



РФЯЦ-ВНИИЭФ
РОСАТОМ

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ И ТЕНДЕНЦИИ В РАЗВИТИИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Шагалиев Рашит Мирзагалиевич



ТЕХНОЛОГИИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ, ВКЛЮЧАЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ ИНДУСТРИАЛЬНЫХ СИСТЕМ. ТЕНДЕНЦИИ И НОВЫЕ ВЫЗОВЫ

Имеют место:

Рост роли и места высокопроизводительных вычислений при проектировании и создании сложных технических систем и изделий. Обусловлено:

- Усложнением конструкций, повышением технических характеристик
- Введением в конструкции элементов искусственного интеллекта
- Ограниченными возможностями натуральных испытаний и экспериментальных исследований
- Требованиями существенного сокращения сроков создания

Существенное расширение классов решаемых задач

Необходимость развития полностью отечественного конкурентоспособного программного обеспечения для комплексного суперкомпьютерного моделирования и инженерного анализа

Требуется переход от традиционной технологии суперкомпьютерного многовариантного моделирования к новой технологии виртуальных (компьютерных) испытаний систем и изделий. Невозможно без тесной кооперации ученых и специалистов из разных областей (математики, физики, конструирования, программирования и др.) в силу сложного междисциплинарного характера работ



ПРИМЕР

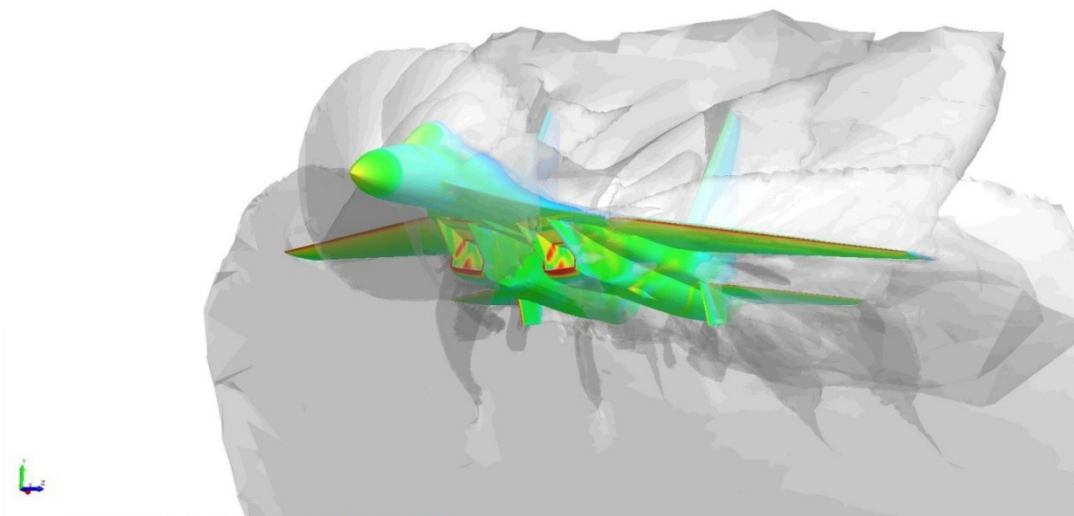
ИССЛЕДОВАНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ АЭРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МАНЕВРЕННОГО ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА НА СВЕРХЗВУКОВЫХ РЕЖИМАХ С УЧЕТОМ РАБОТЫ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ



РФЯЦ-ВНИИЭФ
РОСАТОМ

СУЩЕСТВУЮЩАЯ ТЕХНОЛОГИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

ОСНОВЫВАЕТСЯ НА ТРЕХМЕРНЫХ МНОГОВАРИАНТНЫХ РАСЧЕТАХ В СТРОГО ЗАДАННЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ПОСТАНОВКАХ. ЦЕЛЬ РАСЧЕТОВ – ИССЛЕДОВАНИЕ УРОВНЯ ДОСТОВЕРНОСТИ ПРОГНОЗИРУЕМЫХ ХАРАКТЕРИСТИК, СНИЖЕНИЕ КОЛИЧЕСТВА ПРОДУВОК. В РАСЧЕТАХ ВАРЬИРУЮТСЯ ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ (начальные и граничные условия, свойства среды и т.п.). Результаты расчетов являются вспомогательным материалом при разработке и оптимизации изделия.



