ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР ДВО РАН

Важнейшие результаты исследований

Отделение нанотехнологий и информационных технологий.
Секция информационных технологий и автоматизации
(ВЦ ДВО РАН)

Проведены исследования эффективности выполнения процедуры перемножения матриц общего вида на современных вычислительных системах с гибридной архитектурой. Особое внимание уделено влиянию на скорость вычислений пропускной способности интерфейсов, обеспечивающих взаимодействие центральных процессоров и графических ускорителей, а также возможности автоматической выгрузки вычислений на графические процессоры NVIDIA. Выполненные эксперименты показали, что при перемножении матриц на графических ускорителях максимальную эффективность имеют вычислительные системы IBM, оснащенные высокоскоростной шиной NVLink (рис. 1). Результаты исследований могут применяться для выработки подходов по повышению производительности программного обеспечения, использующего процедуру перемножения матриц общего вида.

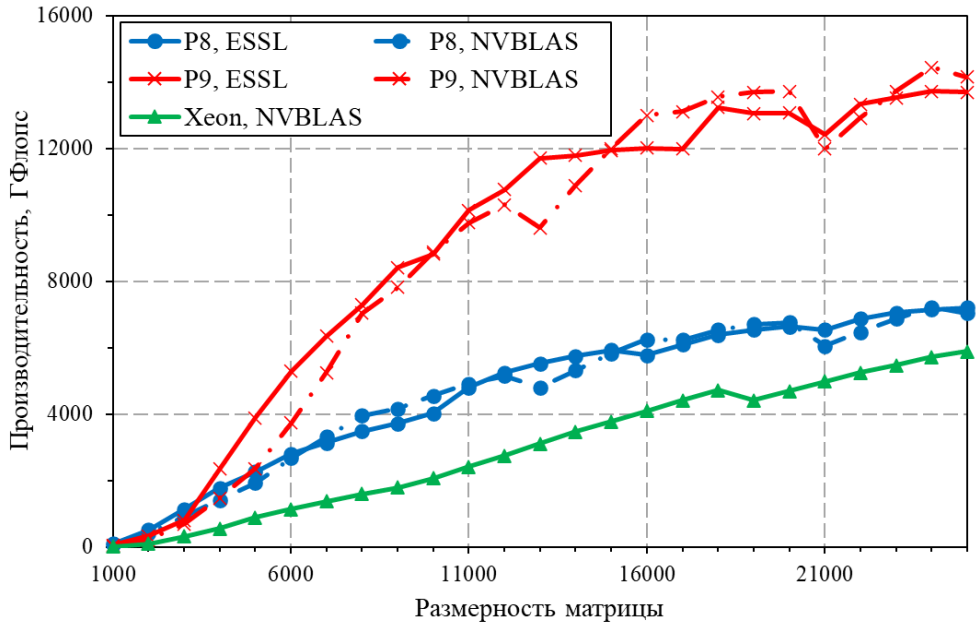

Рис. 1. Зависимость производительности, достигаемой при использовании двух сопроцессоров, от размерности матрицы в тесте DGEMM

ВЦ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН

Авторы: к.т.н. А.А. Сорокин (тел. 8-4212-22-72-67, alsor@febras.net), к.т.н. С.И. Мальковский (тел. 8-4212-22-72-67, sergey.malkovsky@gmail.com), к.ф.-м.н. Г.И. Цой (тел. 8-4212-22-72-67, tsoy.dv@mail.ru)

Публикация: Sorokin A., Malkovsky S., Tsoy G. Comparing the performance of general matrix multiplication routine on heterogeneous computing systems // Journal of Parallel and Distributed Computing. 2022. V. 160. P. 39-48. (WoS, Scopus) **Q1 IF=4.542**
https://doi.org/10.1016/j.jpdc.2021.10.002

Отделение нанотехнологий и информационных технологий РАН.
Секция информационных технологий и автоматизации
(ВЦ ДВО РАН)

Разработан подход к моделированию сезонных временных рядов NDVI с использованием 4 видов аппроксимирующих функций: функции Гаусса, двойной логистической, полиномов 2 и 3 степени. Предложенная методика применялась для оценки возможности раннего прогнозирования урожайности сои в муниципальных образованиях южной части российского Дальнего Востока. Исследование базировалось на данных дистанционного зондирования Земли из космоса, масках пахотных земель для районов Дальнего Востока, а также сведениях об урожайности сои в период 2008-2017 гг.

