

Опыт использования вычислительных систем сверхвысокой производительности для моделирования задач механики сплошной среды

Четверушкин Б.Н.
член-корреспондент РАН
Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН
Институт математического
моделирования РАН

Моделирование на высокопроизводительных вычислительных системах - важнейший фактор научно-технического прогресса. Без такого моделирования невозможно развитие высокотехнологичных отраслей: авиакосмической промышленности, нано и биотехнологий, ядерной энергетики и др.

Возможности использования высокопроизводительных систем для создания новых технологий расширяются за счет того, что моделирование позволяет учесть мультидисциплинарный характер реальных процессов, сложную геометрию конструкции, обеспечить высокую степень точности вычислений, в короткое время провести большое количество расчетов с целью выбора оптимального варианта. Все это позволяет, опираясь на данные высокопроизводительных вычислений, производить модернизацию существующих индустриальных технологий, по сути дела облегчая и ускоряя процесс инноваций. Опираясь на эти факторы, можно сказать, что в ближайшие годы объем мирового рынка программного продукта для индустриальных приложений возрастет в 5-7 раз.

Однако в настоящее время программный продукт, позволяющий использовать в расчетах более 10 TFLOPS на задачу, практически отсутствует. Существующие в настоящее время многопроцессорные программы ориентированы на системы небольшой и средней производительности. Причина заключается в том, что высокопроизводительные вычисления требуют принципиально новых алгоритмов и программного обеспечения. Без их создания использование высокопроизводительных систем для решения индустриальных задач оказывается затруднительным. Следует отметить, что исследования ученых России в решении фундаментальных проблем высокопроизводительных вычислений находится на самом передовом уровне. Перечислим ряд направлений, в развитии которых коллективы наших институтов принимают самое активное участие.

Кинетические и Lattice-Boltzmann схемы

Разрывные конечные элементы (Discontinuous Galerkin)

Параллельные методы линейной алгебры

Неструктурированные и динамически адаптивные сетки

Блочное разбиение (Domain Decomposition)