ПРИМЕР

ИССЛЕДОВАНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ АЭРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МАНЕВРЕННОГО ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА НА СВЕРХЗВУКОВЫХ РЕЖИМАХ С УЧЕТОМ РАБОТЫ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ



ТЕХНОЛОГИЯ ВИРТУАЛЬНЫХ ИСПЫТАНИЙ

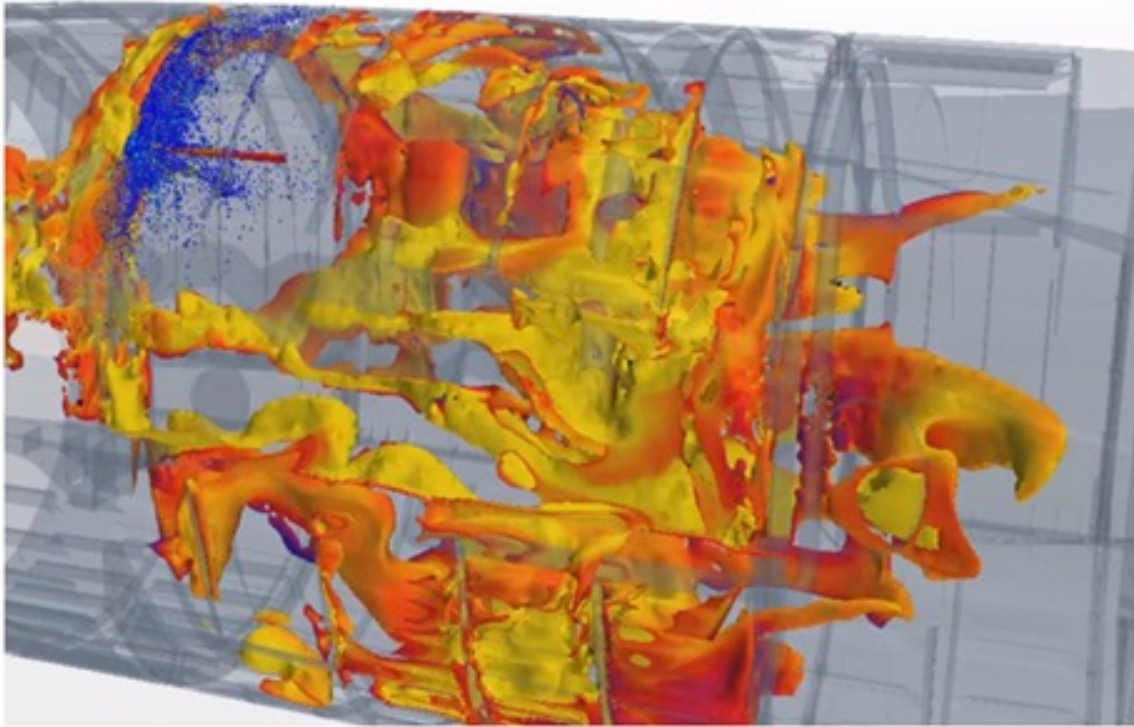
ПОЛНОМАСШТАБНАЯ ТРЕХМЕРНАЯ ВИРТУАЛЬНАЯ (КОМПЬЮТЕРНАЯ) МОДЕЛЬ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕЖИМОВ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА

ВАЛИДАЦИЯ и АТТЕСТАЦИЯ ВИРТУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ, В ТОМ ЧИСЛЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ РЕЗУЛЬТАТОВ СТЕДОВЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И НАТУРНЫХ ИСПЫТАНИЙ

КОМПЛЕКСНЫЕ РАСЧЕТНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА С УЧЕТОМ БОЛЬШОГО ЧИСЛА НЕЛИНЕЙНЫХ ПАРАМЕТРОВ (РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМОВ МАНЕВРИРОВАНИЯ, ПОГОДНЫХ И ДРУГИХ ВНЕШНИХ ФАКТОРОВ, ДИАПАЗОНА НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ И Т.П.)

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ ЯВЛЯЮТСЯ НАРЯДУ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ЛЕГИТИМНОЙ ОСНОВОЙ СОЗДАНИЯ И СДАЧИ В ЭКСПЛУАТАЦИЮ