Установлено, что точность раннего прогноза урожайности сои (в период с 26-й по 30–ю календарные недели года) в муниципальных образованиях Дальнего Востока с использованием параметров функции Гаусса была достоверно выше ($p<0,01$), чем при использовании других функций (рис. 2). RMSE варьировался в диапазоне от 0,06 до 0,14 т/га для 26-30 календарных недель. Разработанный метод при этом обеспечивает дополнительную глубину прогноза в 2-3 недели при сопоставимом уровне ошибки с традиционными моделями.

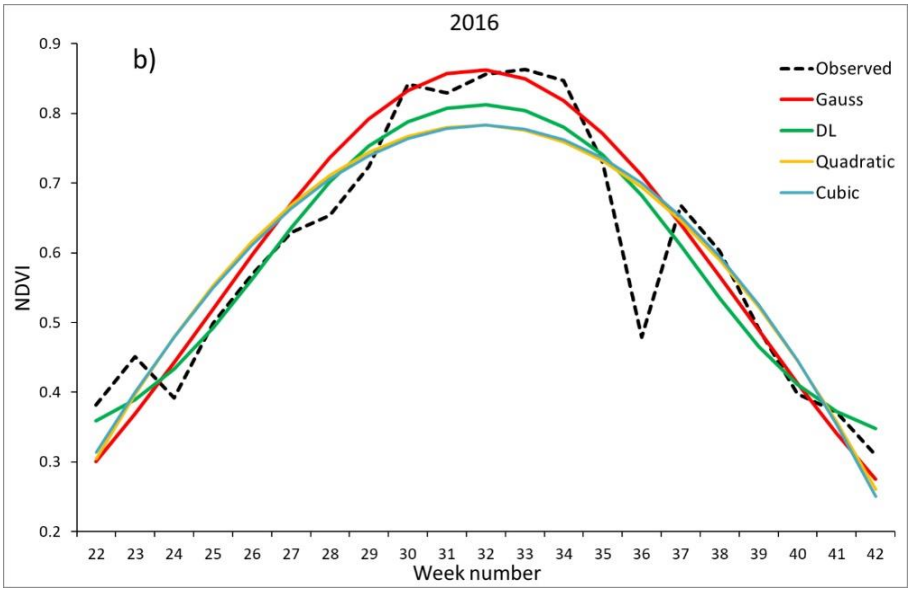

Рис. 2. Временной ряд NDVI и аппроксимирующие функции: ЕАО, Октябрьский р-н, 2016 г.

ВЦ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН[1] и ДВ НИИСХ[2] (Хабаровск)
Авторы: д.фарм.н. А.С. Степанов[2] (тел. 8-4212-49-75-46, stepanxx@mail.ru), К.Н. Дубровин[1](тел. 8-4212-22-72-67, nobforward@gmail.com), к.т.н. А.А. Сорокин[1] (тел. 8-4212-22-72-67, alsor@febras.net)

Публикация: Stepanov A., Dubrovin K., Sorokin A. Function fitting for modeling seasonal normalized difference vegetation index time series and early forecasting of soybean yield // The Crop Journal. 2022. V. 10, Iss. 5. P. 1452-1459. **Q1 IF=4.647**
https://doi.org/10.1016/j.cj.2021.12.013

Отделение нанотехнологий и информационных технологий РАН.
Секция нанотехнологий
(ВЦ ДВО РАН)

Наночастицы оксида церия обладают уникальными каталитическими свойствами и способностью накапливать кислород. Экспериментально и теоретически исследованы морфология и структура наночастиц оксида церия. Для синтеза наночастиц использовался метод лазерной абляции. Анализ размеров и морфологических характеристик наночастиц проводился с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Методом молекулярной динамики выявлен предельный размерный переход из октаэдрической морфологии к сферической форме в наночастицах оксида церия (рис. 3). Полученные результаты актуальны для технологов и экспериментаторов в области управляемого синтеза наноструктурированных материалов на основе оксида церия.