Рациональное разбиение на подобласти

Визуализация данных высокопроизводительных вычислений

Динамическая балансировка загрузки процессоров

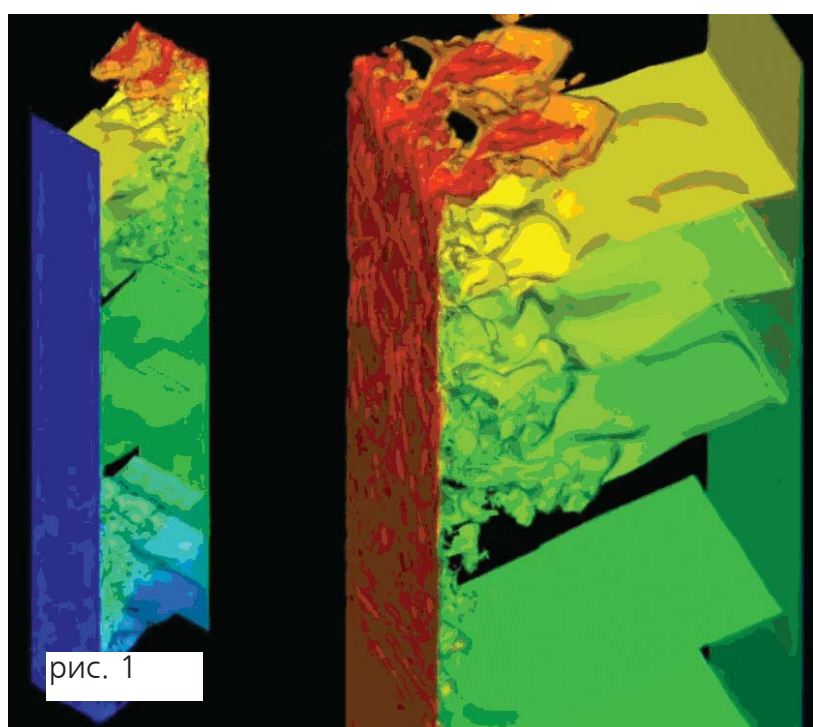
Современные CAD-технологии

Гибридные языки программирования

Обработка баз данных сверхбольшого объема

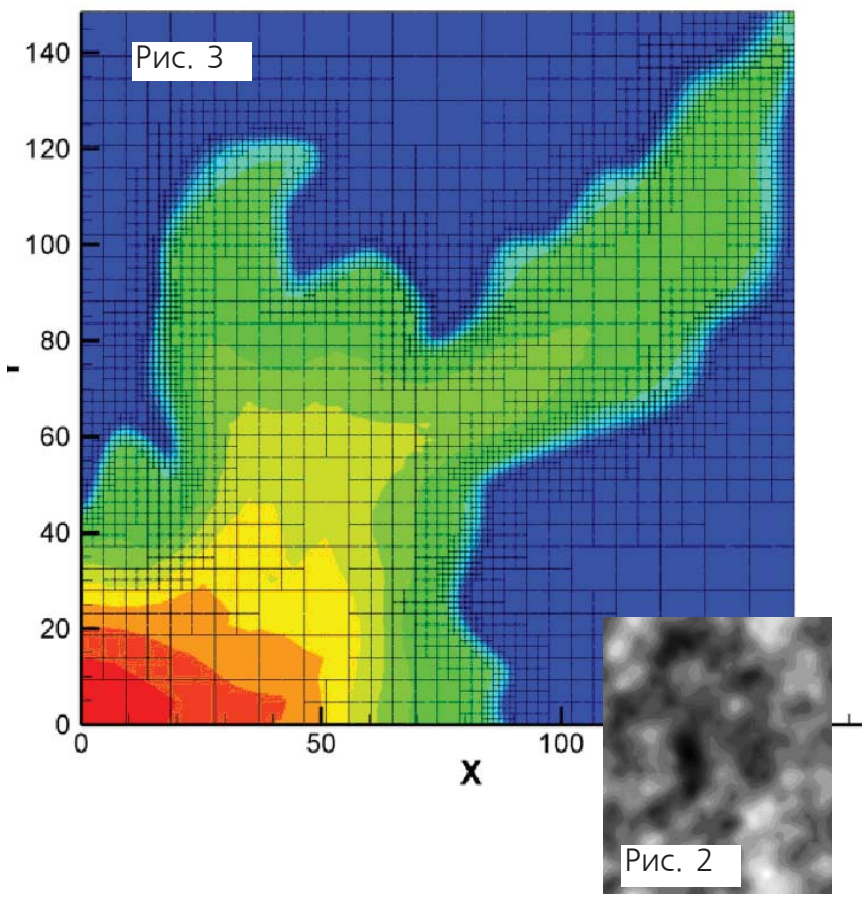
Алгоритмы и программное обеспечение для нетрадиционных архитектур (графические ускорители, ПЛИС)

Приведем некоторые примеры высокопроизводительных вычислений, расчетные программы для которых опираются на использование перечисленных выше фундаментальных разработок.



Моделирование турбулентного переноса в солнечных энергетических установках (рис. 1). Работа проводилась совместно с Каталонским политехническим институтом (Испания) и для расчетов использовался установленный там суперкомпьютер MareNostrum.

Для прямого моделирования использовались 1.1×10^8 узлов расчетной сетки. Остальные представленные расчеты проводились на установленных в Москве суперкомпьютерах МСЦ РАН производительностью 95 TFLOPS и "Чебышев" МГУ (60 TFLOPS).



На рис. 2 представлен процесс распространения загрязняющих компонент в сложной геологической среде, имеющей разброс проницаемости на 4 порядка.

Рис.2. Сотовая структура: поле абсолютной проницаемости с изменением величины на четыре порядка ($10^{-8} - 10^{-12} \text{ м}^2$).