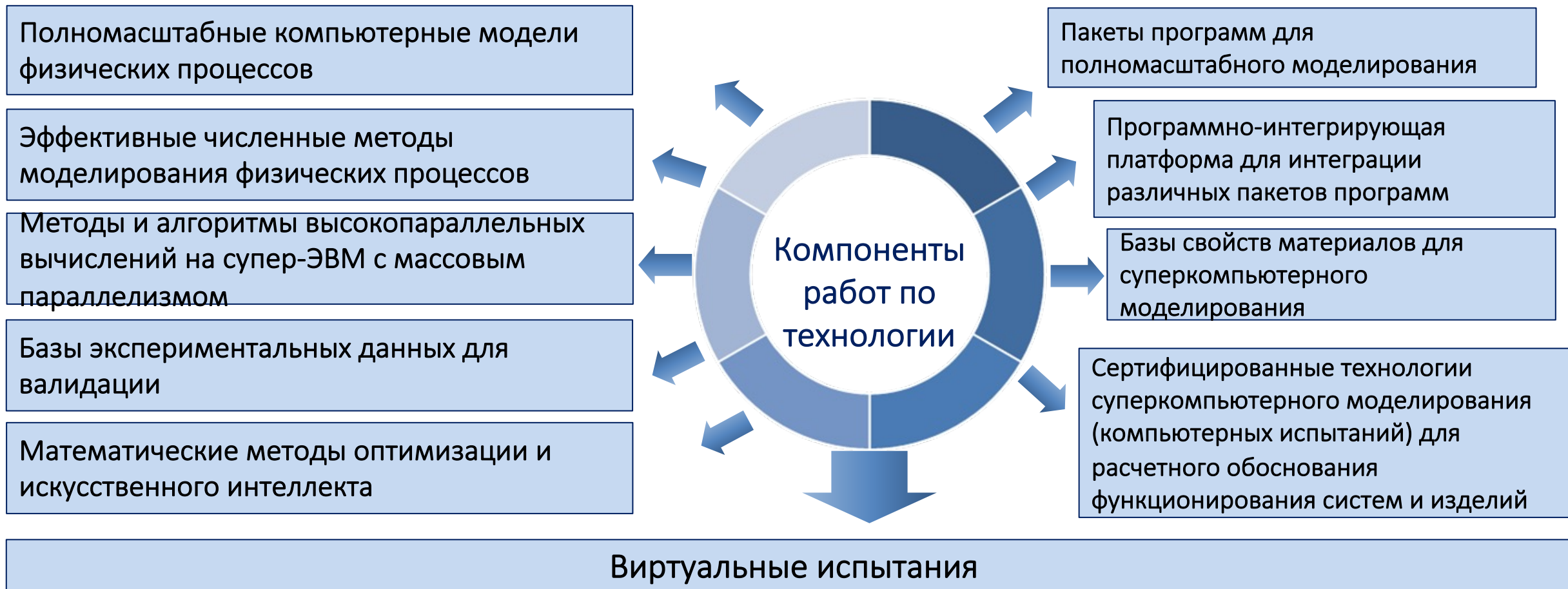
ВИРТУАЛЬНЫЕ ИСПЫТАНИЯ. ПАКЕТ ПРОГРАММ ЛОГОС.
ПРИМЕР: МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ПОЖАРОТУШЕНИЯ ДЛЯ АВИАЦИОННОГО КОМПЛЕКСА



Высокоточное комплексное моделирование системы пожаротушения отсеков двигателя и вспомогательной силовой установки по программе «ЛОГОС» **позволило отказаться от проведения стендовой наземной отработки.**

Моделируемые процессы: газодинамика, радиационный теплообмен, молекулярная и конвективная теплопроводность, турбулентность, многокомпонентные течения, горение и испарение

ТЕХНОЛОГИЯ ВИРТУАЛЬНЫХ (КОМПЬЮТЕРНЫХ) ИСПЫТАНИЙ. СОСТАВНЫЕ ЧАСТИ РАБОТЫ ПО СОЗДАНИЮ



Направлены на:



Сокращение количества натурных экспериментов



Повышение качества изделий



Сокращение стоимости и сроков разработки



Сопровождение на этапах жизненного цикла



Широкая кооперация

Моделирование многофазных течений и горения:

- ✓ НИИСИ РАН,
- ✓ МГУ им. М.В. Ломоносова и др.

Турбулентные течения:

- ✓ СПбГПУ,
- ✓ ИТПМ СО РАН
- ✓ БГТУ Военмех им.Устинова и др.

Методы и технологии суперкомпьютерного моделирования:

МГУ им. М.В. Ломоносова

- | | |
|----------------------|------------------------------|
| ✓ ИПФ РАН | ✓ ННГУ им. Н.И. Лобачевского |
| ✓ НИИСИ РАН | ✓ НГТУ им.Алекссева |
| ✓ ИПМ им.Келдыша РАН | ✓ МАИ |
| ✓ ВЦ РАН | ✓ МГТУ им. Баумана |
| ✓ ИВМиМГ СО РАН | ✓ СПбПУ |
| ✓ | ✓ КФУ и др. |

Прочность:

- ✓ ЗАО «АвтоМеханика»
- ✓ НГТУ им.Алекссева
- ✓ ННГУ им. Н.И. Лобачевского
- ✓ СГАУ им.Королева и др.