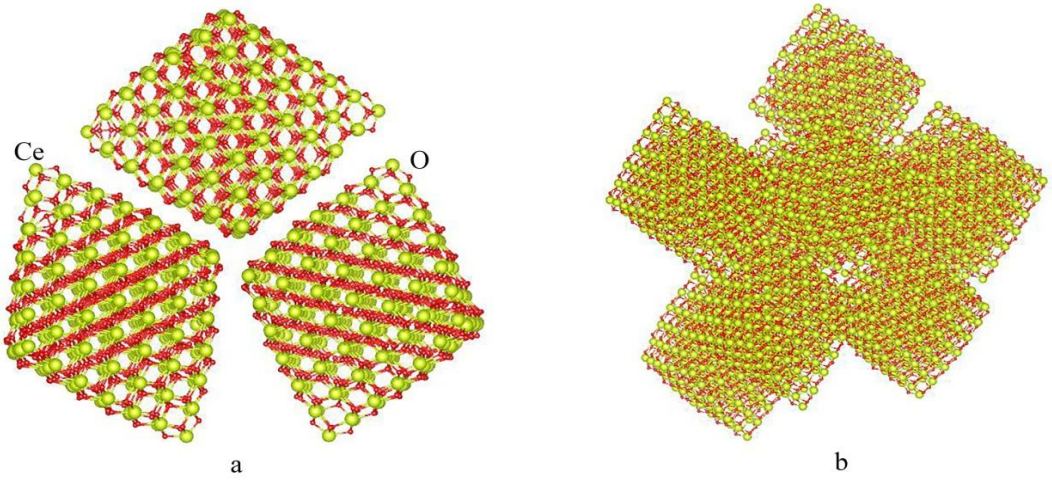

Рис. 3. Структура агломерированных наночастиц размером (а) 4,7 нм и (б) 7,3 нм

ВЦ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН[1], ЮЗГУ[2] (Курск) и МГТУ им. Н.Э. Баумана[3] (Москва)
Авторы: д.ф.-м.н. А.Н. Чибисов[1] (тел. 8-4212-22-72-67, andreichibisov@yandex.ru), д.ф.-м.н. М.А. Пугачевский[2] (тел. 8-4712-22-60-58, pmaximal@mail.ru), д.ф.-м.н. А.П. Кузьменко[2] (тел. 8-4712-22-60-58, apk3527@mail.ru), к.ф.-м.н. М.М. Тан[2] (тел. 8-961-197-69-78, tawywarthar@gmail.com), А.И. Карцев[1,3] (тел. 8-4212-22-72-67, karec1@gmail.com)
Публикация: Chibisov A.N., Pugachevskii M.A., Kuzmenko A.P., Than M.M., Kartsev A.I. Effect of morphology and size on the thermodynamic stability of cerium oxide nanoparticles: Experiment and molecular dynamics calculation // Nanotechnology Reviews. 2022. V. 11, Iss. 1. P. 620-624. (WoS, Scopus) **Q1 IF=6.739**
https://doi.org/10.1515/ntrev-2022-0038

Отделение нанотехнологий и информационных технологий РАН.
Секция нанотехнологий
(ВЦ ДВО РАН)

Благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию дырочные кубиты в германии все более активно рассматриваются как кандидаты для квантовых вычислителей. С помощью квантово-механических расчетов с учетом неколлинеарных магнитных взаимодействий исследованы квантовые состояния 2D структуры Ge при наличии в нем дырок с четным и нечетным числом. Рассчитаны пространственные локализации дырочных состояний, выявлены выгодные квантовые состояния и проведен анализ магнитных структурных характеристик системы (рис. 4).

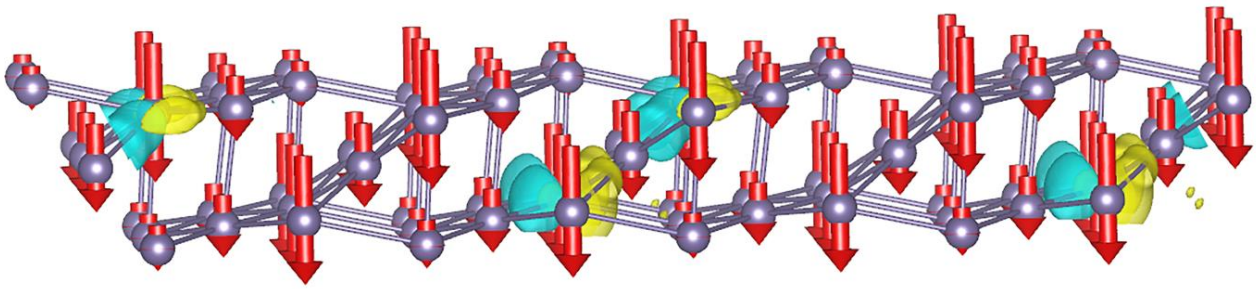

Рис. 4. Локализация дырочных состояний (одна дырка) в германии с квантовым состоянием |1>, с направлением спина вниз s = -1. Направления спинов вниз s = -1 обозначены красными стрелочками.

