

На правах рукописи

Рыбаков Алексей Анатольевич

**Методы и средства
повышения производительности программ
для моделирования объектов со сложной геометрией**

Специальность 2.3.5 –
«Математическое и программное обеспечение вычислительных систем,
комплексов и компьютерных сетей»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора технических наук

Москва – 2026

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт».

Официальные оппоненты: **Сухомлин Владимир Александрович**
доктор технических наук, профессор, профессор кафедры информационной безопасности Факультета вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова»

Марченко Михаил Александрович
доктор физико-математических наук, профессор РАН, директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук»

Востокин Сергей Владимирович
доктор технических наук, доцент, профессор кафедры программных систем Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева»

Ведущая организация: Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук»

Защита состоится 12 ноября 2026 г. в 15-00 на заседании диссертационного совета 24.1.120.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте системного программирования им. В. П. Иванникова Российской академии наук по адресу: 115035, г. Москва, ул. Садовническая, д. 41, ст. 2.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института системного программирования им. В. П. Иванникова Российской академии наук.

Автореферат разослан «_____» _____ 2026 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.120.01,
кандидат физико-математических наук

Турдаков Д. Ю.

Общая характеристика работы

Актуальность

Высокопроизводительные вычисления широко применяются в научных исследованиях и промышленных разработках, они необходимы для обеспечения технологического лидерства Российской Федерации. Вопросы создания и эффективного использования высокопроизводительных вычислительных систем актуальны и соответствуют национальным целям и приоритетам научно-технологического развития Российской Федерации, в частности переходу к передовым технологиям проектирования и создания высокотехнологичной продукции на основе интеллектуальных производственных решений, роботизированных и высокопроизводительных вычислительных систем, новых материалов и химических соединений, результатов обработки больших объемов данных, технологий машинного обучения и искусственного интеллекта.

Компьютерное моделирование физических процессов (газовая динамика, электромагнетизм, термодинамика и другие) в трехмерном пространстве относится к наиболее ресурсоемким научно-техническим задачам, связанным с высокопроизводительными вычислениями. Актуально развитие мультифизического моделирования совокупности сопряженных одновременно протекающих физических процессов. В современных задачах особый интерес представляет моделирование объектов и областей со сложной геометрией, так как это позволяет повысить качество и точность описания исследуемых объектов.

Объекты и области со сложной геометрией встречаются во многих научно-практических задачах: обтекание тел, многофазные течения, течения в пористых средах, потоки с наличием взвеси частиц, движение воды над неровным дном, процессы в толще грунта или льда со сложными внешними границами. Эти задачи характеризуются тем, что в расчетной области присутствуют подобласти, разделенные границами (поверхностями), имеющими сложную форму. Границы могут быть поверхностью твердого тела или разделять фазы многофазного течения, они могут перемещаться в расчетной области или видоизменяться и перестраиваться (*эволюционировать*). Вычисления проводятся, как правило, с использованием расчетных сеток, которые могут описывать как область трехмерного пространства (объемные сетки), так и расположенную в пространстве поверхность (поверхностные сетки).

Для численного решения задач со сложной геометрией применяются различные подходы. Использование неструктурированных сеток позволяет описать расчетную область произвольной сложности, однако они менее предпочтительны по сравнению со структурированными с точки зрения построения расчетных схем повышенной точности и производительности вычислений. Для решения широкого класса научно-практических задач применяются бессеточные методы, в которых вместо расчетных сеток используются наборы произвольно распределенных узлов или частиц. При решении задач со сложной геометрией могут использоваться структурированные криволинейные сетки, согласующиеся с границей расчетной области, требующие больших

вычислительных затрат для их построения. С точки зрения эффективности вычислений наиболее предпочтительно использование простых декартовых сеток. В этом случае необходимо выполнять аппроксимацию краевых условий на криволинейных границах с помощью таких методов, как метод свободной границы, метод объема жидкости, метод погруженной границы и других. Организация данных внутри блочно-структурированных сеток в виде наборов многомерных массивов и инвариантность вычислительных шаблонов для ячеек таких сеток позволяют организовывать вычисления с высокой степенью параллелизма на всех уровнях: на уровне суперкомпьютера – на распределенной памяти, на уровне вычислительного узла – на общей памяти и на уровне отдельного ядра или исполнительного устройства – векторизация.

Сложная граница расчетной области может быть описана через адаптацию объемной расчетной сетки, как это реализовано в программном комплексе FlowVision, однако более распространенным решением является ее представление в виде поверхностной сетки (ЛОГОС, ANSYS). Для многих приложений характерно изменение геометрии области расчета, ограниченной поверхностной сеткой. При этом происходит эволюция поверхностной сетки, описывающей границу области расчета, – сдвиг узлов сетки в соответствии с логикой приложения. В результате изменения геометрии поверхностной сетки возникает необходимость выполнения ее коррекции ввиду понижения качества отдельных элементов и возникновения дефектов. Производительность расчетов при моделировании объектов со сложной геометрией тесно связана с надежностью программы перестроения сетки – ее способностью выполнять свои функции в соответствии с требованиями¹. Повышение надежности программы направлено на предотвращение перехода сетки в некорректное состояние из-за возникновения и накопления дефектов. Перестроение сетки, сохраняющее ее корректное состояние, позволяет продолжить проведение компьютерного моделирования, увеличивая таким образом *моделируемое физическое время* процесса (моделирование более длительного отрезка времени без возникновения аварийной ситуации).

Развитие вычислительной техники, перспективных параллельных архитектур и средств программирования открывают широкие возможности для разработки приложений компьютерного моделирования и повышения производительности расчетов. Специфика новых появляющихся программно-аппаратных средств высокопроизводительных вычислений требует развития математического аппарата для их эффективного использования.

Таким образом, для моделирования объектов со сложной геометрией актуальны исследования, направленные на создание методов и средств организации вычислений на структурированных и неструктурированных сетках, трансформации поверхностных сеток, описывающих границу расчетной области, и повышения надежности и производительности вычислений. В работе рассматриваются математические методы, архитектурные решения и

¹ГОСТР МЭК 62628-2021 Надежность в технике. Руководство по обеспечению надежности программного обеспечения.

программные средства организации высокопроизводительных вычислений на объемных блочно-структурированных и поверхностных неструктурированных сетках, перестроения и коррекции поверхностных неструктурированных сеток, повышения производительности вычислений на всех уровнях распараллеливания: на распределенной и общей памяти, векторизация вычислений. Предложенные методы и средства повышения производительности программ направлены на использование при решении широкого спектра задач компьютерного моделирования. Постоянно возрастающие требования, предъявляемые к точности и комплексности расчетов при моделировании объектов со сложной геометрией, а также развитие программно-аппаратных технических средств, используемых в расчетах, определяют актуальность работы.

Настоящее исследование опирается на работы известных отечественных и зарубежных ученых, оказавших существенное влияние на развитие суперкомпьютерных технологий, их применение, включая создание методов, алгоритмов и программного обеспечения для организации и повышения производительности вычислений, в частности на труды А. Н. Тихонова, А. А. Самарского, Г. И. Марчука, С. К. Годунова, Б. Н. Четверушкина, Н. С. Бахвалова в области вычислительных методов и алгоритмов, Г. И. Савина, Е. Е. Тыртышникова, Ю. В. Василевского, W. Nabashi, Ch. S. Peskin в области методов моделирования сложных процессов и систем, В. П. Иванникова, А. И. Аветисяна, В. В. Воеводина, Вл. В. Воеводина, М. В. Якобовского, И. А. Соколова, Б. М. Шабанова, А. Н. Томилина в области создания и использования высокопроизводительных вычислительных систем и организации вычислений, В. А. Мельникова, В. К. Левина, Б. А. Бабаяна, А. К. Кима, В. Ю. Волконского, J. Jeffers в области разработки и применения новых перспективных архитектур для высокопроизводительных вычислений, В. Ф. Тишкина, В. А. Гаранжи, В. Д. Лисейкина, Д. Л. Ревизникова, X. Jiao в области вычислительной геометрии и управления расчетными сетками.

Цель и задачи работы

Целью работы является разработка комплекса математических методов и алгоритмов для повышения производительности вычислений при моделировании объектов со сложной геометрией на современных параллельных вычислительных системах.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе необходимо решить следующие **задачи**:

- Разработать архитектуру и состав программного комплекса, реализующего математические методы и алгоритмы, применяемые для моделирования объектов со сложной геометрией с использованием высокопроизводительных вычислительных систем.
- Разработать методы перестроения и коррекции поверхностной неструктурированной сетки, описывающей границы расчетных подобластей, для увеличения моделируемого физического времени при моделировании объектов со сложной геометрией.

- Разработать решения по повышению производительности параллельных вычислений на объемных блочно-структурированных и поверхностных неструктурированных сетках, проводимых при расчетах в подобластях со сложной геометрией и на их границах.
- Разработать методы векторизации программного кода для повышения производительности вычислений на современных параллельных вычислительных системах, применимые к широкому классу приложений.

Методология и методы исследования

Математическую основу исследования составляют методы организации и повышения эффективности высокопроизводительных вычислений, методы вычислительной геометрии, теории графов, теории алгоритмов, теории комбинаторной оптимизации, теории эквивалентных преобразований программ. Для анализа и обоснования эффективности алгоритмов использовались модельные объекты, метод статистических испытаний и вычислительные эксперименты на суперкомпьютерных системах различных архитектур.

Научная новизна

- Разработан и реализован в программных кодах комплекс математических методов и алгоритмов для повышения производительности вычислений при моделировании объектов со сложной геометрией, ориентированный на применение на современных параллельных вычислительных системах и объединяющий в себе решения по перестроению и коррекции поверхностной неструктурированной сетки, описывающей границы расчетных подобластей, а также по распараллеливанию вычислений, выполняемых на объемных и поверхностных сетках.
- Разработан метод окрестностей перестроения поверхностной неструктурированной сетки, основанный на поиске пересечения траектории смещения узла с границей окрестности инцидентных узлу ячеек и обладающий способностью сглаживания локальных дефектов для предотвращения их накопления.
- Разработан метод удаления самопересечений поверхностной неструктурированной сетки с треугольными ячейками, основанный на обходе ее внешней поверхности, которая определяется направлениями внешних нормалей ячеек.
- Разработан трехмерный метод погруженной границы с фиктивными ячейками, являющийся обобщением двумерного случая и основанный на аппроксимации физических величин в фиктивной ячейке по трем точкам пространства и направлению нормали в точке на границе.
- Разработаны архитектура объемной блочно-структурированной сетки и методы распределения блоков сетки по вычислительным процессам с использованием дробления блоков для распараллеливания вычислений на распределенной памяти.

- Разработан метод сглаживания границ между доменами декомпозированной поверхностной неструктурированной сетки, позволяющий из множества локальных шаблонов сглаживания границы между парой доменов выбрать подмножество шаблонов, при одновременном применении которых обеспечивается максимальное сокращение длины границы при заданном изменении баланса ячеек между этими доменами.
- Введено понятие плоского цикла с рядом ограничений на его структуру как удобного программного контекста для векторизации вычислений, разработаны методы векторизации плоских циклов с телом произвольного вида.
- Разработана методика повышения производительности программ путем представления вычислений в виде плоских циклов, которая обеспечивает возможность объединения нескольких экземпляров подпрограммы для решения на одном процессорном ядре.

Положения, выносимые на защиту

- Комплекс математических методов и алгоритмов позволяет повысить производительность решения широкого класса ресурсоемких вычислительных задач, применяемых для моделирования объектов со сложной геометрией, с учетом особенностей архитектуры параллельной вычислительной системы.
- Метод окрестностей перестроения поверхностной неструктурированной сетки позволяет повысить надежность перестроения для увеличения моделируемого физического времени при моделировании объектов со сложной геометрией.
- Метод удаления самопересечений поверхностной неструктурированной сетки путем обхода ее внешней поверхности обеспечивает корректное состояние сетки, описывающей границу расчетной подобласти.
- Метод погруженной границы с фиктивными ячейками в трехмерной постановке позволяет проводить вычисления в расчетной подобласти со сложной границей без необходимости построения объемной сетки, согласованной с поверхностной сеткой, описывающей границу подобласти.
- Методы распределения блоков сетки по вычислительным процессам позволяют преодолеть проблему низкой производительности вычислений из-за наличия крупных блоков и снизить показатель неравномерности распределения вычислительной нагрузки между процессами.
- Метод сглаживания границ между доменами поверхностной неструктурированной сетки позволяет уменьшить длину границ и повысить тем самым производительность вычислений за счет сокращения объема межпроцессных обменов.
- Методы векторизации плоских циклов, направленные на сокращение количества операций передачи управления и повышение плотности векторных масок внутри тела плоского цикла, позволяют ускорить выполнение плоских циклов.

- Методика векторизации плоских циклов с телом произвольного вида позволяет повысить производительность вычислений на широком классе приложений.

Соответствие паспорту специальности

Диссертация соответствует следующим направлениям исследований паспорта специальности 2.3.5. «Математическое и программное обеспечение вычислительных систем, комплексов и компьютерных сетей»:

- 1. Модели, методы и алгоритмы проектирования, анализа, трансформации, верификации и тестирования программ и программных систем.
- 3. Модели, методы, архитектуры, алгоритмы, языки и программные инструменты организации взаимодействия программ и программных систем.
- 8. Модели и методы создания программ и программных систем для параллельной и распределенной обработки данных, языки и инструментальные средства параллельного программирования.

Теоретическая и практическая значимость

Метод окрестностей перестроения поверхностной неструктурированной сетки и метод удаления самопересечений вносят теоретический вклад в вычислительную геометрию и могут быть использованы для развития механизмов эволюции сетки. Алгоритмы распределения блоков сетки с использованием дробления блоков вносят теоретический вклад в решение задачи выбора наилучшего разбиения. Алгоритм сглаживания границ между доменами поверхностной неструктурированной сетки вносит теоретический вклад в решение задачи декомпозиции и может быть использован для обобщения на объемный случай. Методы векторизации программного кода вносят теоретический вклад в теорию эквивалентных преобразований программ и могут быть использованы в инструментах компиляции программ.