Развитие методов и моделей фильтрации жидкости:

- ✓ МГУ им. М.В. Ломоносова
- ✓ Геофак СПбГУ
- ✓ КФУ
- ✓ МСЦ РАН
- ✓ НИИСИ РАН
- ✓ ИГЭ им.Сергеева РАН и др.

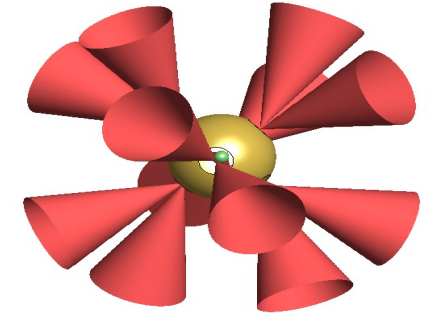
Индустриальные заказчики

- ✓ ПАО «ОАК», ктрв, ,циам,камаз,центр келдыша
- ✓ Малахит
- ✓ Крыловский центр и др.

ФИЗИКА ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЛАЗЕРНОГО ТЕРМОЯДЕРНОГО СИНТЕЗА. ПРИМЕРЫ РЕШАЕМЫХ ЗАДАЧ

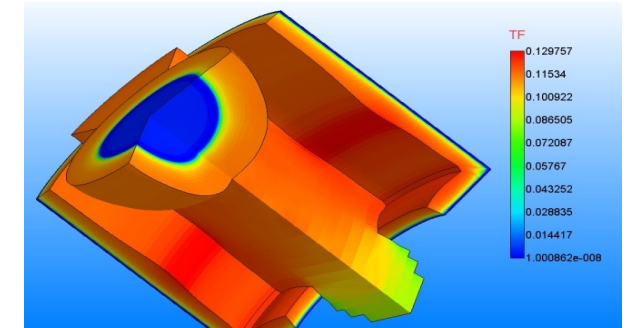
ЗАДАЧИ КОНВЕРСИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В РЕНТГЕНОВСКОЕ В УСЛОВИЯХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА СУЩЕСТВУЮЩИХ И ПЕРСПЕКТИВНЫХ ЛАЗЕРНО-ФИЗИЧЕСКИХ УСТАНОВКАХ

ЦЕЛЬ: корректное описание энерговклада от лазерного источника



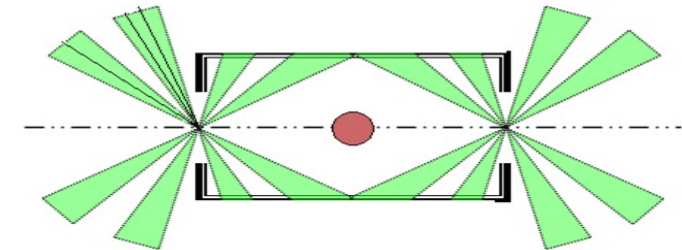
ЗАДАЧИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БОКСАХ-КОНВЕРТОРАХ РАЗЛИЧНОЙ КОНФИГУРАЦИИ

ЦЕЛЬ: изучение уравнений состояний и пробегов в веществах; изучение особенностей поведения конструкций при воздействии лазерного и рентгеновского излучений



ЗАДАЧИ СЖАТИЯ И ГОРЕНИЯ МИШЕНЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ DT-ТОПЛИВО

ЦЕЛЬ: получение расчетных параметров зажигания



- **Двухтемпературная газодинамика**

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \text{grad}(p_i + p_e + p_f + Q); \quad \frac{dz}{dt} = \mathbf{u}; \quad \frac{d\rho}{dt} = -\rho \cdot \text{div } \mathbf{u};$$

$$\frac{dE_e}{dt} = -p_e \frac{d(1/\rho)}{dt}; \quad \frac{dE_i}{dt} = -(p_i + Q) \frac{d(1/\rho)}{dt};$$

- **Многогрупповой (спектральный) перенос неравновесного излучения в кинетической постановке с учетом взаимодействия излучения со средой**

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{c} \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + L \varepsilon_i + \chi_{in} \varepsilon_i = \frac{\chi_{ia}}{2\pi} \varepsilon_{ir} + \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^{wl} a_{ij} \chi_{js} \varepsilon_j^{(0)} \\ \rho \frac{\partial E}{\partial t} = \sum_{i=1}^{wl} \chi_{in} \varepsilon_i^{(0)} \Delta \omega_i - \sum_{i=1}^{wl} \chi_{ia} \varepsilon_{ir} \Delta \omega_i - \sum_{i=1}^{wl} \sum_{j=1}^{wl} a_{ij} \chi_{js} \varepsilon_j^{(0)} \Delta \omega_i. \end{array} \right. ;$$