ВЦ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН
Авторы: д.ф.-м.н. А.Н. Чибисов (тел. 8-4212-22-72-67, andreichibisov@yandex.ru), к.ф.-м.н. М.С. Алешин (тел. 8-4212-22-72-67, aleshin.m.s@pnu.edu.ru), к.ф.-м.н. М.А. Чибисова (тел. 8-4212-22-72-67, omariya2003@yandex.ru)
Публикация: Chibisov A., Aleshin M., Chibisova M. DFT analysis of hole qubits spin state in germanium thin layer // Nanomaterials. 2022. V. 12, № 13. Article 2244. (WoS, Scopus) **Q1 IF=5.719**
https://doi.org/10.3390/nano12132244

Отделение математических наук
(ВЦ ДВО РАН)

Для задачи Никольского-Лизоркина с вырождением построена сетка со специальным сгущением к границе, позволившая добиться первого порядка скорости сходимости в норме весового пространства Соболева и второго порядка в норме пространства Лебега (рис. 5). При этом была разработана специальная техника доказательства оценок скорости сходимости, основанная на теоремах вложения и связи весовых и не весовых соболевских пространств.

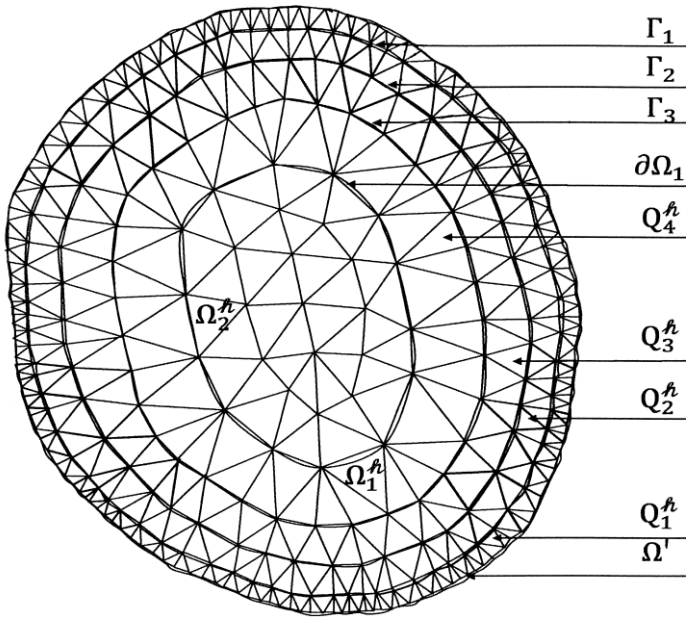

Рис. 5. Триангуляция области со специальным сгущением.

ВЦ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН

Авторы: д.ф.-м.н. В.А. Рукавишников (тел. 8-4212-22-72-67, vark0102@mail.ru), к.ф.-м.н. Е.И. Рукавишникова (тел. 8-4212-22-72-67, rukavishnikova-55@mail.ru)

Публикации: Rukavishnikov V.A., Rukavishnikova E.I. Error estimate FEM for the Nikol'skij–Lizorkin problem with degeneracy // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2022. V. 403. Article 113841. (WoS, Scopus) **Q1 IF=2.872**
https://doi.org /10.1016/j.cam.2021.113841.
Rukavishnikov V.A., Rukavishnikova E.I. On the Error Estimation of the FEM for the Nikol'skij-Lizorkin Problem with Degeneracy in the Lebesgue Space // Symmetry. 2022. V. 14, Iss. 6. № 1276. WoS, Scopus) **Q2 IF=2.94**
https://doi.org /10.3390/sym14061276.

Отделение математических наук
(ВЦ ДВО РАН)

Получены критерии компактности двумерного оператора Харди прямоугольного интегрирования в весовых пространствах Лебега функций, заданных в первом квадранте. Для случая, когда оператор некомпактен, устанавливаются двусторонние оценки на его меру некомпактности, которая оценивает расстояние от него до подпространства конечномерных операторов, действующих в таких же пространствах. Формулировки всех полученных результатов зависят только от фиксированных параметров задачи — весовых функций и индексов суммирования. В ходе исследования используется метод представления исходного оператора в виде суммы вспомогательных операторов: компактного оператора и операторов с малыми нормами. При этом объединение областей определения функций, на множествах которых заданы вспомогательные операторы, совпадает с первым квадрантом (рис. 6). Поставленная задача впервые решена для двумерного оператора Харди.