Комплекс решений для повышения производительности программ, включающий в себя разработанные математические методы и алгоритмы, используется при проведении расчетов по моделированию обтекания поверхностей и моделированию газодинамических течений в условиях сложных конфигураций в интересах создания новых образцов авиационной техники: моделирование обтекания фюзеляжа, несущих аэродинамических поверхностей, элементов воздухозаборных устройств летательных аппаратов, несущего и рулевого винта вертолета, моделирование газодинамических процессов в элементах силовых установок летательных аппаратов. Разработанные методы и алгоритмы реализованы в программных системах компьютерного моделирования физических процессов и обработки расчетных сеток. На основе результатов исследования созданы программные средства, которые используются для проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в ряде организаций: Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Федеральное автономное учреждение «Центральный

институт авиационного моторостроения имени П. И. Баранова», Акционерное общество «Национальный центр вертолетостроения имени М. Л. Миля и Н. И. Камова». На разработанные программные средства получено 8 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Достоверность полученных результатов

Полученные результаты реализованы в программных комплексах, используемых в научных исследованиях и промышленных расчетах. Достоверность результатов диссертации обеспечивается строгим применением используемого математического аппарата, результатами экспериментов на суперкомпьютерах различной архитектуры Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук и Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», практикой применения программного комплекса компьютерного моделирования процесса обледенения элементов авиационных силовых установок «Кристалл» и согласованностью результатов диссертации с известными из научной литературы.

Апробация диссертации

Основные результаты диссертации представлены на конференциях:

- Международная научно-техническая конференция по авиационным двигателям (ИСАМ-2025), Россия, Москва, 1-3 декабря 2025 г.
- V Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ-2016), Россия, Переславль-Залесский, Институт программных систем им. А. К. Айламазяна РАН, 29 ноября – 2 декабря 2016 г.
- VII Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ-2018), Россия, Переславль-Залесский, Институт программных систем им. А. К. Айламазяна РАН, 27-30 ноября 2018 г.
- X Национальный Суперкомпьютерный Форум (НСКФ-2021), Россия, Переславль-Залесский, Институт программных систем им. А. К. Айламазяна РАН, 30 ноября – 3 декабря 2021 г.
- I Международная научная конференция «Конвергентные когнитивно-информационные технологии», Россия, Москва, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 25-26 ноября 2016 г.
- III Международная научная конференция «Конвергентные когнитивно-информационные технологии», Россия, Москва, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 22-25 ноября 2018 г.
- XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование», Россия, Саров, Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, 3-7 октября 2016 г.
- VI всероссийская конференция «Вычислительный эксперимент в аэроакустике», Россия, Светлогорск, организатор – Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 19-24 сентября 2016 г.

- IX профессиональный слет разработчиков отечественных CFD кодов (CFD Weekend 2022), Россия, Москва, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 3-4 декабря 2022 г.
- X профессиональный слет разработчиков отечественных CFD кодов (CFD Weekend 2023), Россия, Москва, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 9-10 декабря 2023 г.
- XII профессиональный слет разработчиков отечественных CFD кодов (CFD Weekend 2025), Россия, Москва, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 29-30 ноября 2025 г.
- The Intel Xeon Phi users group Russia annual meeting (IXPUG Russia-2017), Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences (JSCC RAS), Russia, Moscow, 1-2 June 2017.

Публикации

Основные результаты диссертации изложены в 42 печатных работах, из них 30 статей [1-30] опубликованы в изданиях, рекомендованных ВАК, в том числе 20 работ [3-6, 8, 9, 11-13, 16, 17, 20-26, 29, 30] – в журналах, индексируемых базой данных RSCI, 5 работ [6, 8, 9, 11, 29] – в изданиях, отнесенных к категории К-1 Перечня ВАК, 10 работ [3, 5, 12, 13, 16, 17, 20, 24-26] – в журналах, индексируемых международными базами данных Web of Science и Scopus. По теме диссертации получено 8 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Личный вклад

Все выносимые на защиту результаты получены автором лично. Из 30 основных публикаций по теме диссертации 10 работ [1, 3, 5-7, 10, 14, 19, 29, 30] выполнены без соавторов. В основных публикациях по теме диссертации автору принадлежат: разработка и программная реализация методов для повышения эффективности расчетов в задаче моделирования обледенения [4, 16, 17], метод перестроения поверхностной сетки с помощью градиентного спуска в двумерном случае [24], метод окрестностей для решения задач вычислительной геометрии в двумерном случае [3, 14, 29], метод окрестностей перестроения поверхностной неструктурированной сетки в трехмерном случае [10, 12], методы удаления самопересечений поверхностной неструктурированной сетки в трехмерном случае [1, 12, 13], метод погруженной границы с использованием фиктивных ячеек в трехмерной постановке [11, 19], архитектура объемной блочно-структурированной сетки с поддержкой дробления блоков [30], алгоритмы распределения блоков объемной блочно-структурированной сетки между вычислительными процессами с использованием дробления блоков [25], методы декомпозиции поверхностной неструктурированной сетки [6, 18], метод сглаживания границ между доменами при декомпозиции поверхностной неструктурированной сетки [15], реализация алгоритма реберной раскраски дуального графа поверхностной неструктурированной сетки для разрешения конфликтов по доступу к данным при распараллеливании

вычислений на общей памяти [8], реализация векторизованных операций с малоразмерными матрицами для использования их в газодинамическом решателе [27, 28], методы векторизации плоских циклов с телом различного вида [5, 7, 20, 22, 23, 26], анализ эффективности векторизации плоских циклов и средства оценки логической эффективности векторизации [9, 21], методика векторизации плоских циклов с телом произвольного вида [2].

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и списка литературы. Общий объем диссертации – 337 страниц, в том числе 126 рисунков, 9 таблиц и 17 листингов. Список литературы состоит из 383 наименований.

Основное содержание работы

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи, приведены научная новизна, практическая значимость полученных результатов и защищаемые положения, рассмотрена структура диссертации.

Первая глава содержит обзор предметной области и ресурсоемких вычислительных задач, возникающих при моделировании объектов со сложной геометрией. В ней рассмотрены методы и инструменты для работы с поверхностными неструктурированными сетками, методы распараллеливания вычислений на объемных и поверхностных сетках на всех уровнях.

Раздел 1.1 посвящен использованию различных расчетных сеток при проведении вычислений, в разделе 1.2 рассматриваются подходы к распараллеливанию вычислений на структурированных, а в разделе 1.3 – на поверхностных неструктурированных сетках. В разделе 1.4 приведен обзор методов перестроения и коррекции поверхностной сетки.

Раздел 1.5 посвящен наиболее низкому уровню распараллеливания вычислений – распараллеливанию с помощью векторизации. Рассмотрена поддержка векторизации в различных архитектурах, включая x86, ARM, «Эльбрус» и другие. Сделан акцент на наборе векторных инструкций AVX-512, как на наиболее развитом современном наборе, выполнен обзор его применения.

Раздел 1.6 посвящен использованию методов искусственного интеллекта при организации высокопроизводительных вычислений для моделирования объектов со сложной геометрией. Рассмотрены методы и инструменты искусственного интеллекта, применяемые для генерации и перестроения сеток, обнаружения дефектов, моделирования физических процессов, поиска оптимальных конфигураций, генерации векторного программного кода.

Раздел 1.7 посвящен описанию задачи моделирования обледенения поверхности как представителя задач моделирования объектов со сложной геометрией. В задаче моделирования обледенения приходится иметь дело с ледяными наростами сложной формы, которые могут изменяться со временем.

Разработанные в диссертации математические методы и алгоритмы повышения производительности программ для моделирования объектов со сложной геометрией нашли свое отражение в задаче моделирования обледенения и были реализованы в программных кодах, в частности в программном комплексе расчета процесса обледенения элементов авиационных силовых установок «Кристалл», создаваемом в целях импортозамещения для получения качественной картины обледенения летательных аппаратов в интересах проектирования новых образцов авиационной техники.

В разделе описана задача моделирования обледенения, отмечена ее важность для определения летных характеристик летательных аппаратов и обеспечения безопасности полетов в условиях обледенения. Отмечена комплексность и мультифизичность задачи, проведение вычислений в которой состоит из отдельных стадий, выполняющихся циклически, содержащих различные решатели, и в которых результаты вычислений на одной стадии являются входными данными для работы следующей стадии (рис. 1).

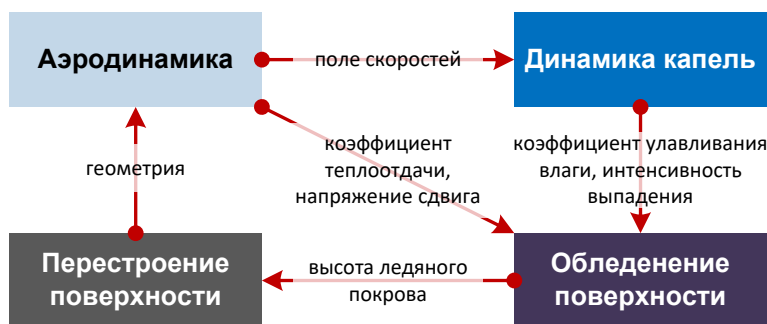


Рис. 1. Схема многостадийного расчета обледенения и передачи расчетных данных между стадиями “Аэродинамика” → “Динамика капель” → “Обледенение поверхности” → “Перестроение поверхности” ...

На стадии “Аэродинамика” рассчитывается аэродинамическое поле вокруг обледеневающего тела. На стадии “Динамика капель” определяется движение влаги и ледяных кристаллов в аэродинамическом поле. На стадии “Обледенение поверхности” выполняется расчет состояния воды и льда в ячейках расчетной сетки согласно используемой модели обледенения. На стадии “Перестроение поверхности” выполняется перестроение сетки, описывающей поверхность льда согласно вычисленному количеству льда в ячейках.

Стадия “Обледенение поверхности” является центральной в задаче моделирования обледенения, на этой стадии в каждой ячейке выполняется моделирование одновременно протекающих физических процессов (выпадение влаги, взаимодействие жидкости и льда, течение жидкости по поверхности льда, таяние и испарение, подплавление льда снизу и другие), которые необходимо учитывать для получения адекватной картины обледенения.

Стадия “Перестроение поверхности” может включать в себя *локальное перестроение* и *глобальное перестроение* поверхностной сетки, описывающей поверхность льда. При локальном перестроении сетки ее узлы смещаются

в направлении роста льда таким образом, чтобы заметаемый при движении каждой отдельной ячейкой объем пространства (*фактический объем*) соответствовал объему накопленного в ячейке льда (*целевой объем*). Направление роста льда для узла сетки определяется, как правило, как среднее между направлениями нормалей инцидентных ячеек, что известно под названием перестроения сетки *методом биссектрис*. Локальное перестроение приводит к понижению качества сетки, возникновению и накоплению дефектов, поэтому для обеспечения надежности перестроения сетки требуется выполнять глобальное перестроение, заключающееся в сглаживании сетки по различным показателям, удалении возникших дефектов, самопересечений, вплоть до полного перестроения сетки. Глобальное перестроение является более ресурсозатратным по сравнению с локальным, поэтому применение его для ускорения вычислений должно выполняться как можно реже.



Рис. 2. Состав программного комплекса «Кристалл»

В разделе отмечены наиболее известные программные решения по моделированию обледенения, включая FENSAP-ICE в составе пакета инженерного проектирования ANSYS, программный модуль iceFoam разработки ИСП РАН на базе открытой библиотеки OpenFOAM, решение в пакете инженерного анализа ЛОГОС Аэро-Гидро, методику IceVision в программном комплексе FlowVision и другие, отмечены особенности и сильные стороны существующих решений. Необходимость исследования новых моделей обледене-

ния, учета функциональных особенностей, не предусмотренных в существующих решениях, проведения расчетов по проектированию новых образцов авиационной техники, привела к созданию программного комплекса расчета обледенения элементов авиационных силовых установок «Кристалл», в котором реализованы результаты диссертации и состав которого приведен на рис. 2. Программный комплекс состоит из отдельных модулей: модуль обледенения, включающий набор моделей для расчета состояния многослойной картины обледенения, регулируемых внешними опциями; модуль для работы с поверхностной сеткой, включающий локальное и глобальное перестроение сетки; средства для взаимодействия с внешними решателями газовой динамики, динамики капель и теплопроводности; средства распараллеливания вычислений на всех уровнях; другие вспомогательные математические и физические модули. В рамках ПК «Кристалл» реализован комплекс математических методов и алгоритмов для повышения производительности и надежности вычислений, выполняемых при моделировании обледенения.

В разделе 1.8 анализируется вопрос, касающийся эволюции поверхности ледяных наростов в задаче моделирования обледенения, рассматривается граница ледяного нароста в аналитическом виде, которая смещается в направлении роста льда (*продвижение фронта льда*). При представлении поверхности льда в виде расчетной сетки во время перестроения возможно возникновение локальных дефектов (*пики и впадины*), которые могут накапливаться в процессе вычислений. Для обоснования необходимости сглаживания дефектов в разделе рассматривается граница между подобластями в виде замкнутой двусторонней поверхности и анализируется изменение этой поверхности при продвижении фронта. Анализ проводится в предположении продвижения фронта на одну и ту же величину в соответствии с геометрическим принципом Гюйгенса. Из анализа сглаживания локальных дефектов при эволюции поверхности делается вывод, что их накопление связано с дискретной природой расчетной сетки, а значит необходимо развитие методов сглаживания локальных дефектов для повышения надежности перестроения сетки.

