoS)
- A67. Khoperskov A.V., Khrapov S.S. Self-Consistent Gas and Stellar Dynamics of Disk Galaxies: A Problem of Dark Mass / Ed.: A.M.Fridman et al. // *Astrophysics and Space Science Library*, Springer. 2006. V. 337. P. 337–343. https://doi.org/10.1007/1-4020-4348-1_21 (WoS)

- A68. Khrapov S.S., Mustsevoi V.V. Numerical simulation of expanding shock waves in the young stars objects / Ed.: A.M.Fridman et al. // *Astrophysics and Space Science Library*, Springer. 2006. V. 337. P. 345–351. (doi.org/10.1007/1-4020-4348-1_22) (WoS)
- A69. Khoperskov A.V., Khrapov S.S., Nedugova E.A. Dissipative-Acoustic Instability in Accretion Disks at a Nonlinear Stage // *Astronomy Letters*. 2003. V. 29(4). P. 246–257. <https://doi.org/10.1134/1.1564856> (Scopus/WoS: Q3)
- A70. Moiseev A., Afanasiev V.L., Dodonov S.N., Mustsevoi V.V., Khrapov S.S. Integral-Field Spectroscopy of the Ionized Cones in Seyfert Galaxies / Edit: M. Rosado, L. Binnette, L. Arias // *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*. 2002. V. 282. P. 340–341. (WoS)
- A71. Moiseev A.V., Afanasiev V.L., Dodonov S.N., Mustsevoi V.V., Khrapov S.S. Helical structures in Seyfert galaxies / Edited by: R.F. Green, E.Y. Khachikian, D.B. Sanders // *AGN Surveys, Proceedings of IAU Colloquium 184, ASP Conference Proceedings, Astronomical Society of the Pacific Conference Series*. 2002. V. 284. P. 367–368. <https://doi.org/10.1017/S0252921100031067> (WoS)
- A72. Khoperskov, A. V.; Khrapov, S. S. Instability of high-frequency acoustic waves in accretion disks with turbulent viscosity // *Astronomy and Astrophysics*. 1999. V. 345(5). P. 307–314. (Scopus/WoS Q1)
- A73. Khoperskov A.V., Khrapov S.S. Instability of thermal, viscous, and acoustic modes in thin accretion disks // *Astronomy Reports*. 1999. V. 43(4). P. 216–228. (Scopus/WoS: Q3)
- A74. Levin K.A., Mustsevoi V.V., Khrapov S.S. Jets and disks around young stars // *Astronomy Reports*. 1999. V. 43(2). P. 104–112. (Scopus/WoS: Q3)

В. Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ и баз данных

- B1. Храпов С.С. Параллельная CUDA-версия программы для численного моделирования динамики двумерных течений неравновесного колебательно-возбужденного газа // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2025693630 от 01.12.2025.
- B2. Храпов С.С. Параллельная OpenMP-версия программы для моделирования газодинамических течений в неравновесном химически активном газе // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024689457 от 06.12.2024.
- B3. Храпов С.С. Программа для моделирования газодинамических течений в неравновесном химически активном газе // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024689190 от 04.12.2024.
- B4. Храпов С.С. Параллельная CUDA-версия программы для численного моделирования столкновений многокомпонентных галактик // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024690464 от 16.12.2024.
- B5. Храпов С.С. Программа для моделирования нелинейной динамики акустической неустойчивости в неравновесном газе // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2023686079 от 04.12.2023.
- B6. Храпов С.С. Параллельная OpenMP-CUDA-версия программы для моделирования динамики самогравитирующих галактических дисков // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2023685580 от 28.11.2023.
- B7. Храпов С.С. Параллельная CUDA-версия программы для моделирования совместной динамики поверхностных и грунтовых вод, влекомых и взвешенных наносов // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023686828 от 08.12.2023.

- В8. Храпов С.С. Параллельная CUDA-версия программы для исследования эволюции звездно-газовых галактических дисков в модели модифицированной ньютоновской динамики (MOND) // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022684815 от 14.12.2022.
- В9. Храпов С.С. Параллельная CUDA-версия программы для моделирования самосогласованной динамики поверхностных вод и наносов // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022168175 от 07.12.2021.
- В10. Титов А.В., Храпов С.С., Хоперсков А.В. Программный комплекс для расчета газодинамических течений внутри сложных инженерных сооружений с использованием графических ускорителей // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2021610469 от 14.01.2021.
- В11. Храпов С.С. Параллельная CUDA-версия программы для моделирования самосогласованной динамики газовой и бесстолкновительной компонент галактик // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665338 от 22.11.2019.
- В12. Дьяконова Т.А., Храпов С.С. Параллельная CUDA-версия программы для численного моделирования гидродинамических течений на основе CSPH-TVD метода // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016610820 от 19.01.2016.
- В13. Курцев П.А., Храпов С.С. Компонент программного комплекса «ЭкоГИС-2» для создания и редактирования цифровых моделей местности // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014617896 от 06.08.2014.
- В14. Кузьмин Н.М., Храпов С.С., Хоперсков А.В. База данных гидрологического мониторинга Волго-Ахтубинской поймы // Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2014620449 от 19.03.2014.
- В15. Кузьмин Н.М., Храпов С.С., Хоперсков А.В. База данных актуализированной цифровой модели рельефа Волго-Ахтубинской поймы // Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2014620448 от 19.03.2014.
- В16. Малярчук Ю.Д., Храпов С.С. Специализированная геоинформационная система для моделирования динамики воздушных потоков на территориях с антропогенной застройкой // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013616685 от 16.07.2013.
- В17. Храпов С.С., Писарев А.В., Воронин А.А., Хоперсков А.В. Программный комплекс для численного моделирования поверхностных вод на основе комбинированного лагранжево-эйлерова метода cSPH-TVD // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012614040 от 03.05.2012.
- В18. Агафонникова Е.О., Храпов С.С. Специализированная геоинформационная система для моделирования гидродинамических течений в водоемах // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012615601 от 20.06.2012.
- В19. Кобелев И.А., Храпов С.С., Хоперсков А.В. Программа для 3D-визуализации результатов моделирования динамики поверхностных вод для заданной территории // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011616157 от 05.08.2011.
- В20. Кобелев И.А., Храпов С.С., Хоперсков А.В. Программное приложение для двумерной визуализации результатов моделирования динамики поверхностных вод на неоднородном рельефе дна // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011616156 от 05.08.2011.
- В21. Кобелев И.А., Хоперсков А.В., Храпов С.С. Специализированная геоинформационная система EcoGIS-Simulation 1.0 для управления компьютерным моделированием в задачах мониторинга и прогнозирования состояния атмосферы и гидросферы // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011615987 от 02.08.2011.

Научное издание

Храпов Сергей Сергеевич

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора технических наук на тему:

Эффективные численные методы и суперкомпьютерные алгоритмы для
математического моделирования динамики многокомпонентных сплошных сред

Подписано в печать «____» _____ 2026 г.
Формат 60 × 90 1/16. Тираж 100 экз. Заказ _____.

Издательство Волгоградского государственного университета. 400062, Волгоград,
пр-т Университетский, 100, <http://www.volsu.ru>