- **Кинетика населенности**

- **Перенос неравновесной энергии электронами и ионами**

$$\frac{\partial E_e}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \text{div}(\chi_e \cdot \text{grad } T_e) + \Theta_{ei}(T_i - T_e),$$

$$\frac{\partial E_i}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \text{div}(\chi_i \cdot \text{grad } T_i) + \Theta_{ei}(T_e - T_i);$$

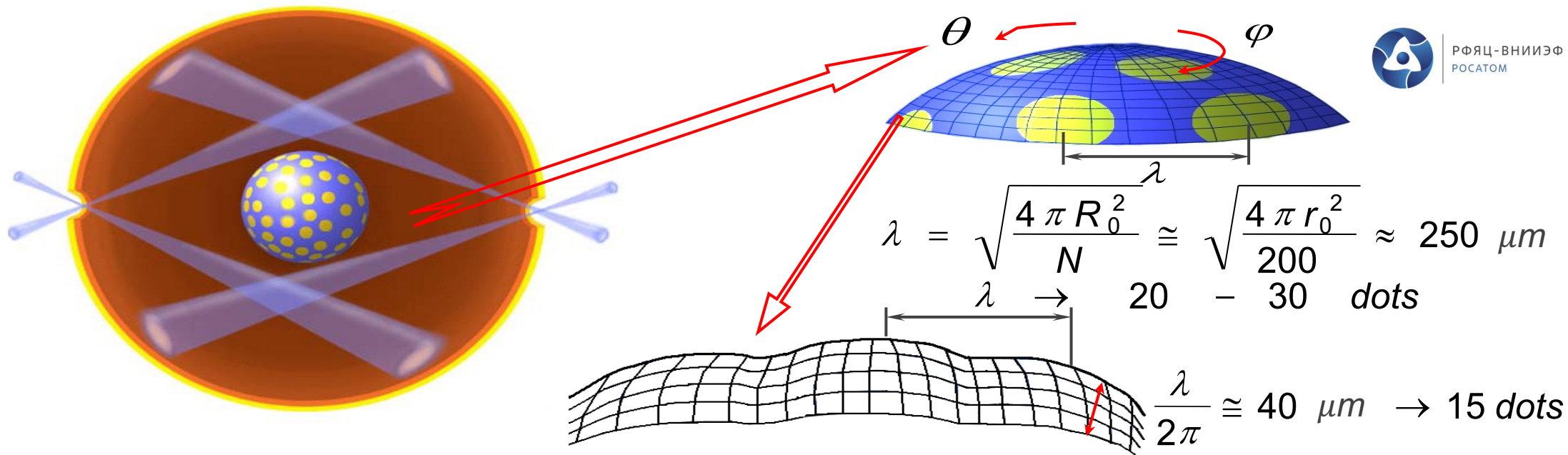
- **Перенос энергии лазерным излучением с учетом его рассеяния и поглощения**

- **Перенос нейтронов в многогрупповом (спектральном) кинетическом приближении**

- **Кинетика нейтронно-ядерного и термоядерного взаимодействия**

- **Развитие различного вида неустойчивостей (Рихтмайера-Мешкова, Кельвина-Гельмгольца и др.)**

- **Турбулентное перемешивание**



Необходимое число точек на поверхности мишени	$1000 \cdot 1000 \cdot 10^6$
Необходимое число точек по радиусу	1000
Необходимое число групп по энергии фотонов и энергии α -частиц	1000
Число направлений полета частиц в фазовом пространстве	~ 2000
Число арифметических операций, требуемых на расчет одной точки фазового пространства на одном временном шаге	$2 \cdot 10^3$
Суммарное по всем точкам число арифметических операций, требуемых на расчет одного временного шага	$4 \cdot 10^{18}$
Количество временных шагов	10^5
Требуемая производительность супер-ЭВМ для расчета стадии сжатия термоядерной мишени для проведения сквозных расчетов	1-2 Эксафлоп/с

3D МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА СПЕКТРАЛЬНОГО НЕРАВНОВЕСТНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

$$\frac{1}{v} \frac{\partial N}{\partial t} + \mu \frac{\partial N}{\partial x} + \eta \frac{\partial N}{\partial y} + \xi \frac{\partial N}{\partial z} + \alpha N = \frac{1}{4\pi} \int_{v_1}^{v_2} \int_{-1}^1 \int_0^\pi \beta N d\varphi d\mu dv' + \frac{Q}{4\pi}$$