В выводах отмечается комплекс отдельных вычислительных задач, связанных с моделированием объектов со сложной геометрией, включая перестроение и коррекцию поверхностной сетки и распараллеливание вычислений на всех доступных уровнях. В последующих главах предлагаются решения, касающиеся повышения производительности и надежности этих задач, реализованные в ПК «Кристалл» и других программных средствах применительно к различным стадиям многостадийного расчета обледенения.

Вторая глава посвящена геометрическим аспектам, связанным с расчетными сетками, – перестроению поверхностной неструктурированной сетки, а также пересечению и самопересечению сеток различных видов.

В разделе 2.1 рассматриваются основные геометрические примитивы, используемые в этой и следующих главах. Вводится понятие *окрестности* множества точек. Пусть дано множество точек G , на точках этого множества $P \in G$ определена неотрицательная функция радиуса $R : G \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$. Окрест-

ностью множества точек G , заданной функцией $R(P)$, называется множество точек $O_R(G) = \{P : \exists C \in G \implies P \in \text{Ball}(C, R(C))\}$, где $\text{Ball}(C, R)$ – шар с центром в точке C радиуса R (то есть окрестность является объединением шаров $\text{Ball}(C, R(C))$, построенных на точках из G).

Двумерная поверхностная сетка определена как ломаная без самопересечений на плоскости, состоящая из ячеек-отрезков $F_i = N_i N_{i+1}$ длины l_i ($0 \leq i < n$) с определенными единичными внешними нормальными $\bar{n}_i^F$. Для каждого узла N_i определена единичная внешняя нормаль $\bar{n}_i^N = (\bar{n}_{i-1}^F + \bar{n}_i^F) / |\bar{n}_{i-1}^F + \bar{n}_i^F|$, лежащая на биссектрисе телесного угла $2\phi_i$ между F_{i-1} и F_i . В трехмерном случае определяется поверхностная неструктурированная сетка с треугольными ячейками. Для каждой ячейки F однозначно определена единичная внешняя нормаль $\bar{n}_F^F$, через которые аналогично двумерному случаю определяются внешние нормали узлов $\bar{n}_N^N$.

В разделе 2.2 приводится постановка задачи локального перестроения сетки. В задаче перестроения требуется определить новые положения узлов, чтобы заматаемая площадь (в двумерном случае) или заматаемый объем (в трехмерном случае) при движении отдельных ячеек соответствовали заданным (*целевым*) значениям $T_i = l_i H_i$ (двумерный вариант, H_i – смещение ячейки в направлении нормали) или $T_F = S_F H_F$ (трехмерный вариант, S_F – площадь ячейки, H_F – смещение ячейки в направлении нормали).

В двумерном случае требуется определить новые положения узлов N'_i , при которых площадь $S_i = S_{N_i N'_i N'_{i+1} N_{i+1}}$, заматаемая ячейкой F_i , как можно меньше отличается от целевой площади T_i . Задача рассматривается при фиксированных направлениях смещения узлов вдоль их нормалей $\bar{n}_i^N$, требуется определить только величины смещения узлов h_i . Для оценки *погрешности* локального перестроения используются обозначения: $\Delta_i = S_i - T_i$ и $\delta_i = \frac{\Delta_i}{T_i}$ – абсолютная и относительная погрешность.

В трехмерном случае требуется определить новые положения узлов N' , при которых объем $V_F = V_{ABCA'B'C'}$, заматаемый ячейкой $F = ABC$, как можно меньше отличается от целевого объема T_F . Также рассматривается смещение узлов вдоль нормалей и определяются величины их смещения h_N . Для оценки погрешности локального перестроения используются обозначения: $\Delta_F = V_F - T_F$ и $\delta_F = \frac{\Delta_F}{T_F}$ – абсолютная и относительная погрешность.

В разделе 2.3 рассмотрено вычисление величин смещений узлов h_i , при которых достигается минимум функционала $D(\bar{h}) = D(h_0, \dots, h_n) = \sum_{i=0}^{n-1} \Delta_i^2$. Поиск решения выполняется методом градиентного спуска и требует значительных вычислительных затрат. Аналогичная трехмерная постановка поиска оптимального решения еще более громоздкая, поэтому требуется использование приближенных методов перестроения.

В разделе 2.4 рассмотрены известные приближенные локальные методы перестроения двумерной сетки, встречающиеся в пакетах моделирования обледенения, в которых используется представление целевой площади T_i для каждой ячейки в виде геометрических примитивов: *метод прямоугольников* (рис. 3, слева) и *метод трапеций* (рис. 3, в центре).

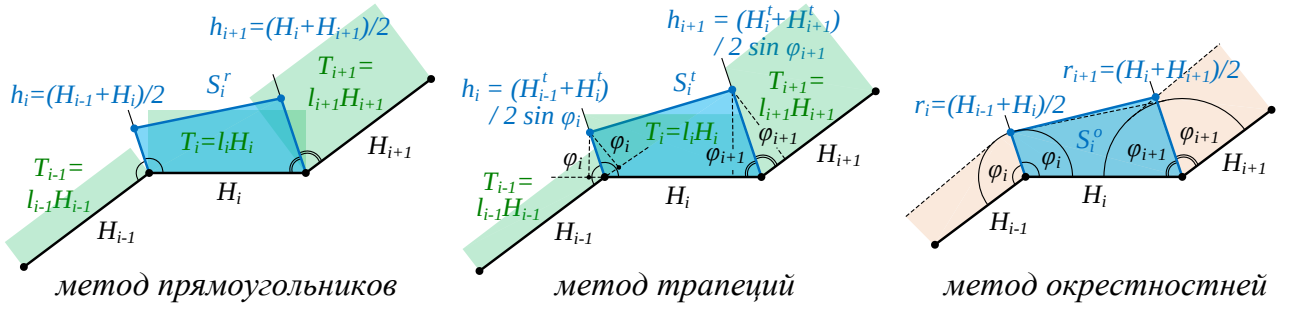


Рис. 3. Локальное перестроение поверхностной сетки в двумерном случае

Для стадии “Перестроение поверхности” в задаче моделирования обледенения предлагается новый метод перестроения – *метод окрестностей*, в котором каждый узел сетки смещается вдоль своей нормали на границу окрестности двух инцидентных ему ячеек (рис. 3, справа).

В разделе рассмотрены трехмерные аналоги методов прямоугольников и пирамид – *метод призм* и *метод пирамид* соответственно. Рассмотрены дополнительные аспекты перестроения сетки в трехмерном случае, позволяющие повысить *точность* (понижить погрешность) перестроения и качество получаемого решения: *многослойное перестроение* и *перестроение со сглаживаниями*.

В разделе 2.5 предложен метод окрестностей перестроения поверхностной сетки в трехмерной постановке. Этот метод является расширением двумерного метода окрестностей на трехмерный случай, в качестве нового положения узла также берется точка пересечения направления смещения узла и границы окрестности всех инцидентных узлу ячеек.

В основе метода лежит рассмотрение отдельной ячейки сетки $F = ABC$ и задача определения точки пересечения направления смещения ее узла A (луч $\overline{P}(\alpha) = \overline{A} + \alpha \overline{D}$ при $\alpha > 0$ и $|\overline{D}| = 1$) со сферой окрестности этой ячейки $Sphere(\beta, \gamma)$ с центром в точке $\overline{Q}(\beta, \gamma)$ и радиусом $R(\beta, \gamma)$, где $\overline{Q}(\beta, \gamma) = \overline{A} + \beta \overline{AB} + \gamma \overline{AC}$ и $R(\beta, \gamma) = R(A) + \beta(R(B) - R(A)) + \gamma(R(C) - R(A)) = R_A + \beta R_{AB} + \gamma R_{AC}$. Решение этой задачи (параметр α из траектории движения точки A) может быть записано явно:

$$\begin{aligned} \alpha(\beta, \gamma) &= k_\beta \beta + k_\gamma \gamma + \sqrt{T}, \\ T &= q_{\beta^2} \beta^2 + q_{\gamma^2} \gamma^2 + q_{\beta\gamma} \beta \gamma + q_\beta \beta + q_\gamma \gamma + q, \\ k_\beta &= (\overline{D}, \overline{AB}), \quad k_\gamma = (\overline{D}, \overline{AC}), \\ q_{\beta^2} &= (\overline{D}, \overline{AB})^2 - |\overline{AB}|^2 + R_{AB}^2, \quad q_{\gamma^2} = (\overline{D}, \overline{AC})^2 - |\overline{AC}|^2 + R_{AC}^2, \\ q_{\beta\gamma} &= 2((\overline{D}, \overline{AB})(\overline{D}, \overline{AC}) - (\overline{AB}, \overline{AC}) + R_{AB}R_{AC}), \\ q_\beta &= 2R_A R_{AB}, \quad q_\gamma = 2R_A R_{AC}, \quad q = R_A^2, \end{aligned}$$

и в качестве смещения узла N берется $\alpha = \max_{F=ABC \in \mathcal{F}(N)} \max_{\substack{\beta \geq 0, \gamma \geq 0 \\ \beta + \gamma \leq 1}} \alpha(\beta, \gamma)$.

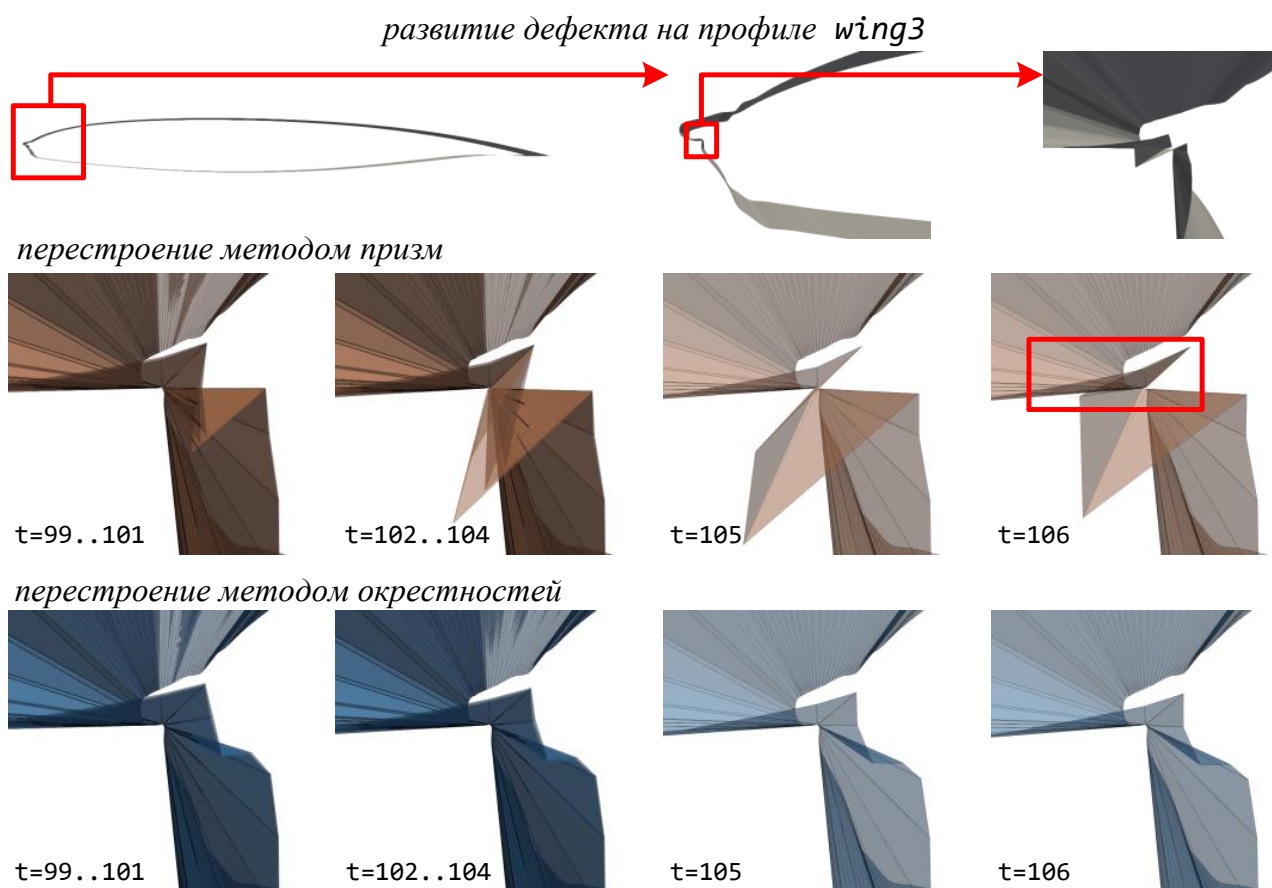


Рис. 4. Развитие локального дефекта при перестроения сетки

Метод окрестностей перестроения поверхностной сетки используется при моделировании обледенения поверхностей аэродинамических профилей. В условиях моделирования обледенения важно предотвратить развитие локальных дефектов для увеличения моделируемого физического времени. На рис. 4 продемонстрировано сравнение развития дефекта сетки при моделировании обледенения на одном из аэродинамических профилей.

Применение метода окрестностей перестроения поверхностной сетки на различных аэродинамических профилях привело к увеличению моделируемого физического времени на 25% и более по сравнению с методом призм за счет сглаживания возникающих локальных дефектов, то есть $(t^o - t^r)/t^r \geq 0,25$, где t^r , t^o – физическое промоделированное время процесса обледенения до развития локального дефекта в самопересечение сетки при использовании метода призм и метода окрестностей соответственно.

В разделе 2.6 получены аналитические выражения погрешностей δ^r , δ^t , δ^o двумерных методов перестроения в i -ой ячейке на модельных сетках с постоянным размером ячейки l , разницей смещения соседних ячеек ΔH и кривизной α ($\alpha \geq 0$ для выпуклой сетки, $\alpha < 0$ – для вогнутой) при $H_i = \frac{l}{2}$. На рис. 5 приведены графики погрешностей для фиксированных углов $\alpha = \pm 0,5$. Из рисунка видно, что метод трапеций при небольших значениях $\frac{\Delta H}{l}$ наиболее точен, а точность методов прямоугольников и окрестностей близки.