Рис. 3. Адаптация сетки

Содержание нефти в пласте при нестационарном воздействии при 34% открытых ребер

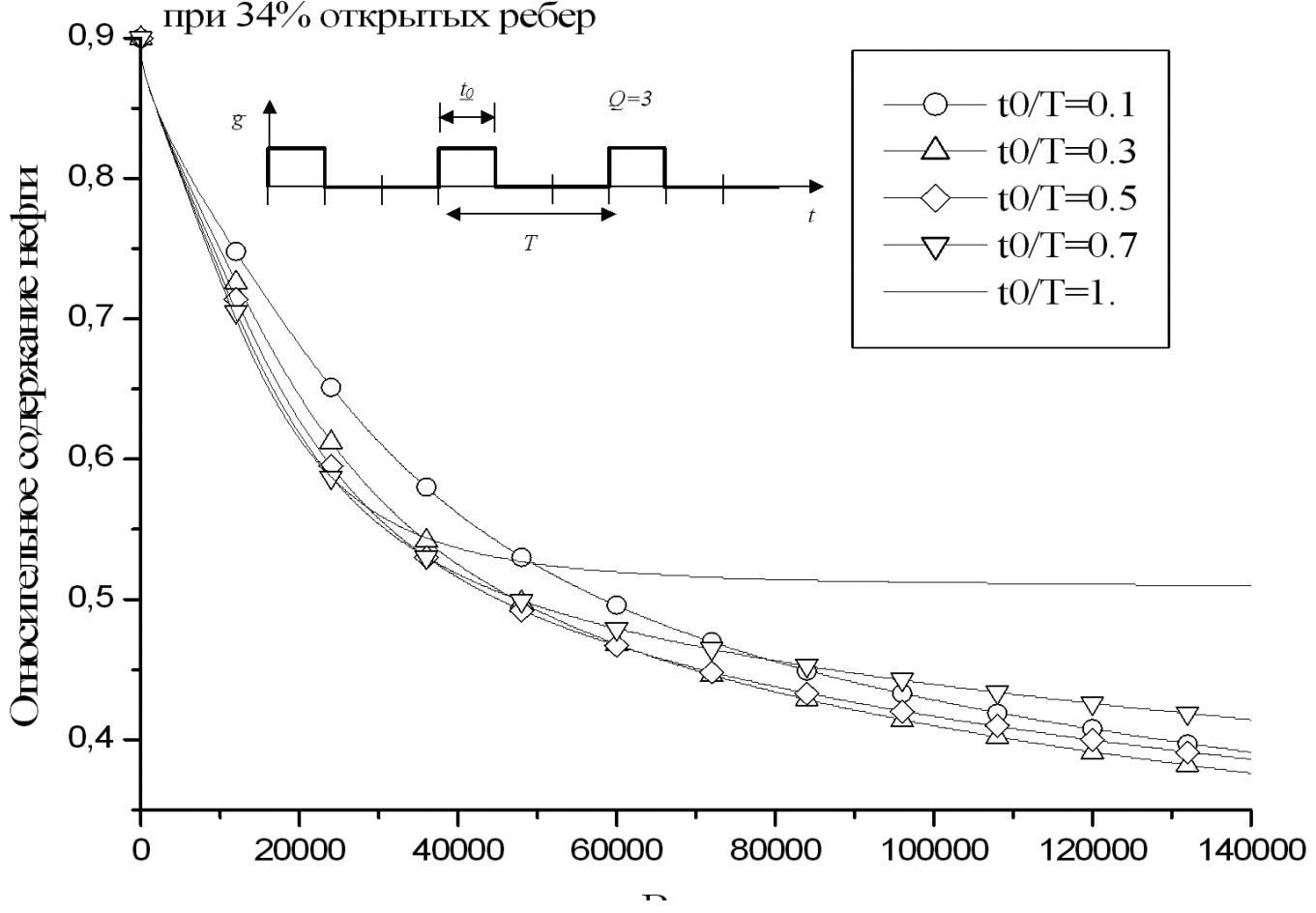
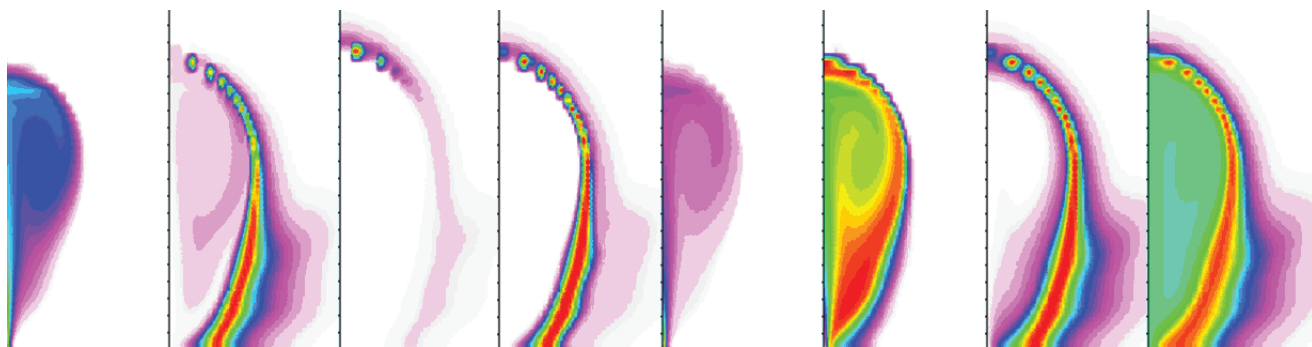