$N = N(x, y, z, \mu, \varphi, v, t)$ – искомая функция потока частиц в фазовом пространстве

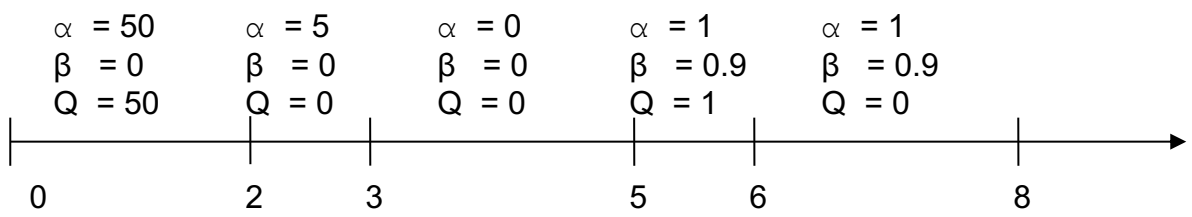
Расчетные параметры:

- 500 энергетических групп
- 5 000 направлений полета частиц в фазовом пространстве
- 500 млн пространственных ячеек
- До 100 000 временных шагов
- 10^4 вычислительных ядер супер-ЭВМ

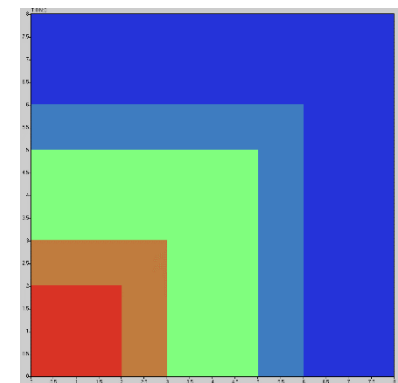
Используемое количество дискретных сеточных элементов в фазовом пространстве (текущее состояние) до 10^{15}

Необходимо использование методов глубокой многоуровневой адаптации сеток к особенностям сеточного решения задачи в фазовом пространстве

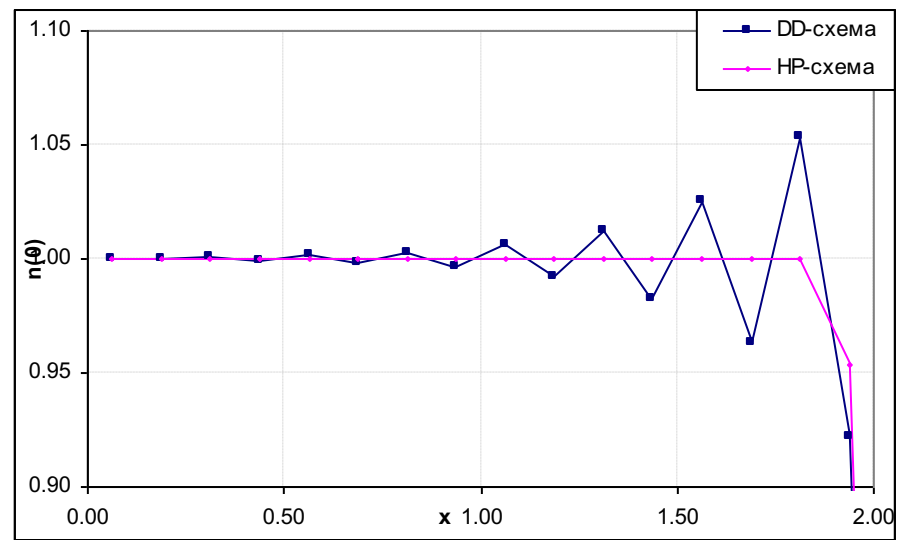
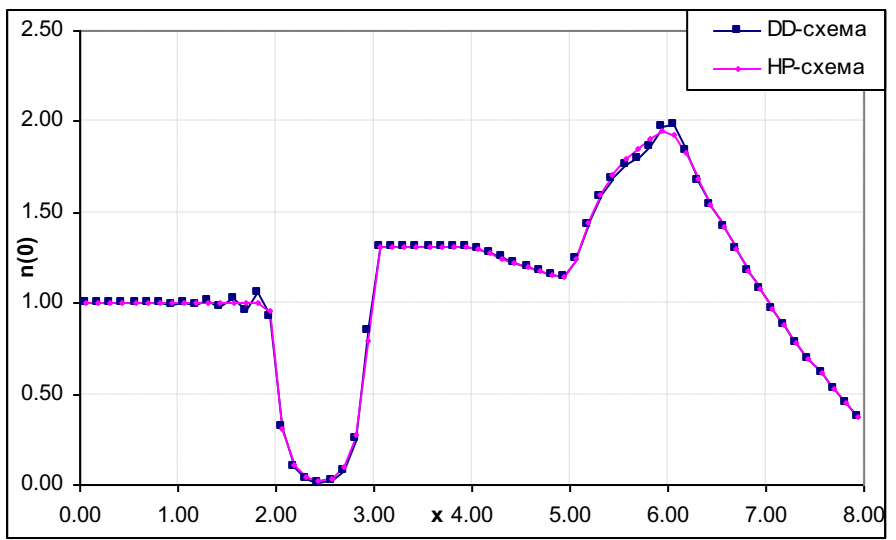
РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ЧАСТИЦ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛИНЕЙНОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ (DD) И НЕЛИНЕЙНОЙ РЕБЕРНОЙ СХЕМЫ (НР). ЗАДАЧА РИДА