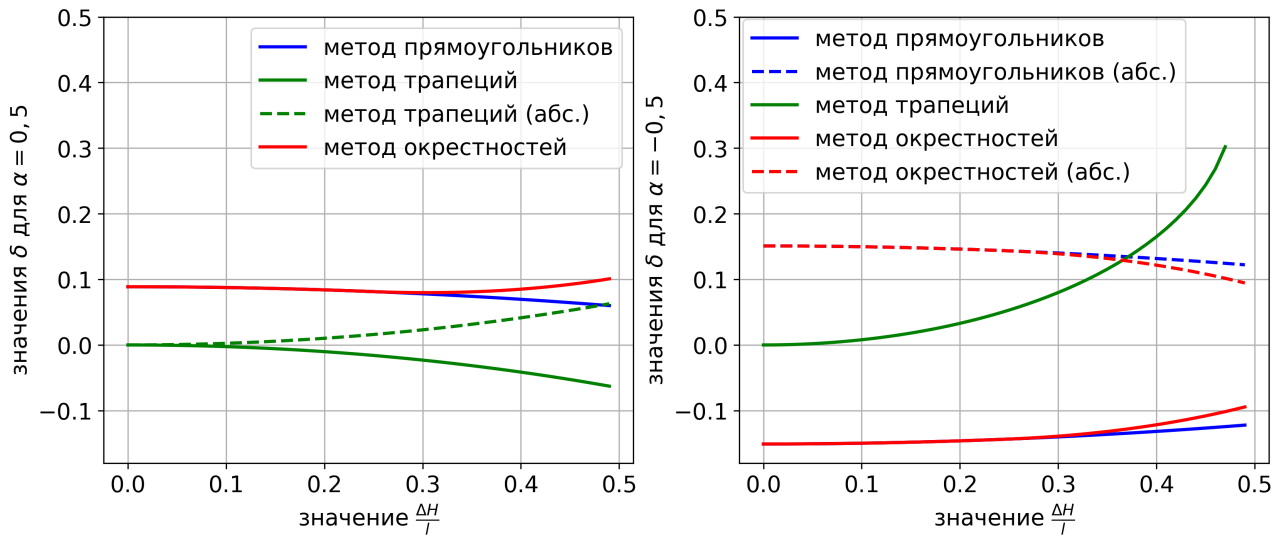


Рис. 5. Графики зависимостей $\delta^r(\frac{\Delta H}{l})$, $\delta^t(\frac{\Delta H}{l})$, $\delta^o(\frac{\Delta H}{l})$ при фиксированных значениях $\alpha = 0,5$ (слева) и $\alpha = -0,5$ (справа)

В разделе 2.7 получены аналитические выражения сглаживания углов при дефектах сетки (острые пики и острые впадины), при использовании разных методов перестроения. Анализ сглаживания дефектов выполнялся на модельной сетке, которая является плоской за исключением пары соседних ячеек, образующих локальный дефект (острый пик либо острую впадину) с углом при дефекте 2α , и постоянной величиной смещения ячеек $H = \frac{l}{4}$.

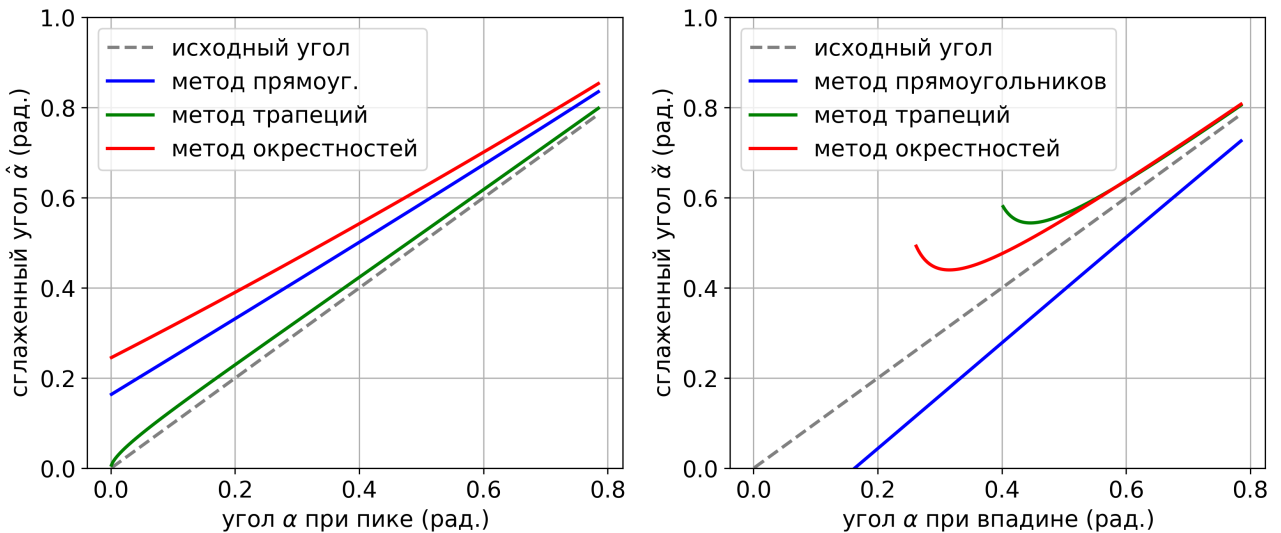


Рис. 6. Сравнение сглаживания дефектов при перестроении сетки

Из приведенных результатов сглаживания угла при дефекте сетки на рис. 6 сделаны следующие выводы. С точки зрения сглаживания дефектов сетки метод трапеций неприменим, так как не сглаживает острые пики. Метод прямоугольников неэффективен при сглаживании как острых пиков, как и впадин. Метод окрестностей позволяет сглаживать как острые пики, так и впадины.

Раздел 2.8 посвящен проблеме поиска и удаления самопересечений трехмерной поверхностной неструктурированной сетки. Во время эволюции поверхностной сетки применение сглаживаний дефектов может отложить возникновение самопересечений, но полностью исключить возникновение этого дефекта невозможно, поэтому для продолжения корректных расчетов необходимо устранение самопересечений. Анализируются существующие методы, основанные на поиске ломаных пересечения, использовании предикатов геометрических отношений, использовании рациональных координат.

Для стадии “Перестроение поверхности” в задаче моделирования обледенения исследуется проблема поиска и удаления самопересечений поверхностной сетки, описывающей поверхность ледяного нароста и предлагается метод удаления самопересечений. Отмечаются основные особенности таких самопересечений. Они могут состоять из произвольных ломаных (в том числе пересекающихся) и плоских объектов (наложение ячеек). Ввиду наличия внешних нормалей ячеек может быть определена *внешняя поверхность* сетки, разделяющая пространство на внутреннюю и внешнюю области, где во внешней области не содержится ни одной ячейки, а лишние ячейки будут находиться во внутренней области и являться претендентами на удаление. Определение внешней поверхности позволяет создать новый метод поиска и удаления самопересечений, так как требуется поиск только самопересечений, находящихся на внешней поверхности сетки, что может быть использовано для повышения производительности вычислений.

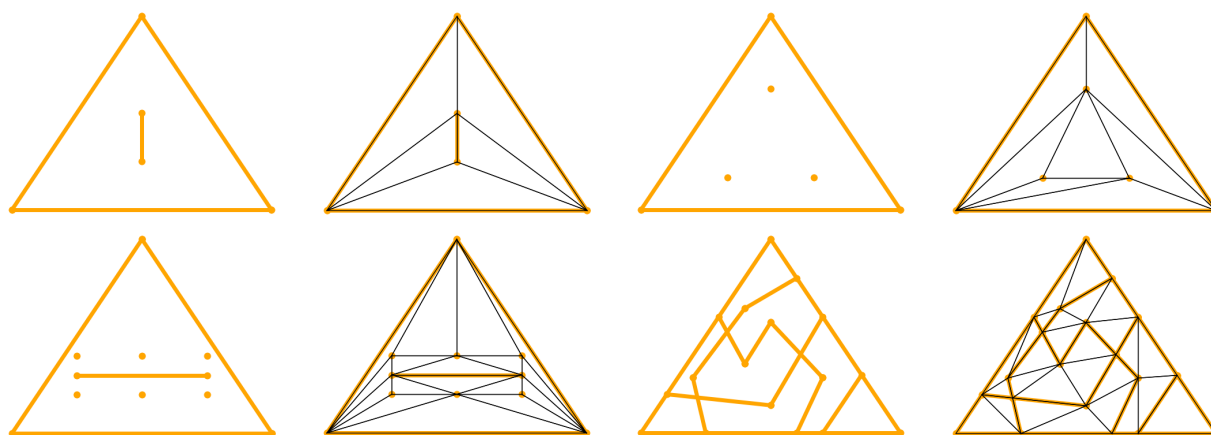


Рис. 7. Разбиение ячейки с помощью триангуляции с ограничениями

В основе предлагаемого метода удаления самопересечений поверхностной сетки лежит нахождение всех пар пересекающихся (*конфликтующих*) ячеек, дробление их таким образом, чтобы среди измельченных ячеек отсутствовали пересекающиеся по внутренним точкам, и наконец удаление всех лишних ячеек, лежащих ниже внешней поверхности сетки (во внутренней области). Для поиска пар *потенциально пересекающихся* ячеек используется BVH-дерево ограничивающих объемов (Bounding Volume Hierarchy). Определение пересечения ячеек выполняется без потери точности с использованием раци-

ональных координат. Для дробления ячеек по множеству отрезков и точек используется жадный алгоритм триангуляции с ограничениями (рис. 7), имеющий квадратичную сложность по количеству точек разбиения.

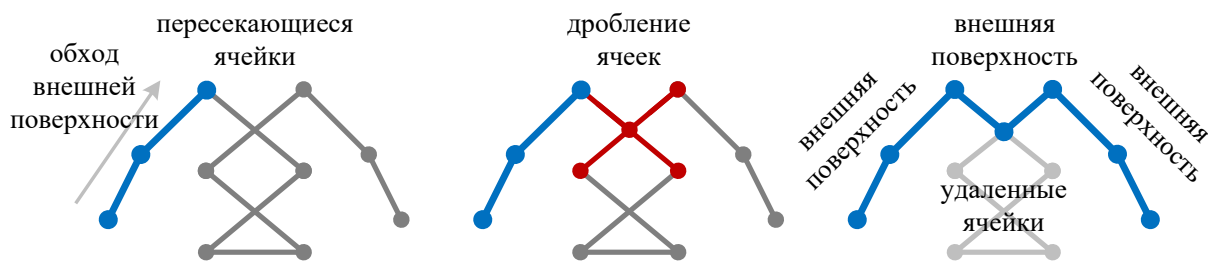


Рис. 8. Обход внешней поверхности сетки с дроблением: начало обхода (слева), дробление (в центре), удаление (справа)

Удаление самопересечений выполняется с помощью обхода внешней поверхности сетки, где переход между соседними ячейками выполняется через общее ребро. Обход начинается с произвольной ячейки внешней поверхности (рис. 8, слева). При попадании в конфликтную ячейку выполняется ее дробление по всем точкам и отрезкам пересечения с другими ячейками сетки, после чего в сетке могут появиться ребра, инцидентные более чем двум ячейкам (рис. 8, в центре). При переходе через ребро, инцидентное более чем двум ячейкам, в качестве следующей для обхода ячейки выбирается ячейка, также расположенная на внешней поверхности (до нее угол поворота текущей ячейки вокруг ребра в направлении внешней нормали минимален) (рис. 9). После завершения обхода внешней поверхности все необойденные ячейки признаются лишними и удаляются (рис. 8, справа).

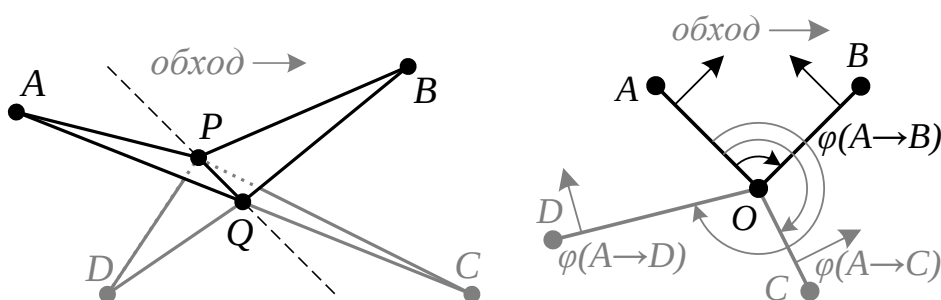


Рис. 9. Переход через ребро, инцидентное более чем двум ячейкам

Метод удаления самопересечений применим к незамкнутым сеткам, например, на рис. 10 продемонстрировано удаление самопересечений сеток, возникающих при моделировании обледенения поверхностей аэродинамических профилей с использованием *псевдотрехмерных профилей* (профили в виде ленты шириной в несколько ячеек), которые часто используются для исследовательских целей при изучении процессов обледенения.