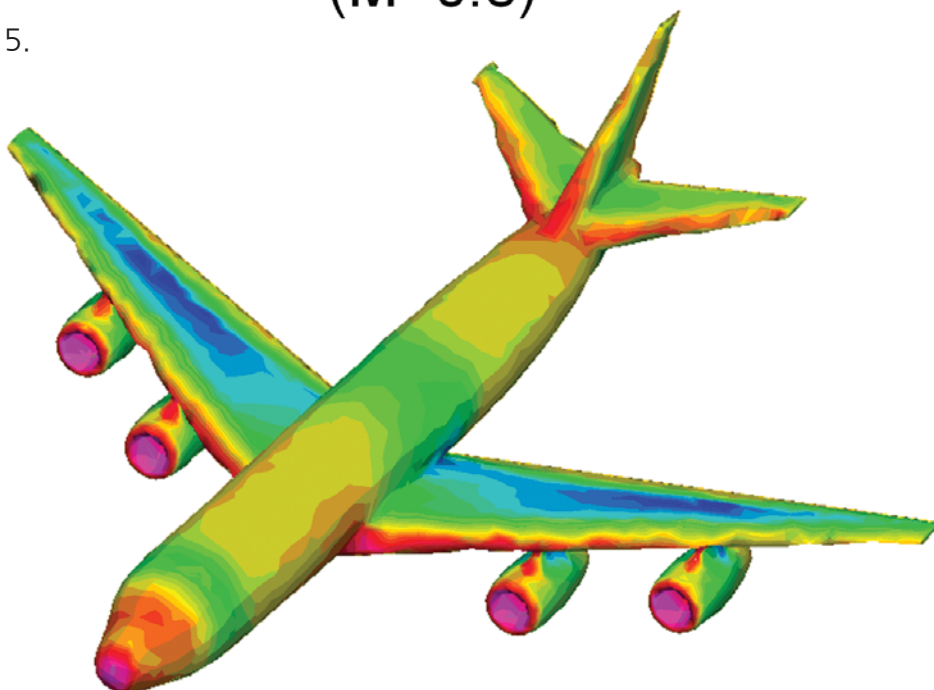
Рис. 4.



На рис.4 представлено моделирование процесса горения метана в воздухе с учетом образования вредных примесей. Учитывалось 19 компонент химических веществ и 64 химические реакции.

Давление на поверхности самолёта ($M=0.8$)

Рис. 5.



На рис.5-6 представлены результаты моделирования звукопоглощающих конструкций (ЗПК)