Геометрия и параметры расчётной системы



Расчётная геометрия



Профили решения на сетке 128*128 (), kol_n = 4

АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ПО РАЗВИТИЮ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ И ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ. 3D МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

Турбулентность – существенно трехмерный нестационарный процесс, характеризующийся широким спектром пространственно-временных масштабов.

Развитая стадия турбулентного перемешивания : Никифорова-Козлова, RANS, DES, IDDS модели и др.

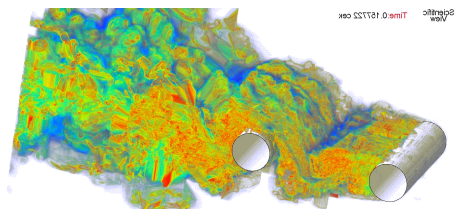
Актуальная задача – разработка эффективных методов *прямого численного моделирования развития неустойчивости (Рихтмайера-Мешкова, Кельвина-Гельмгольца, Рэля-Тейлора)*.

Необходимо применение в комбинации с **методами многоуровневой адаптации**

АДХ летательного аппарата
на больших углах атаки



Моделирование задач акустики



Физика высоких плотностей энергии

Необходимые вычислительные ресурсы

Моделирование средних частот спектра:
Размерность сетки на 1 расчет:
~ 100 млн.ячеек

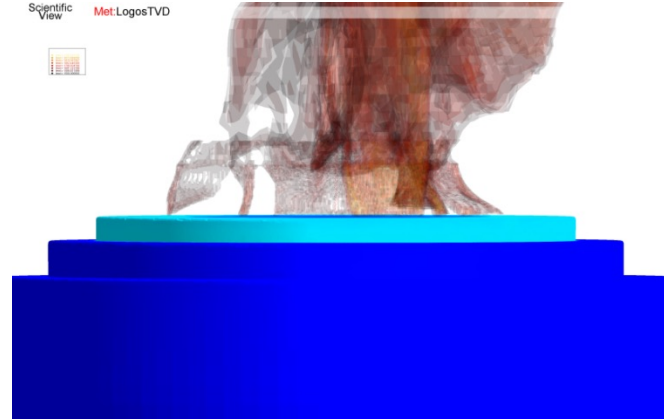
Моделирование высоких частот спектра:
Размерность сетки на 1 расчет:
> 400 млн.ячеек

Моделирование частот в широком диапазоне:
Размерность сетки на 1 расчет:
>40 млрд.ячеек