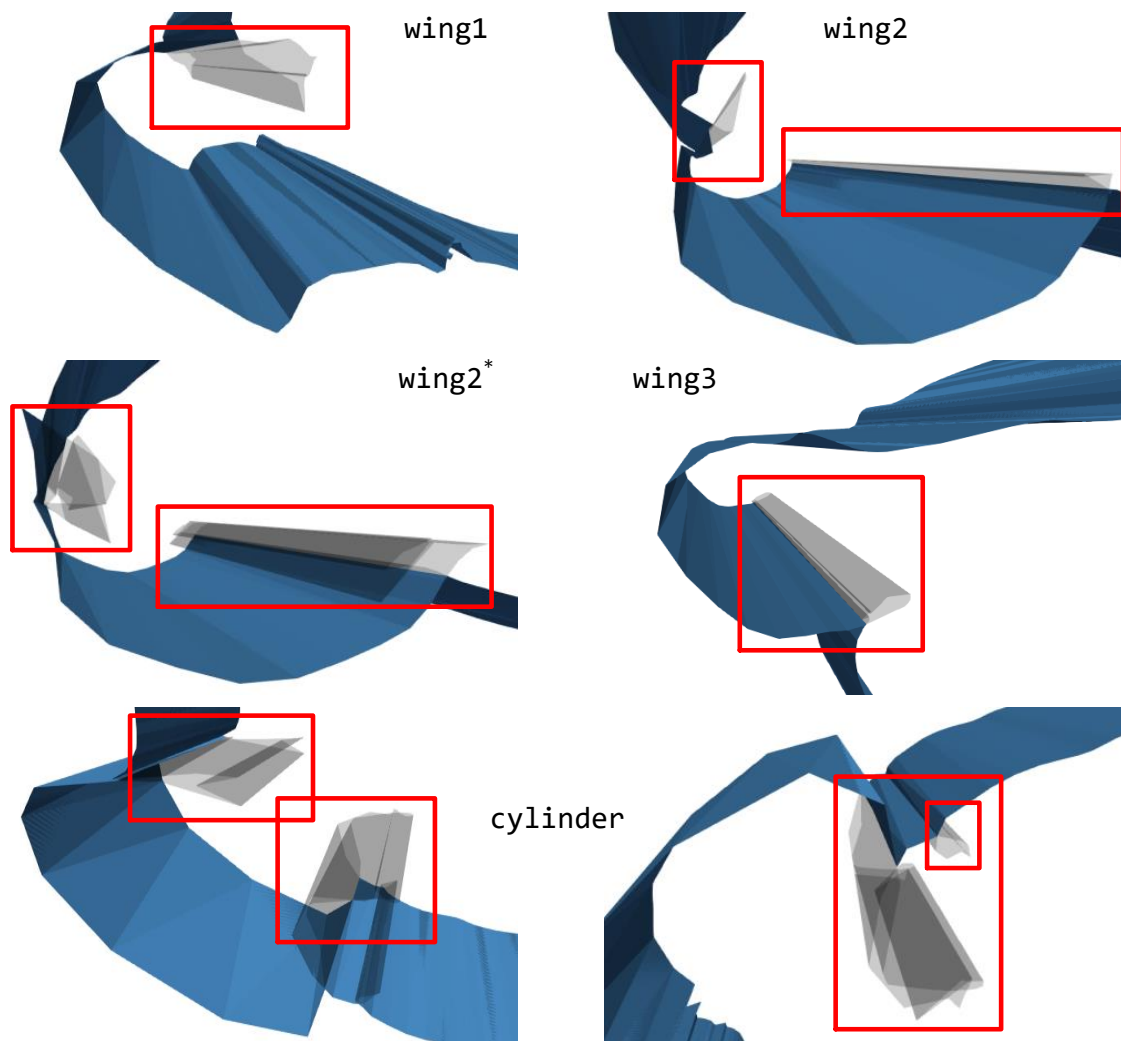


Рис. 10. Удаление самопересечений псевдотрехмерных профилей

В разделе 2.9 рассматривается задача сопряжения вычислений на поверхностной неструктурированной сетке с вычислениями на несогласованной с ней декартовой сетке. Составной частью этой задачи является поиск пересечения неструктурированной поверхностной сетки с декартовой сеткой с помощью свертывания системы линейных неравенств методом Черникова. Метод применяется к описанию треугольника и прямоугольного параллелепипеда в пространстве с помощью систем линейных неравенств, для сокращения количества проверяемых на пересечение пар используется BVH-дерево. Предлагается метод погруженной границы с использованием фиктивных ячеек, являющийся обобщением двумерного метода² и основанный на аппроксимации скалярных и векторных физических величин в фиктивных ячейках по значениям в трех точках пространства (центры обычных ячеек) и направлению нормали к поверхностной сетке в четвертой точке.

²В. В. Винников, Д. Л. Ревизников. Применение декартовых сеток для решения уравнений Навье-Стокса в областях с криволинейными границами. // Математическое моделирование, 2005, Т. 17, № 8, С. 15-30.

В выводах к главе отмечено, что разработанные методы перестроения и коррекции поверхностной неструктурированной сетки позволяют повысить надежность перестроения и увеличить моделируемое физическое время при моделировании объектов со сложной геометрией. Разработанные методы реализованы в составе программного комплекса «Кристалл».

Третья глава посвящена повышению производительности параллельных вычислений на объемных блочно-структурированных сетках. Полученные в главе результаты использованы для ускорения газодинамического решателя, применяемого при расчете газодинамического поля для стадий “Аэродинамика” и “Динамика капель” задачи моделирования обледенения.

В разделе 3.1 приводятся основные показатели распараллеливания на распределенной памяти. Для распараллеливания вычислений область задачи нужно разбить на подобласти (множества ячеек, *домены*, *партиции*), распределить домены между процессами и организовать обмен данными на границах доменов. Задача эквивалентна задаче декомпозиции *дуального графа* сетки $G = (V, E)$ (вершины графа соответствуют ячейкам, ребро графа связывает две вершины, соответствующие соседним ячейкам). Для распределения ячеек расчетной сетки по доменам рассматриваются следующие показатели: *неравномерность распределения* $D = \max_{0 \leq i < k} (n_i - \frac{n}{k})$, $D^* = \frac{D}{n/k} (n_i - \text{количество ячеек в } i\text{-ом домене})$ характеризует простаивание вычислительных ресурсов во время обработки наибольшего домена; *наибольшая длина границы между парой доменов* определяет длительность информационных обменов между доменами; *суммарная длина границ между доменами* определяет общий объем данных при обменах.

В разделе 3.2 приведено описание архитектуры блочно-структурированной сетки с поддержкой дробления блоков, а в разделе 3.3 рассматривается проблема распределения блоков между партициями с низким значением D при проведении вычислений на блочно-структурированной сетке.

Рассматривается задача распределения без дробления блоков. Для этого используется задача разбиения множества m весов на k подмножеств. Пусть дано множество X вещественных чисел $x_i \geq 0$ для $i \in M$, где $M = [0, m - 1]$, а также множество индексов $j \in K$, где $K = [0, k - 1]$. Будем говорить, что определено разбиение множества X на k подмножеств, если введена функция $\gamma : M \rightarrow K$. Веса результирующих подмножеств определяются как $X_j = \sum_{i \in M, \gamma(i)=j} x_i$. Требуется найти функцию разбиения γ минимизирующую наиболее тяжелое из результирующих подмножеств $X_{\max} = \max_{j \in K} X_j$.

Точное решение этой задачи связано с большими вычислительными затратами. Рассматривается жадный алгоритм решения. Множество распределяемых весов рассматривается в виде массива, который перед началом работы алгоритма сортируется по убыванию. В алгоритме последовательно обрабатываются все веса, начиная с наибольшего. Очередной вес относится к наиболее легкому на текущий момент подмножеству. Сложность алгоритма — $O(m \log m)$ в предположении $m > k$ при реализации множества партиций с помощью упорядоченного по возрастанию множества пар (вес, индекс).

Формулируется и доказывается следующее утверждение об оценке эффективности работы жадного алгоритма:

Лемма. При использовании жадного алгоритма разбиения множества m весов на k подмножеств отклонение наиболее тяжелого подмножества X_{max} от среднего значения веса подмножеств $X_{avg} = \frac{1}{k} \sum_{j \in K} X_j$ не превышает $\max_{i \in M} r_i$, где $r_i = \max(x_i - \frac{1}{k} \sum_{p=i}^m x_p, 0)$.

Приводится описание механизма дробления блоков, поддержанного в предлагаемой архитектуре блочно-структурированной сетки. Рассматривается механизм дробления трехмерного блока размера $a \times b \times c$, заключающийся в разрезании его на два блока по одному из измерений. Для построения алгоритма распределения блоков по партициям с минимизацией параметра D рассматривается задача о выделении из блока размера $a \times b \times c$ части заданного размера $t \geq 0$. Минимальное количество разрезов, требуемое для решения этой задачи, обозначается $P_{a \times b \times c}^t$, приводятся формулы для явного вычисления этих значений. Формулируются и доказываются свойства значений $P_{a \times b \times c}^t$, доказывається следующее утверждение:

Лемма. При распределении произвольного количества блоков расчетной сетки с суммарным количеством ячеек n по k партициям и выполнении условия $k \mid n$ равномерное распределение с показателем $D = 0$ может быть достигнуто с использованием количества разрезов блоков σ не более $5(k-1)$.

Предлагаются алгоритмы распределения вычислительной нагрузки между процессами с использованием дробления блоков. Первый рассматриваемый алгоритм основан на жадном распределении. Выполняется распределение множества m блоков между k партициями с помощью жадного алгоритма. Если после этого требуемое значение параметра $D^* \leq \varepsilon$ не достигнуто, то выполняется дробление наибольшего блока пополам по наиболее протяженному измерению, после чего жадный алгоритм применяется повторно. Алгоритм имеет сложность $O(m \log m + \sigma(m + \sigma) \log k)$ в предположении $m > k$.

В разделе вводится понятие *подготовка сетки* – последовательность дроблений блоков для достижения заданного значения D^* при распределении m блоков между k партициями. Приводятся результаты эксперимента по выполнению расчетов на блочно-структурированной сетке с подготовкой для разных k и D^* при помощи дробления наибольшего блока.

Для анализа эффективности распределения блоков по вычислительным процессам с дроблением блоков и влиянии этого распределения на масштабирование вычислений поставлен эксперимент по выполнению газодинамических расчетов методом RANS/ILES с помощью программного модуля «Лазурит» на блочно-структурированной сетке, содержащей 9,4 млн ячеек, с разными параметрами подготовки сетки. Эксперимент проводился на сегменте вычислительной системы MBC-10П МП2, состоящем из вычислительных блоков на базе одного микропроцессора Intel Xeon Phi 7290 Knights Landing (микропроцессор содержит 72 физических ядра, способных обрабатывать до 288 потоков), связанных коммуникационной сетью Onmi-Path с пропускной способностью 100 Гбит/с.

На рис. 11 представлены результаты экспериментов масштабирования вычислений на блочно-структурированной сетке на 1-32 вычислительных узлах (при запуске одного процесса на узел). На неподготовленной сетке ("нет дроблений") и при подготовке для $k = 16$ наблюдается ограничение ускорения из-за наличия крупных блоков. При подготовке сетки для $k = 32$ и $k = 64$ с $D^* = 0,1$ наблюдаются близкие значения ускорения, это говорит о том, что подготовка сетки для большего количества процессов, чем реально будет использоваться для запусков, избыточно. При подготовке сетки для $k = 64$ и $D^* = 0,01$ наблюдается деградация ускорения вычислений при распараллеливании из-за возрастания количества дроблений, что приводит к увеличению объема межпроцессных обменов.

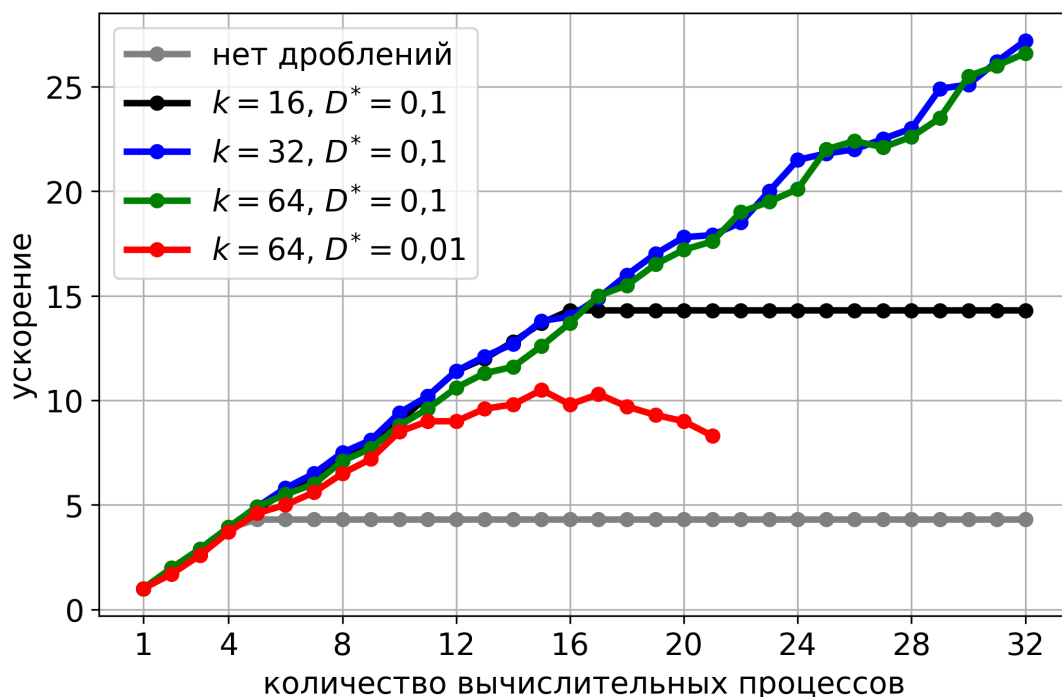


Рис. 11. Ускорение ПО «Лазурит» при различных параметрах подготовки сетки на вычислительных узлах сегмента МВС-10П МП2

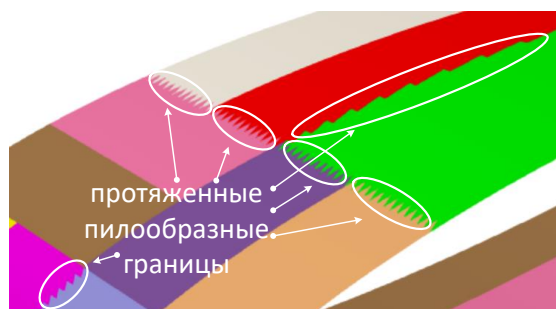
Для компенсации деградации при увеличении количества дроблений блоков предложен эвристический алгоритм распределения блоков с дроблениями. Основная идея алгоритма заключается в последовательном поиске такой партиции, нераспределенного блока и разреза этого блока, что при разрезании блока и добавлении его части в партицию обеспечивается неухудшение или наименьшая деградация параметра D на каждом шаге алгоритма. Алгоритм имеет сложность $O((m + \sigma)mk)$, он не обеспечивает оптимальное распределение, однако на используемых сетках его применение позволило добиться показателя неравномерности распределения D^* не хуже 0,1 при количестве разрезов, сравнимым с количеством процессов.