Рис. 6. Представление для исходного оператора через вспомогательные операторы

ВЦ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН

Авторы: чл.-корр. РАН В.Д. Степанов (тел. 8-4212-22-72-67, stepanov@mi-ras.ru), д.ф.-м.н. Е.П. Ушакова (тел. 8-4212-22-72-67, elenau@inbox.ru)

Публикация: Stepanov V.D., Ushakova E.P. Compactness of the two-dimensional rectangular Hardy operator // Mathematical Inequalities & Applications. 2022. V. 25, Iss. 2. P. 535-549. (WoS, Scopus) **Q2 IF=1.014**
https://doi.org /10.7153/mia-2022-25-33)

Отделение энергетики, машиностроения, механики и процессов управления
Секция механики
(ВЦ ДВО РАН)

Рассмотрена задача о набегании осветленного турбулентного потока на размываемое дно. Предложена математическая модель задачи, включающая уравнения Рейнольдса, уравнения переноса кинетической энергии и диссипации турбулентности. Для описания изменений донной поверхности используется оригинальное уравнение донных деформаций, построенное на основе аналитической модели движения влекомых наносов. Предложен алгоритм решения задачи с помощью метода контрольных объемов. Численное моделирование задачи показало, что при размыве дна осветленным потоком возникает волновой пакет донных волн малой крутизны (рис. 7, 8). Показано, что скорость движения донных волн, полученных в ходе численного расчета, хорошо согласуется со скоростью движения донных волн, вычисленной по асимптотической аналитической формуле.

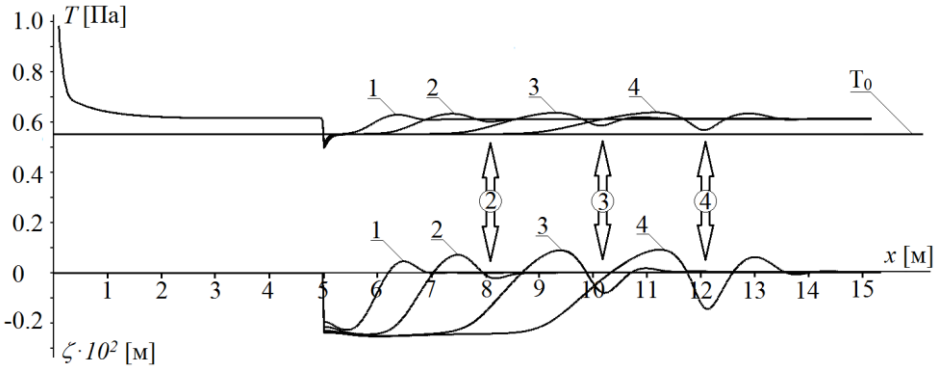

Рис.7. Профили придонного касательного напряжения и уровня дна через 0.5, 1, 2 и 3 часа после начала размыва

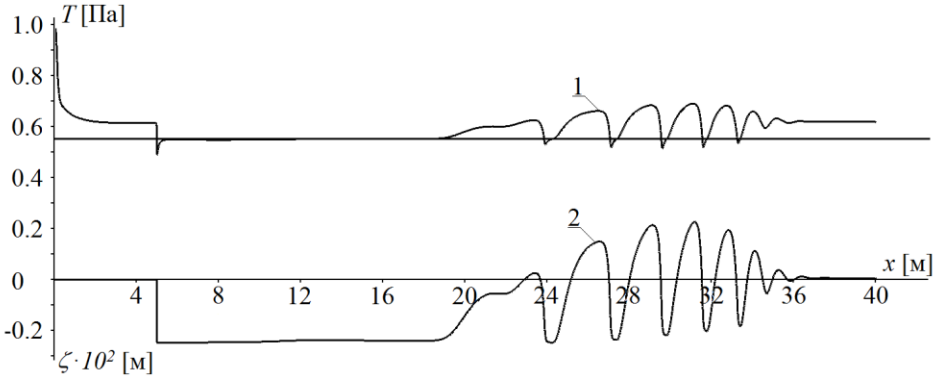

Рис.8. Профили придонного касательного напряжения и уровня дна через 10 часов после начала размыва

ВЦ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН

Авторы: д.ф.-м.н. И.И. Потапов (тел. 8-4212-22-72-67, potapov2i@gmail.com), к.ф.-м.н. К.С. Королёва (тел. 8-4212-22-72-67, snigur.ks@ccfebras.ru)

Публикация: Koroleva K.S., Potapov I.I. Evolution of bed forms produced by clarified turbulent flow over a non-cohesive bed // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2022. V. 63, Iss. 1. P. 67-74. (WoS, Scopus) **Q4 IF=0.561**
https://doi.org/10.15372/PMTF20220111.