Рис. 6. вычислительные эксперименты по ЗПК



Рис. 6

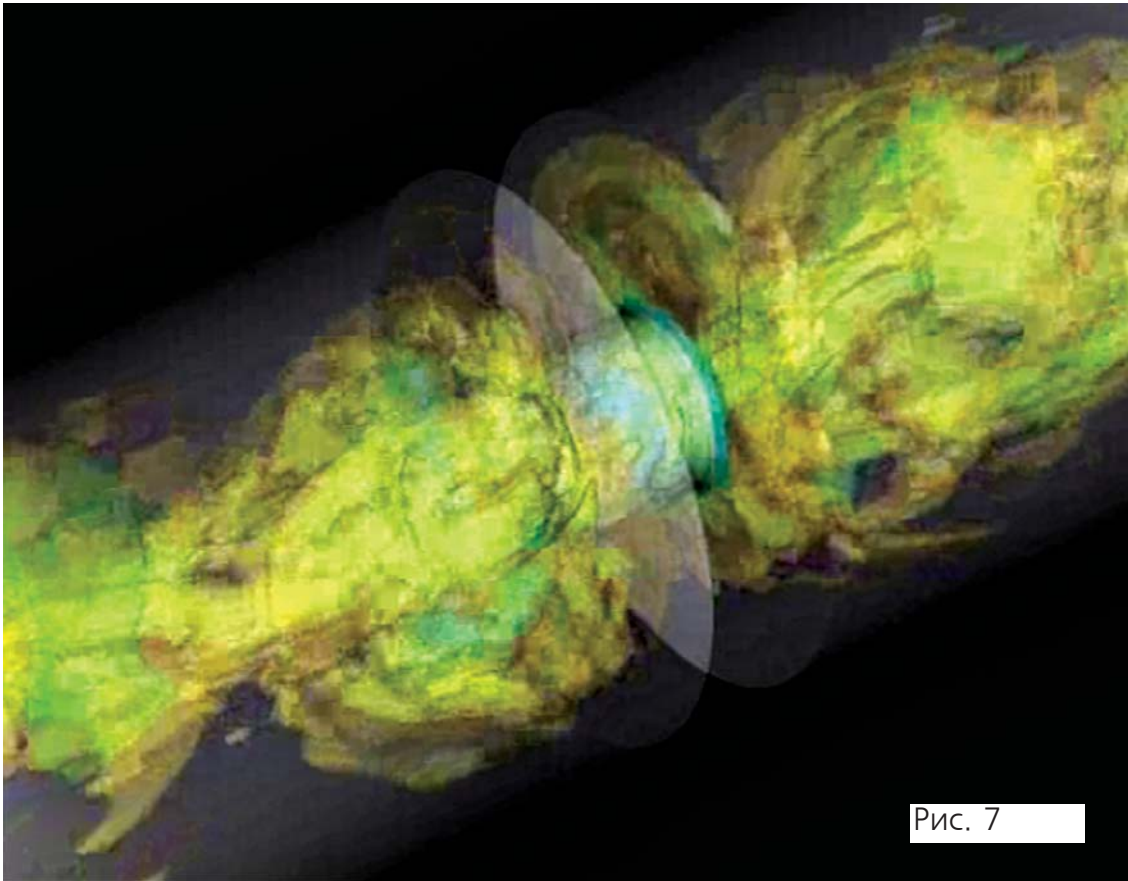


Рис. 7

Рис.7. Течение в отверстии резонаторной камеры.
 300×10^6 пространственных узлов, 30 Tflops, MPI + OpenMP