В выводах к главе отмечено, что предложенные алгоритмы распределения блоков сетки по вычислительным процессам с использованием дроблений поз-

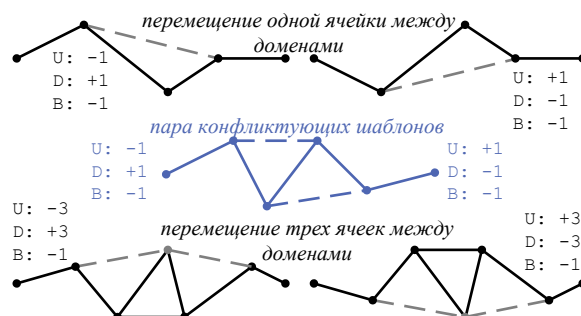
воляют преодолеть проблему низкой производительности вычислений, возникающую из-за наличия крупных блоков в сетке. Использование предложенных алгоритмов позволило добиться ускорения газодинамического решателя ПО «Лазурит» более чем в 25 раз при использовании до 32 вычислительных узлов МВС-10П МП2.

Четвертая глава посвящена задаче разработки методов повышения производительности параллельных вычислений на поверхностной неструктурированной сетке, описывающей границу расчетной подобласти при моделировании объектов со сложной геометрией. Предложенные в главе решения нашли отражение при организации расчетов для стадии «Обледенение поверхности» в задаче моделирования обледенения.

В разделе 4.1 рассматриваются методы декомпозиции поверхностной неструктурированной сетки для распределения вычислительной нагрузки между вычислительными процессами. При использовании декомпозиции основным показателем является параметр D , так как он отражает равномерность размера доменов. Но если игнорировать остальные показатели, то в процессе декомпозиции могут появляться протяженные «пилообразные» границы между доменами, которые приводят к возрастанию объема межпроцессных обменов, что негативно сказывается на производительности (рис. 12, а).



(а) «пилообразные» границы



(б) шаблоны сглаживания

Рис. 12. Сглаживание границы между доменами

Предлагается алгоритм сглаживания границ между доменами. Алгоритм применяется последовательно к каждой паре доменов и направлен на уменьшение длины границы между ними с сохранением баланса количества ячеек. Без ограничения общности можно считать, что граница между парой доменов представляет собой простую цепь из ребер. Вначале одним проходом по цепи с линейной сложностью выполняется поиск всех пригодных для сглаживания границы *шаблонов*, представленных на рис. 12, б. Каждый такой шаблон t уменьшает длину границы на единицу и изменяет количество ячеек в одном из доменов (который условно назван U) на $U(t)$. Шаблоны могут *конфликтовать* друг с другом, тогда они не могут быть применены одновременно. Задача сглаживания границы состоит в выборе такого максимального подмножества шаблонов, которое не нарушает баланс ячеек между домена-

ми. Задача решается методом динамического программирования. Для этого рассматривается функция $B(t, u, x)$, отражающая максимальное сокращение длины границы при решении на множестве шаблонов $\{t' \in T : t' \geq t\}$ при условии изменения количества ячеек в домене U на u единиц. Параметр x является булевым и означает вхождение шаблона t в решение. Сложность алгоритма выбора подмножества шаблонов, обеспечивающего максимальное сокращение длины границы, квадратичная по количеству шаблонов. Результаты применения алгоритма сглаживания границ между доменами продемонстрировали сокращение границ на 10-12% на различных расчетных сетках, при этом на пилообразных границах сокращение длины достигает 50%. Алгоритм может быть расширен на использование шаблонов произвольного вида и использоваться с произвольными методами декомпозиции.



Рис. 13. Масштабирование вычислений без сглаживания и со сглаживанием границ при разном размере сообщений

Для анализа влияния сглаживания границ на масштабирование вычислений поставлен эксперимент по моделированию обледенения поверхности крыла летательного аппарата. В эксперименте использована расчетная сетка, содержащая $4 \cdot 10^5$ ячеек. В качестве метода декомпозиции использовано иерархическое деление доменов пополам с помощью геометрической бисекции, для которой характерно наиболее низкое значение коэффициента неравномерности размера доменов D , а также появление протяженных пилообразных границ между доменами. Вычисления проводились в условиях малого (3 параметра на ребро границы) и большого (300 параметров на ребро границы) объема пересылаемых данных во время межпроцессных обменов при масштабировании вычислений до 512 MPI-процессов. Эксперимент проводился на сегменте вычислительной системы МВС-10П ОП2, состоящем из вычислительных блоков на базе двух микропроцессоров Intel Xeon Gold 6248R Cascade Lake (микропроцессор содержит 24 физических ядра, способных об-

рабатывать до 48 потоков), связанных коммуникационной сетью Onmi-Path с пропускной способностью 100 Гбит/с. Сглаживание границ для рассматриваемой расчетной сетки привело к сокращению длин границ между доменами на 32-38%. Результаты эксперимента демонстрируют более выраженное влияние сокращения длин границ на масштабирование вычислений в условиях большого размера сообщений при межпроцессных обменах (рис. 13).

Раздел 4.2 посвящен распараллеливанию вычислений на поверхностной неструктурированной сетке на общей памяти. Рассматриваются подходы к устранению конфликтов по данным при распараллеливании конечно-объемных численных методов на поверхностной расчетной сетке. В первом подходе используются директивы OpenMP при доступе к элементам данных, по которым возможно возникновение конфликтов. Во втором подходе применяется реберная раскраска дуального графа сетки, с помощью которой множество ребер разбивается на подмножества без конфликтов. Приводятся алгоритмы реберной раскраски дуального графа поверхностной неструктурированной сетки в 5 и 4 цвета с линейной сложностью по количеству ребер, а также квадратичный алгоритм раскраски в 3 цвета, основанный на исследованиях раскрасок плоских графов³. Эксперименты показали, что метод реберной раскраски более эффективен, чем использование директив OpenMP.

Предложенные методы повышения производительности вычисления на поверхностной неструктурированной сетке реализованы в программном комплексе «Кристалл». Произведены замеры масштабируемости вычислений на сетке, содержащей $4 \cdot 10^5$ ячеек, на которой выполнялись вычисления по моделированию обледенения поверхности. Для декомпозиции сетки использовался иерархический алгоритм деления доменов пополам со сглаживанием границ между доменами. Для измерения масштабируемости вычислений использовались сегменты суперкомпьютера МВС-10П МП2 и МВС-10П ОП2, содержащие до 8 узлов. Во время запусков внутри каждого вычислительного узла использовалось распараллеливание на общей памяти на разное количество потоков: внутри узлов МВС-10П МП2 использовались варианты с 1, 72, 144, 216 и 288 потоками, внутри узлов МВС-10П ОП2 использовались варианты с 1, 24, 48, 72 и 96 потоками.

По результатам масштабирования вычислений (рис. 14, рис. 15) для моделирования обледенения составлены рекомендации по эффективному использованию вычислительных ресурсов: 8 вычислительных узлов с 144-216 потоков в узле для МВС-10П МП2, 8 вычислительных узлах с 48-72 потоков в узле для МВС-10П ОП2.

В выводах к главе отмечено, что метод сглаживания границ между доменами поверхностной неструктурированной сетки позволяет уменьшить длину границ и повысить тем самым производительность вычислений за счет сокращения объема межпроцессных обменов, а метод реберной раскраски дуального графа сетки позволяет разрешить конфликты по доступу к данным

³С. В. Курапов, М. В. Давидовский, А. В. Толок. Визуальный алгоритм раскраски плоских графов. // Научная визуализация, 2018, Т. 10, № 3, С. 1-33, DOI: 10.26583/sv.10.3.01.



Рис. 14. Производительность вычислений по моделированию обледенения на вычислительных узлах МВС-10П МП2



Рис. 15. Производительность вычислений по моделированию обледенения на вычислительных узлах МВС-10П ОП2

при распараллеливании на общей памяти. Использование распараллеливания MPI+OpenMP, а также разработанного метода сглаживания границ между доменами позволило сократить время расчетов более чем на два порядка при моделировании обледенения.

Пятая глава посвящена задаче разработки методов векторизации программного кода для повышения его производительности. Векторизация является оптимизацией распараллеливания вычислений на уровне ядра и способнакратно увеличить производительность приложений. Набор векторных инструкций AVX-512 обладает рядом особенностей и позволяет векторизовать сложный программный контекст с обилием операций передачи управления, гнездами циклов и вызовами функций. Для оценки эффективности векторизации используются понятия *ширина векторизации* $w = v/t$ (v – размер векторного регистра, t – размер типа расчетных данных), *ускорение* $s = T/T_v$ (T – время выполнения скалярной версии кода, T_v – время выполнения векторизованной версии кода), *эффективность* векторизации $e = s/w$, а также *логическое ускорение* $s^* = L/L_v$ (L – количество выполненных инструкций в скалярном коде, L_v – количество выполненных аналогичных им векторных инструкций в векторном коде), *логическая эффективность* $e^* = s^*/w$.

В разделе 5.1 приведено описание набора векторных инструкций AVX-512, перечислены основные подмножества операций и рассмотрены особенности этого набора. Основной отличительной чертой набора AVX-512 является возможность выполнения векторных инструкций с использованием *векторных масок*, обеспечивающих выборочную обработку элементов векторов.

В разделе 5.2 рассматривается векторизация программного кода путем выделения однотипных инструкций и объединения их в векторные аналоги на примере операций с матрицами малой размерности. Показано, что от способа выделения однотипных инструкций существенным образом зависит производительность результирующего кода. Продемонстрировано, что низкая *плотность векторных масок* (количество единичных битов в маске) в результирующем коде негативно сказывается на производительности.

В разделе 5.3 вводится понятие *плоского цикла* как удобного программного контекста для векторизации вычислений, что делает его предпочтительной формой компоновки программного кода для автоматического применения векторизации компилятором. Идея плоского цикла состоит в объединении w экземпляров *скалярного блока* в единый *векторный блок*, состоящий из аналогичных векторных инструкций. Так w экземпляров скалярного блока $block(a, b, c) \rightarrow (p, q, r)$ со скалярными входными и выходными данными могут быть объединены в векторный блок $BLOCK(A, B, C) \rightarrow (P, Q, R)$ с векторными входными и выходными данными (рис. 16). В качестве плоского цикла рассматривается цикл `for (int i = 0; i < w; ++i)`, к которому предъявляются следующие требования. На i -ой итерации все обращения к данным на запись имеют вид `a[i]`, а обращения к данным на чтение либо имеют вид `a[i]`, либо являются чтением скаляров. Все массивы данных, обращение к которым на i -ой итерации цикла имеет вид `a[i]`, выровнены в памяти на размер вектора. В цикле отсутствуют межитерационные зависимости. Можно считать, что плоский цикл содержит произвольное количество итераций n , так как с помощью расщепления цикла по индуктивной переменной он может быть разбит на циклы с меньшим количеством итераций.

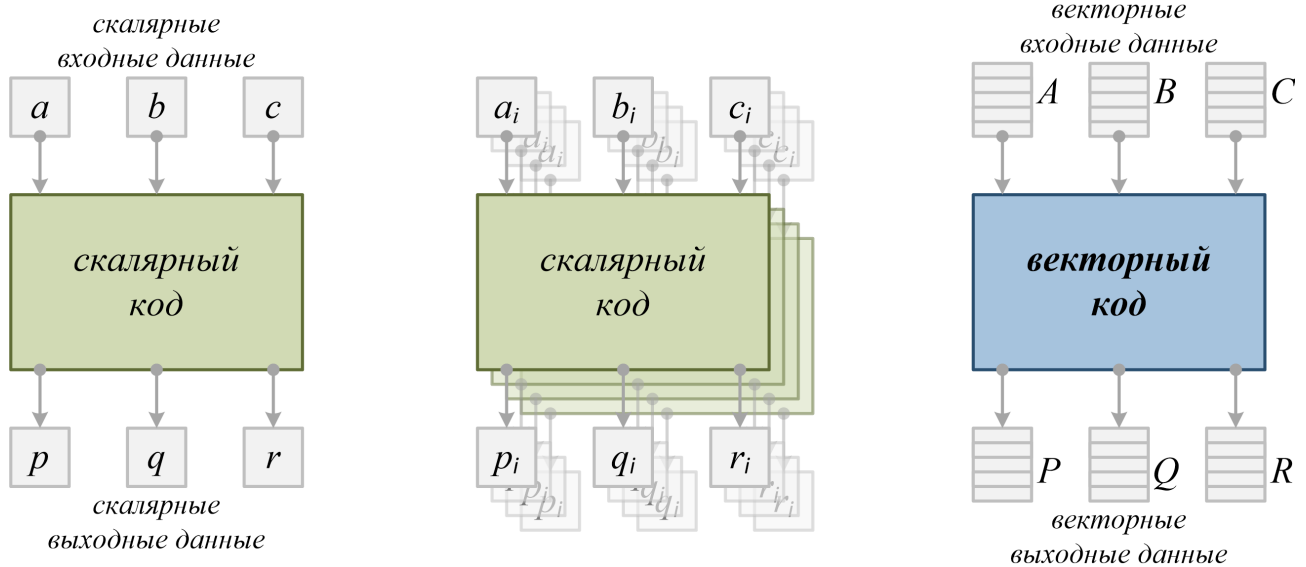


Рис. 16. Иллюстрация объединения w экземпляров скалярного блока $block(a, b, c) \rightarrow (p, q, r)$ в векторный блок $BLOCK(A, B, C) \rightarrow (P, Q, R)$

Оптимизирующие компиляторы в основном нацелены на векторизацию наиболее вложенных циклов и зачастую отказываются от векторизации плоских циклов с телом со сложной структурой. Основной причиной отказа от векторизации циклов оптимизирующим компилятором являются операции передачи управления в теле цикла. В работе рассматриваются методы векторизации плоских циклов с телом произвольного вида. Рассмотрены основные преобразования, с помощью которых можно добиться векторизации циклов оптимизирующим компилятором. Среди них представление обрабатываемых данных в виде набора массивов вместо массива структур, расщепление цикла по константному условию и использование математических тождеств, позволяющих задействовать векторизуемые условные операции.