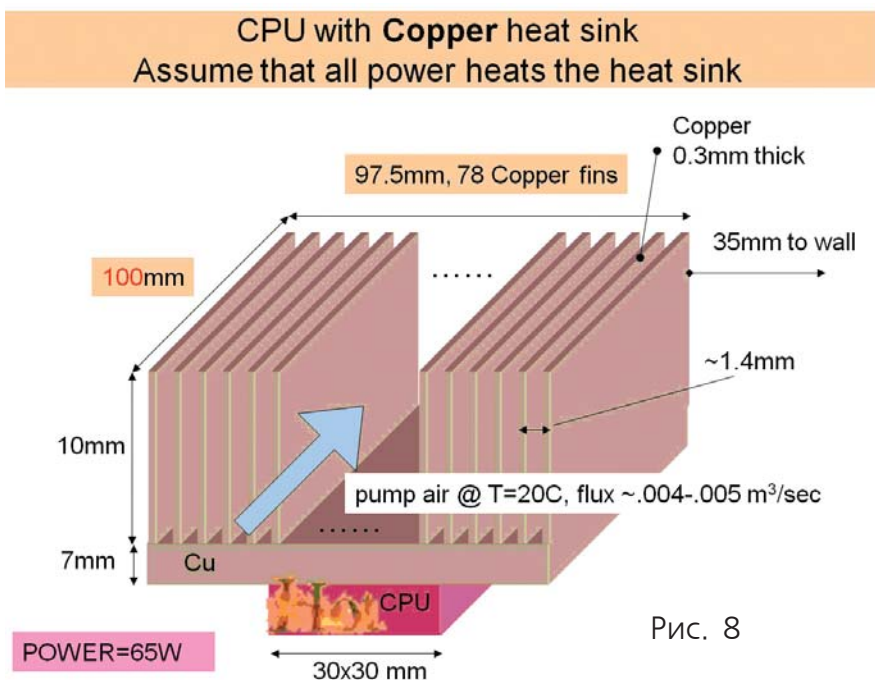
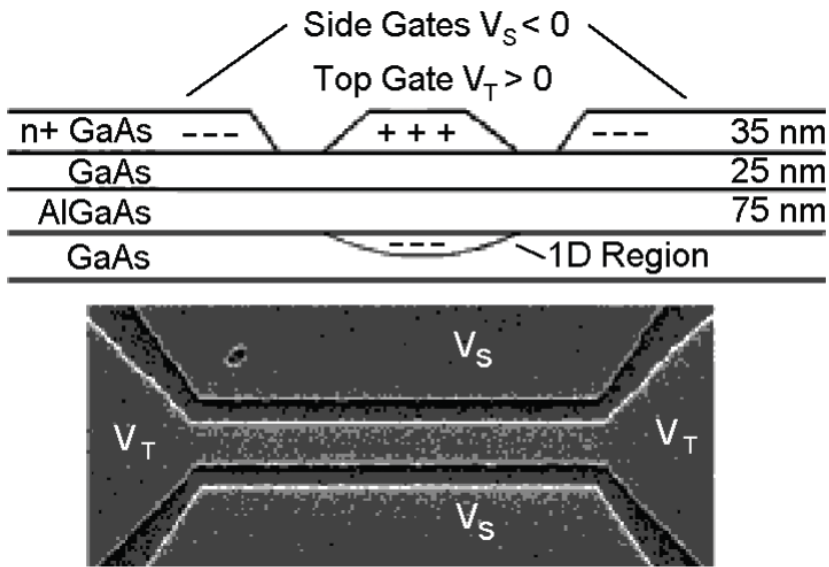


Рис. 8

Другим направлением исследований является моделирование задач микро и наноэлектроники. На рис. 8 показана схема охлаждения процессора с помощью прохождения воздушных потоков между большим количеством медных пластин.

Для этого расчета использовалось 5×10^8 вычислительных узлов и задействована рекордная вычислительная производительность в 90 TFLOPS.

Рис. 9



На рис. 9 представлена схема транзистора характерных наноразмеров.

Рис. 9. Моделирование электронного транспорта в наноструктуре с квантовым каналом

Показана эффективность параллельной обработки с учетом использования большого числа (более 10^3) параллельных процессов (рис.10).

Рис. 10. Эффективность распараллеливания. МВС: СКИФ МГУ. Сетка: 600x24000.