В разделе 5.4 рассматривается оптимизация выноса маловероятного региона из плоского цикла. Оптимизация заключается в сохранении условий входа в этот регион во временный массив и удалении его из основного цикла. Основной цикл, свободный от удаленного региона, может быть успешно векторизован, а вынесенный маловероятный регион может быть обработан в отдельном цикле согласно сохраненным условиям. Оптимизация применима в том случае, если все выходы из выносимого региона являются переходами на следующую итерацию плоского цикла или выходами из него.

Важным для векторизации понятием является предикатное исполнение кода. Предикатом операции является логическое условие, под которым она должна быть выполнена. В архитектуре x86 отсутствует предикатное исполнение операций, однако векторная маска в векторной инструкции по сути является векторизованным предикатом. Таким образом, скалярный код, записанный в предикатном виде, может быть векторизован с помощью векторных инструкций с масками.

Одной из основных причин низкой эффективности векторного кода является низкая плотность векторных масок в исполняемом коде. В разделах 5.5 и 5.6 приведены оптимизации, направленные на повышение плотности масок в исполняемом векторном коде.

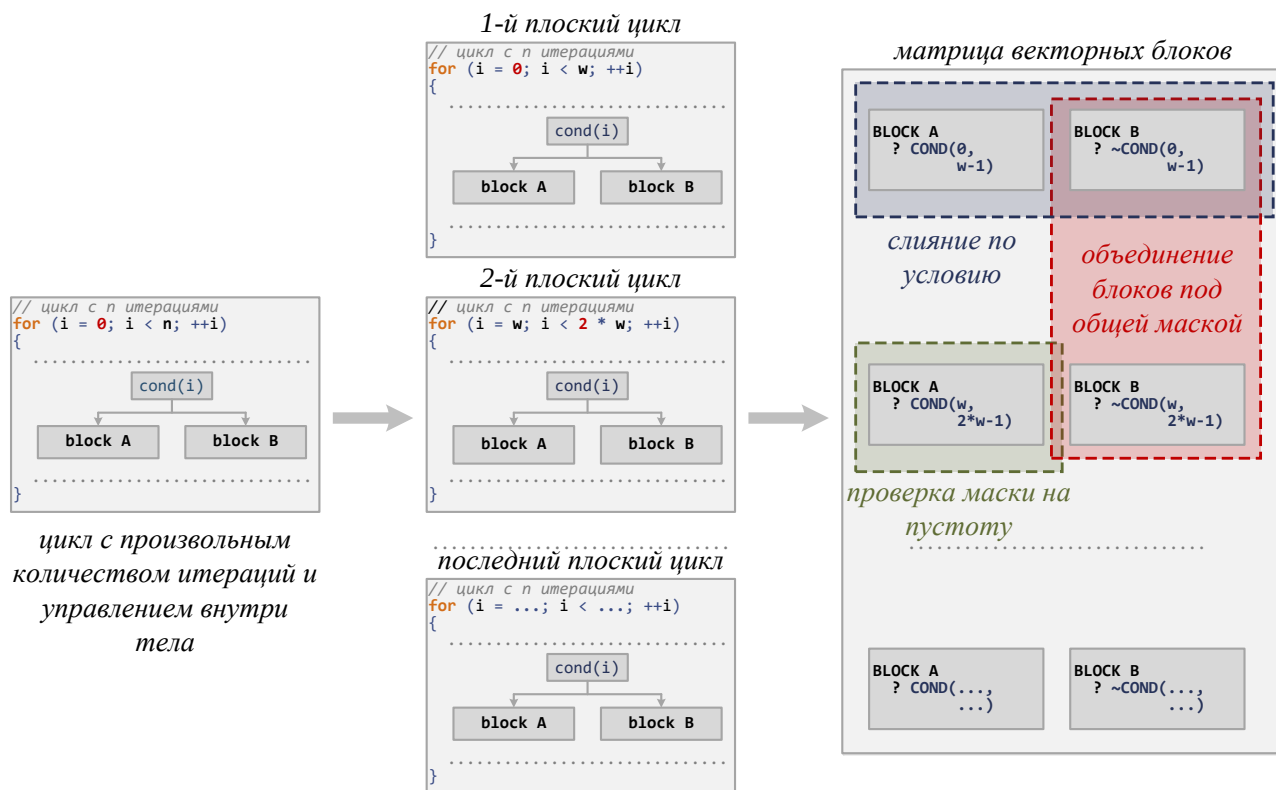


Рис. 17. Расщепление цикла (слева) на последовательность плоских циклов (в центре) и применение оптимизаций слияния по условию, проверки маски на пустоту и объединением одинаковых блоков вод общей маской (справа)

На рис. 17 показан цикл, содержащий в своем теле условие, по которому выполняется блок `block A`, либо блок `block B`. После расщепления этого цикла по индуктивной переменной на последовательность плоских циклов, постановки блоков под соответствующие предикаты и векторизации этих блоков образуется *матрица векторных блоков*, в каждой строке которой находятся блоки из одного плоского цикла, а каждый столбец содержит одинаковые векторные блоки, выполняющиеся под разными масками.

Объединение векторных блоков, стоящих в одной строке, представляет собой оптимизацию слияния путей исполнения по условию (также известной под названием *ifconversion* и используемой, например, в компиляторах для архитектуры «Эльбрус»). В разделе 5.5 рассматривается эта оптимизация, а также для нее анализируется эффективность проверки векторной маски на пустоту перед выполнением векторного блока. Проверка маски на пустоту оправдана, если в коде часто встречаются пустые маски, что характерно для расчетных приложений из-за медленного изменения значений элементов данных между итерациями плоского цикла.

В разделе 5.6 рассматривается повышение плотности векторных масок в исполняемом коде с помощью *объединения одинаковых векторных блоков* из одного столбца матрицы векторных блоков, выполняющихся под непересекающимися масками. Вместо их последовательного выполнения можно объединить входные данные с помощью слияния, после чего выполнить векторный блок один раз под объединенной маской. Ввиду отсутствия пересечения векторных масок в результирующих выходных данных будут содержаться элементы выходных данных объединенных блоков.

В разделе 5.7 проводится анализ программного контекста, в котором тело плоского цикла само содержит циклы или гнезда циклов. На рис. 18 представлена схема векторизации плоского цикла, в теле которого содержится внутренний цикл (*структура «плоский цикл / внутренний цикл»*).

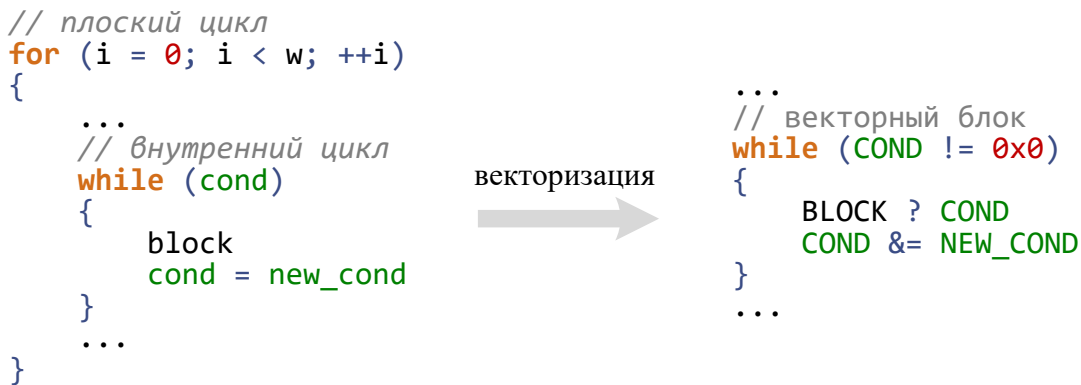


Рис. 18. Схема векторизации структуры «плоский цикл / внутренний цикл»

При выполнении векторизации тело внутреннего цикла *block*, выполняемое по условию *cond*, переводится в векторный блок *BLOCK*, выполняемый под маской *COND*, которая постепенно истощается. При этом $I_v = \max_{i=0}^{w-1} I(i)$, где $I(i)$ – количество итераций внутреннего цикла на i -ой итерации плоского цикла, I_v – количество итераций внутреннего цикла в векторной версии. Эффективность векторизации рассматриваемого программного кода зависит от характера изменения условия *cond* (и соответственно функции $I(i)$) между итерациями плоского цикла. Верны следующие утверждения:

Лемма. При векторизации структуры «плоский цикл / внутренний цикл» верно соотношение $e^* = e^I e_{iter}^*$, где $e^I = \frac{s^I}{w}$, $s^I = \frac{\sum_{i=0}^{w-1} I(i)}{I_v}$, а e_{iter}^* – логическая эффективность векторизации итерации внутреннего цикла.

Лемма. При векторизации структуры «плоский цикл / внутренний цикл» верна оценка $e^I \geq 1 - \frac{\varepsilon}{I_v}$, где $\varepsilon = \max_{i=0}^{w-1} I(i) - \min_{i=0}^{w-1} I(i)$ – коэффициент неравномерности количества итераций внутреннего цикла.

Рассматриваются программные контексты различного вида, в которых гнездо циклов классифицируется в зависимости от значения параметра ε : внутренний цикл с фиксированным количеством итераций ($\varepsilon = 0$, $e^I = 1$, высокая эффективность векторизации), внутренний цикл с непостоянным количеством итераций (значение коэффициента ε мало, наиболее характерная

ситуация для расчетных приложений), внутренний *цикл с нерегулярным количеством итераций* (значение коэффициента ε сравнимо с величиной I_v , крайне низкая эффективность векторизации).

Приводятся результаты эксперимента по распараллеливанию выполнения на узлах сегментов суперкомпьютера МВС-10П МП2 и МВС-10П ОП2 нескольких экземпляров решения задачи Римана о распаде разрыва. Этот программный контекст содержит сложное управление, вызовы функций и гнездо циклов с внутренним циклом с непостоянным количеством итераций. На узлах указанных сегментов достигнуто ускорение от векторизации 7,0 и 5,1 раз соответственно, а в режиме OpenMP+векторизация – более 250 и 80 раз соответственно по сравнению со скалярной версией на одном потоке.

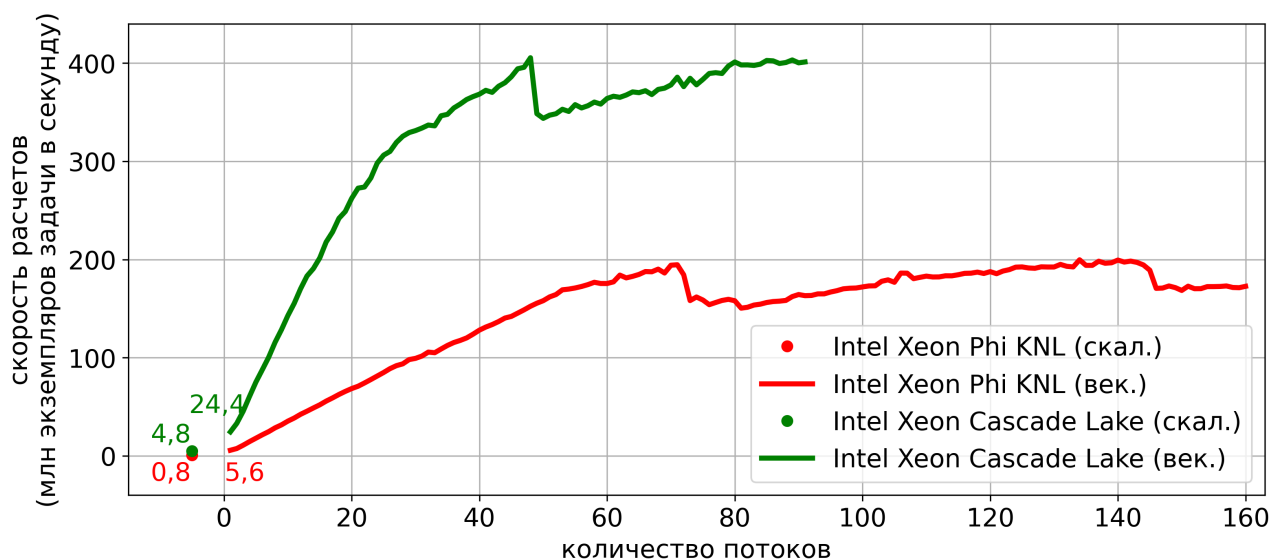


Рис. 19. Распараллеливание выполнения нескольких экземпляров решения задачи о распаде разрыва на вычислительных узлах сегментов МВС-10П МП2 и МВС-10П ОП2 (OpenMP+векторизация)

В разделе 5.8 на основе предыдущих разделов приводится методика векторизации программного кода с использованием плоских циклов. Она объединяет в себе рекомендации по организации программного кода для автоматической векторизации плоских циклов оптимизирующим компилятором, а также преобразования кода, позволяющие векторизовать плоские циклы с телом произвольного вида (включая сложное разветвленное управление, вызовы функций и гнезда циклов) с помощью функций-интринсиков, которые при компиляции раскрываются в векторные инструкции или последовательности векторных инструкций.