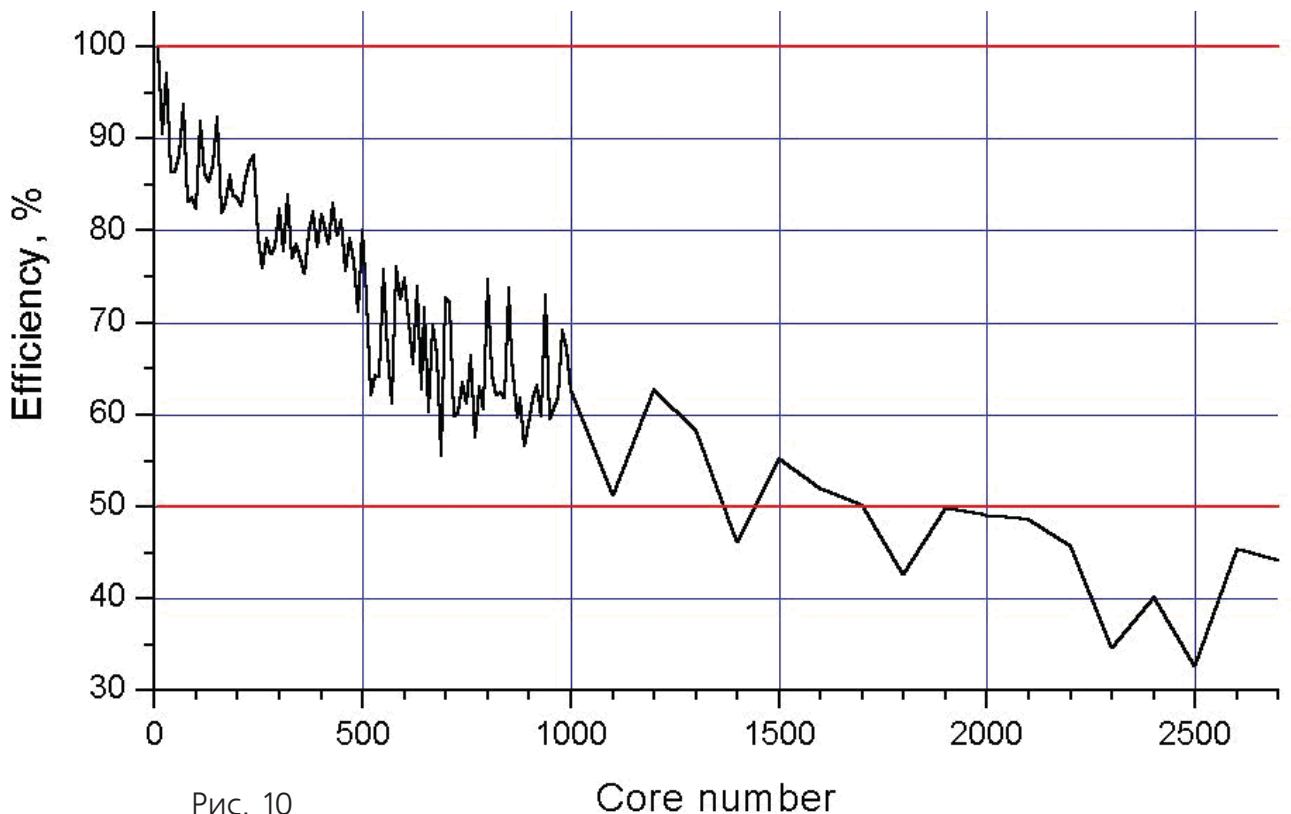


Рис. 10

Core number

Рис. 11. Результаты моделирования: эффект зарядовой поляризации

Рис. 12. Результаты моделирования: эффект спиновой поляризации

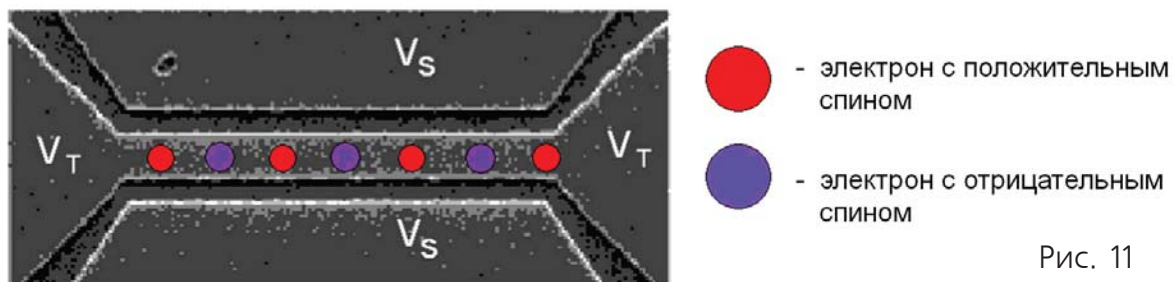


Рис. 11

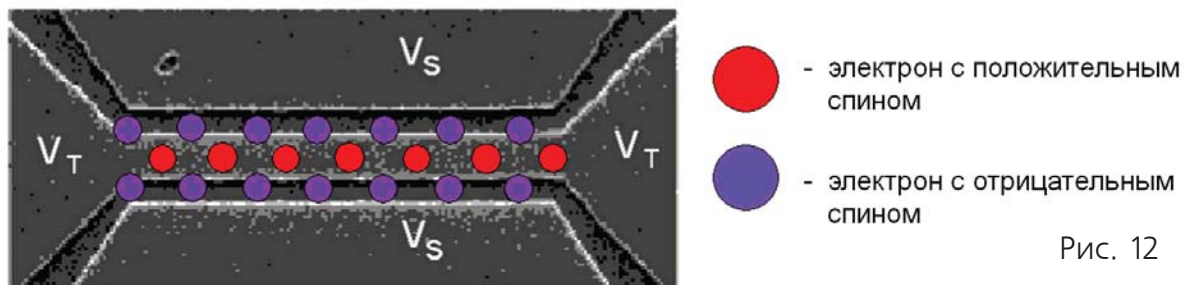


Рис. 12

В заключение приведем еще один пример использования высокопроизводительных систем для моделирования транспортной ситуации на улицах городов и магистралях. Были разработаны оригинальные математические модели и методы, позволяющие учитывать двумерный характер дорог с учетом описания съездов, въездов, расширения и сужения магистрали. На рис. 12 показано моделирование временного расширения дороги при интенсивном движении. Заметим, что такая ситуация встречается, когда недисциплинированные водители выезжают на встречную полосу, а потом возвращаются в основной поток. Показано, что при интенсивном движении такая ситуация приводит к общему снижению пропускной способности магистрали.

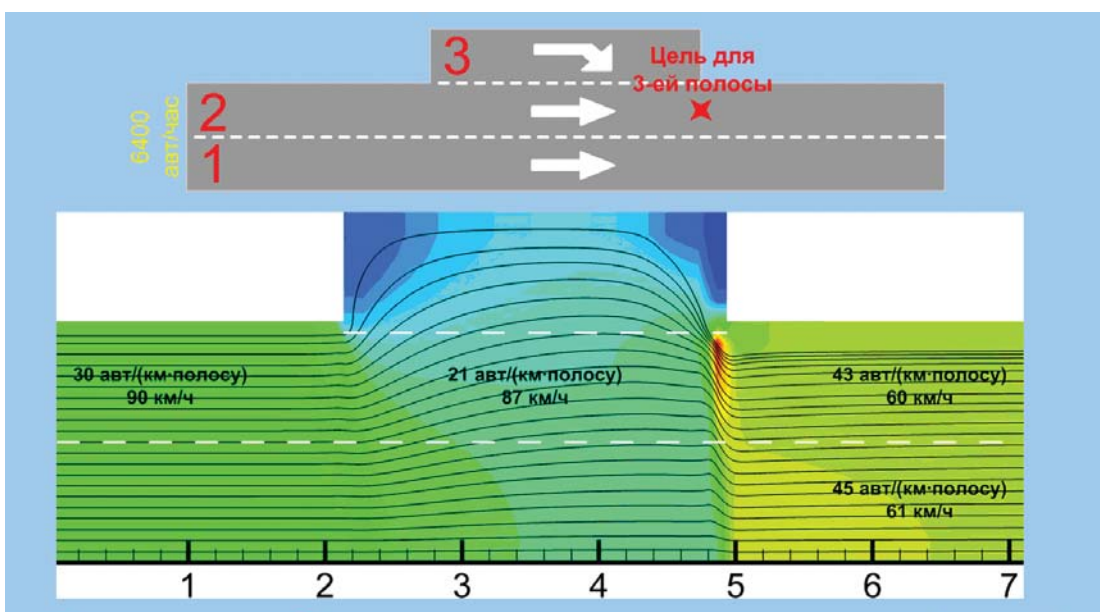


Рис. 13

Рис. 13. Временное расширение дороги. Пропускная способность дороги падает по сравнению с прямой дорогой. Для получения преимущества в пропускной способности расширение дороги должно быть достаточно длинным.

Заключение

1. Существуют блестящие перспективы математического моделирования на базе использования высокопроизводительных вычислительных систем. Однако эти возможности могут быть реализованы лишь при решении целого ряда проблем силами фундаментальной науки. Без решения этих проблем создание полноценного программного продукта невозможно.
2. Успех применения СуперЭВМ в значительной мере зависит от наличия кадров высшей квалификации, подготовке которых необходимо уделять первоочередное внимание.
3. Россия в области использования вычислительных систем сверхвысокой производительности находится в одинаковых стартовых условиях с передовыми индустриальными странами. Наряду с созданием СуперЭВМ и программного продукта для них необходимо обратить серьезное внимание на фундаментальные исследования в области высокопроизводительных вычислений и подготовку кадров высшей квалификации. В результате этих усилий наша страна имеет возможность получить в ближайшие годы мощный инструмент научно-технического прогресса и инноваций, а также занять достойную нишу на мировом рынке высокопроизводительного программного продукта.