В разделе 5.10 рассматривается общий анализ эффективности векторизации программного контекста различного вида с помощью методов векторизации, предложенных и исследованных в настоящей главе. В разделе, а также в выводах к главе отмечается, что наиболее неудобным программным контекстом для векторизации являются гнезда циклов с нерегулярным количеством

итераций, а также циклы с нарушением требований плоских циклов (дополнительная косвенность при обращении в память, невыровненность данных). Наиболее удобным контекстом для векторизации являются плоские циклы с простым управлением и применением проверок векторной маски на пустоту перед выполнением векторного блока и объединением векторных блоков под непересекающимися масками. Рассмотренные в главе преобразования, направленные на сокращение количества операций передачи управления в теле плоского цикла и повышение плотности векторных масок в исполняемом коде, приводят к повышению эффективности векторизации и могут быть использованы для ускорения высокопроизводительных приложений.

В заключении приведены выводы диссертации. Как итог многолетних исследований и разработок, в работе автором представлен комплекс математических методов и алгоритмов для повышения производительности вычислений при моделировании объектов со сложной геометрией на современных параллельных вычислительных системах. Обобщение теоретического и практического опыта автора в области математического и программного обеспечения вычислительных систем и комплексов, проведенное в диссертации, позволило получить следующие основные результаты.

1. Разработана архитектура и состав программного комплекса, в котором реализованы математические методы и алгоритмы, применяемые для моделирования объектов со сложной геометрией с использованием высокопроизводительных вычислительных систем. Предложенные в работе методы и алгоритмы реализованы в программном комплексе расчета процесса обледенения элементов авиационных силовых установок «Кристалл». В составе комплекса решаются ресурсоемкие вычислительные задачи, возникающие при моделировании объектов со сложной геометрией с использованием высокопроизводительных вычислительных систем. В эти задачи входят перестроение и коррекция поверхностной неструктурированной сетки, описывающей границы расчетных подобластей, а также выполнение параллельных вычислений на объемных блочно-структурированных и поверхностных неструктурированных сетках.
2. Разработаны методы перестроения и коррекции поверхностной неструктурированной сетки.
 - Метод окрестностей перестроения поверхностной неструктурированной сетки, основанный на поиске пересечения траектории смещения узла с границей окрестности инцидентных узлу ячеек, обладающий способностью сглаживания локальных дефектов для предотвращения их накопления и позволяющий повысить надежность перестроения для увеличения моделируемого физического времени при моделировании объектов со сложной геометрией.
 - Метод удаления самопересечений поверхностной неструктурированной сетки, основанный на обходе ее внешней поверхности, которая определяется направлениями внешних нормалей ячеек, обеспечивающий корректное состояние сетки, описывающей границу подобласти.

3. Разработаны решения по повышению производительности параллельных вычислений на объемных блочно-структурированных и поверхностных неструктурированных сетках.

- Методы распределения блоков сетки по вычислительным процессам с использованием дробления блоков для распараллеливания вычислений на распределенной памяти, позволяющие преодолеть проблему низкой производительности вычислений из-за наличия крупных блоков и снизить показатель неравномерности распределения вычислительной нагрузки между процессами.
- Метод сглаживания границ между доменами декомпозированной поверхностной неструктурированной сетки, позволяющий из множества локальных шаблонов сглаживания границы между парой доменов выбрать подмножество шаблонов, при одновременном применении которых обеспечивается максимальное сокращение длины границы при заданном изменении баланса ячеек между доменами, позволяющий уменьшить длину границ и повысить тем самым производительность вычислений за счет сокращения объема межпроцессных обменов.
- Трехмерный метод погруженной границы с фиктивными ячейками, являющийся обобщением двумерного случая и основанный на аппроксимации физических величин в фиктивной ячейке по трем точкам пространства и направлению нормали в точке на границе, позволяющий проводить вычисления в расчетной подобласти со сложной границей без необходимости построения согласованной сетки.

4. На основе введенного понятия плоского цикла разработаны методы векторизации таких циклов с телом произвольного вида и методика повышения производительности программ путем представления вычислений в виде плоских циклов, которая обеспечивает возможность объединения нескольких экземпляров подпрограммы для решения на одном процессорном ядре и позволяет повысить производительность вычислений на широком классе приложений.

Предложенные в диссертации архитектурные и технические решения составили комплекс математических методов и алгоритмов для повышения производительности вычислений при моделировании объектов со сложной геометрией на современных параллельных вычислительных системах. Разработанные методы и алгоритмы реализованы в составе программного комплекса «Кристалл» компьютерного моделирования процесса обледенения элементов авиационных силовых установок, программы «crys-gsu» подготовки неструктурированной поверхностной расчетной сетки для проведения расчетов на суперкомпьютере, программы «GridMaster» подготовки блочно-структурированной расчетной сетки для проведения расчетов на суперкомпьютере и других программных средств. Перечисленные программные средства внедрены в практику Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Федерального автономного учреждения «Центральный институт авиационного моторостроения имени П. И. Баранова», Акционерного общества

«Национальный центр вертолетостроения имени М. Л. Миля и Н. И. Камова» и применяются для выполнения научных исследований и проведения расчетов при проектировании новых промышленных изделий.

Изложенные в диссертации результаты могут быть использованы широким кругом исследователей для разработки и повышения эффективности программ для современных суперкомпьютерных систем.

Основные публикации по теме диссертации

1. **Рыбаков А. А.** Удаление самопересечений поверхностной неструктурированной сетки в задаче моделирования обледенения. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2026, Т. 22, № 1, С. 63-75. DOI: 10.25559/SITITO.022.202601.63-75 (BAK).
2. **Рыбаков А. А.**, Чопорняк А. Д., Шмелёв А. С. Методика векторизации вычислений с помощью плоских циклов. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2026, Т. 22, № 1, С. 50-62. DOI: 10.25559/SITITO.022.202601.50-62 (BAK).
3. **Rybakov A. A.** Estimation of surface remesh methods in the ice accretion problem. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2025, Vol. 46, № 12, P. 6388-6398. DOI: 10.1134/S199508022561241X (WoS).
4. Горячев А. В., Горячев П. А., Горячев Д. А., Нуриев М. В., Николаев А. А., **Рыбаков А. А.** Численное моделирование процесса обледенения в условиях крупных переохлажденных капель. // Программные системы: Теория и приложения, 2025, Т. 16, № 4(67), С. 287-317. DOI: 10.25209/2079-3316-2025-16-4-287-317 (BAK).
5. **Rybakov A. A.** Vectorization of the integer calculations in the graph decomposition problem. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2025, Vol. 46, № 11, P. 6012-6018. DOI: 10.1134/S1995080225610987 (WoS).
6. **Рыбаков А. А.** Декомпозиция расчетной сетки с помощью генетического алгоритма. // Программные продукты и системы, 2025, Т. 38, № 2, С. 337-344. DOI: 10.15827/0236-235X.150.337-344 (BAK).
7. **Рыбаков А. А.** Векторизация циклов с условными операциями с помощью комбинирования векторных масок. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2024, Т. 20, № 3, С. 563-572. DOI: 10.25559/SITITO.020.202403.563-572 (BAK).
8. Гуличева А. А., **Рыбаков А. А.** Реберная раскраска кубического графа в задаче распараллеливания расчетов на неструктурированной поверхностной расчетной сетке. // Программные продукты и системы, 2024, Т. 37, № 3, С. 374-383. DOI: 10.15827/0236-235X.142.374-383 (BAK).
9. **Рыбаков А. А.**, Швиндт А. Н. Создание инструментария для векторизации тела плоского цикла с помощью векторных инструкций AVX-512. // Программные продукты и системы, 2023, Т. 36, № 4, С. 561-572. DOI: 10.15827/0236-235X.142.561-572 (BAK).
10. **Рыбаков А. А.** Геометрическое перестроение расчетной сетки с помо-

- щью общей огибающей семейства сфер в задаче ледообразования. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2023, Т. 19, № 2, С. 282-291. DOI: 10.25559/SITITO.019.202302.282-291 (BAK).
11. **Рыбаков А. А.**, Мещеряков А. О. Векторизация трехмерного метода погруженных границ для повышения эффективности расчетов на микропроцессорах Intel. // Программные продукты и системы, 2023, Т. 36, № 1, С. 130-143. DOI: 10.15827/0236-235X.141.130-143 (BAK).
 12. Meshcheryakov A. O., **Rybakov A. A.** Evolution of the surface computational mesh in the ice accretion process. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2023, Vol. 44, № 11, P. 361-378. DOI: 10.1134/S1995080223110367 (WoS).
 13. Freylekhman S. A., **Rybakov A. A.** Self-intersections elimination for unstructured surface computational meshes. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2022, Vol. 43, № 10, P. 2846-2852. DOI: 10.1134/S1995080222130133 (WoS).
 14. **Рыбаков А. А.** Векторизация программного кода, содержащего маловероятные регионы, в задачах вычислительной геометрии. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2022, Т. 18, № 1, С. 28-38. DOI: 10.25559/SITITO.18.202201.28-38 (BAK).
 15. Багров А. Д., **Рыбаков А. А.** Сглаживание границ между доменами поверхностной расчетной сетки. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2021, Т. 17, № 2, С. 265-274. DOI: 10.25559/SITITO.17.202102.265-274 (BAK).
 16. Shabanov B. M., **Rybakov A. A.**, Shumilin S. S., Vorobyov M. Yu. Scaling of supercomputer calculations on unstructured surface computational meshes. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2021, Vol. 42, № 11, P. 2571-2579. DOI: 10.1134/S1995080221110202 (WoS).
 17. Bagrov A. D., **Rybakov A. A.** Selection of a method for solving nonlinear equations in shallow-water icing model implementation. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2021, Vol. 42, № 11, P. 2503-2509. DOI: 10.1134/S1995080221110068 (WoS).
 18. **Рыбаков А. А.**, Чопорняк А. Д. Декомпозиция поверхностной неструктурированной расчетной сетки для масштабирования вычислений на суперкомпьютере. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2020, Т. 16, № 4, С. 851-861. DOI: 10.25559/SITITO.16.202004.851-861 (BAK).
 19. **Рыбаков А. А.** Метод погруженной границы с использованием фиктивных ячеек в трехмерной постановке. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2020, Т. 16, № 2, С. 321-330. DOI: 10.25559/SITITO.16.202002.321-330 (BAK).
 20. Savin G. I., Shabanov B. M., **Rybakov A. A.**, Shumilin S. S. Vectorization of flat loops of arbitrary structure using instructions AVX-512. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2020, Vol. 41, № 12, P. 2575-2592. DOI: 10.1134/S1995080220120331 (WoS).

21. **Рыбаков А. А.**, Шумилин С. С. Исследование эффективности векторизации гнезд циклов с нерегулярным числом итераций. // Программные системы: Теория и приложения, 2019, Т. 10, № 4(43), С. 77-96.
DOI: 10.25209/2079-3316-2019-10-4-77-96 (BAK).
22. **Rybakov A. A.**, Shumilin S. S. Vectorization of the Riemann solver using the AVX-512 instruction set. // Program Systems: Theory and Applications, 2019, Vol. 10, № 3(42), P. 41-58.
DOI: 10.25209/2079-3316-2019-10-3-41-58 (BAK).
23. **Рыбаков А. А.**, Шумилин С. С. Векторизация римановского решателя с использованием набора инструкций AVX-512. // Программные системы: Теория и приложения, 2019, Т. 10, № 3(42), С. 59-80.
DOI: 10.25209/2079-3316-2019-10-3-59-80 (BAK).
24. **Rybakov A. A.**, Shumilin S. S. Approximate methods of the surface mesh deformation in two-dimensional case. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2019, Vol. 40, № 11, P. 1848-1852.
DOI: 10.1134/S1995080219110258 (WoS).
25. Savin G. I., Benderskiy L. A., Lyubimov D. A., **Rybakov A. A.** RANS/ILES method optimization for effective calculations on supercomputer. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2019, Vol. 40, № 5, P. 566-573.
DOI: 10.1134/S1995080219050172 (WoS).
26. Shabanov B. M., **Rybakov A. A.**, Shumilin S. S. Vectorization of high-performance scientific calculations using AVX-512 instruction set. // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2019, Vol. 40, № 5, P. 580-598.
DOI: 10.1134/S1995080219050196 (WoS).
27. Бендерский Л. А., **Рыбаков А. А.**, Шумилин С. С. Векторизация перемножения малоразмерных матриц специального вида с использованием инструкций AVX-512. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2018, Т. 14, № 3, С. 594-602.
DOI: 10.25559/SITITO.14.201803.594-602 (BAK).
28. Бендерский Л. А., Лещев С. А., **Рыбаков А. А.** Векторизация операций над матрицами малой размерности для процессора Intel Xeon Phi Knights Landing. // Современные информационные технологии и ИТ-образование, 2018, Т. 14, № 1, С. 73-90.
DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.073-090 (BAK).
29. **Рыбаков А. А.** Оптимизация задачи об определении конфликтов с опасными зонами движения летательных аппаратов для выполнения на Intel Xeon Phi. // Программные продукты и системы, 2017, Т. 30, № 3, С. 524-528. DOI: 10.15827/0236-235X.030.3.524-528 (BAK).
30. **Рыбаков А. А.** Внутреннее представление и механизм межпроцессного обмена для блочно-структурированной сетке при выполнении расчетов на суперкомпьютере. // Программные системы: Теория и приложения, 2017, Т. 8, № 1(32), С. 121-134.
DOI: 10.25209/2079-3316-2017-8-1-121-134 (BAK).