Воспламенение керосина при попадании на пластину с температурой 500°C



Распределение температуры в эксперименте

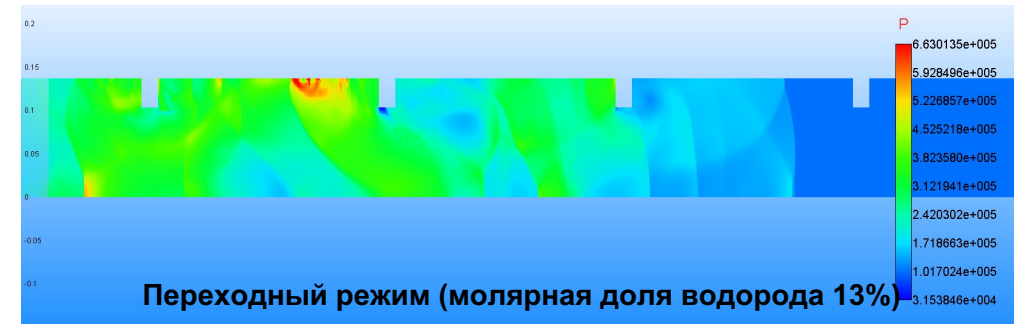
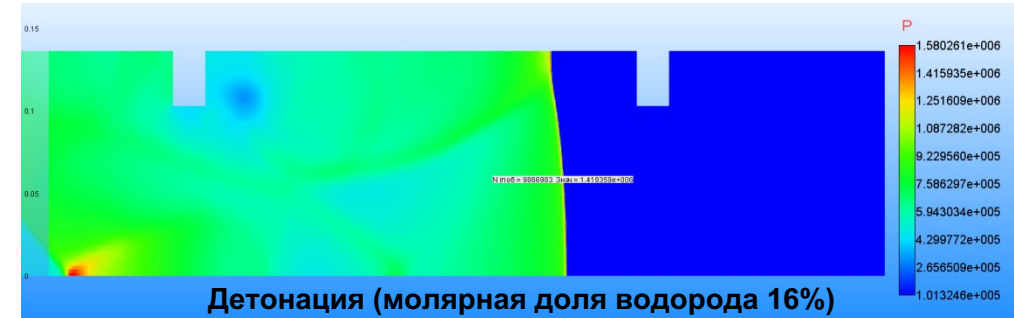


Распределение температуры в расчете

Необходимые вычислительные ресурсы

Размерность сетки на 1 расчет: - ~400-700 млн.ячеек.
Время одно расчета: - ~ 14 дней.

Переход горения водорода в детонацию



Необходим учет процессов

Многофазность
Турбулентность
Химическая кинетика

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ И АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ С МАССОВЫМ ПАРАЛЛЕЛИЗМОМ – ОДНА ИЗ ВАЖНЫХ И ПРИОРИТЕТНЫХ ЗАДАЧ

- Распараллеливание на распределенной памяти с использованием MPI
- Распараллеливание на общей памяти с использованием OpenMP
- Распараллеливание внутри ядра – векторизация циклов, параллелизм операций в широкой команде (Эльбрус)
- Использование нерегулярной декомпозиции задачи по процессорным ядрам
- Динамическая балансировка вычислительной нагрузки на процессорные ядра

Комплексное применение этих методов распараллеливания в сочетании с широким использованием адаптивных сеточных методов позволяют проводить расчеты задач с **десятками миллиардов счетных точек** с эффективностью распараллеливания не ниже **60% на десятках тысяч процессорных ядер**, а в ближнесрочной перспективе на число ядер $\sim 10^6$

Необходимо решить следующие задачи:

- Выбор оптимальной модели параллельного программирования
- Разработка и реализация эффективных алгоритмов распараллеливания в рамках выбранной модели
- Выработка универсальной методологии оптимизации кодов под различную архитектуру
- Определение основных ограничителей производительности на новой суперЭВМ
- Создание и ввод в опытную эксплуатацию новой версии комплекса программ Логос

ОПТИМИЗАЦИЯ КОДОВ ПОД АРХИТЕКТУРУ СУПЕР-ЭВМ С ПРОЦЕССОРАМИ ЭЛЬБРУС-8СВ



Средства:

- низкоуровневой оптимизации:
 - БМФ (ПАО «ИНЭУМ им И.С. Брука») Библиотека математических функций, компоненты для построения решателей Логос Прочность и Логос Тепло
 - IALM (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ») Библиотека матрично-векторных операций малой размерности, компоненты для построения решателей Логос Аэро и Логос Гидро
- высокоуровневой оптимизации:
 - Методология (ПАО «ИНЭУМ им И.С. Брука») Формализованное описание на примере оптимизации синтетических тестов Логос

Критерий качества: $\text{узел Эльбрус-8СВ} \geq 0.6 \text{ узла Intel Broadwell}$ по производительности кода инженерного анализа (Логос)

$R_{\text{peak}}(4 \text{ Эльбрус-8СВ}) = 1152 \text{ Гфлоп/с}$, $R_{\text{peak}}(2 \text{ Intel Broadwell}) = 1164 \text{ Гфлоп/с}$

Соотношение производительностей кодов Эльбрус/Intel:

- Для синтетических тестов Логос
 - Исходная версия (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ») - 0.23 (среднее), 0.1 (худшее)
 - Оптимизированная версия (ПАО «ИНЭУМ им И.С. Брука») - 0.94 (среднее), 0.6 (худшее)
- Для кода инженерного анализа Логос
 - Исходная версия - 0.17 (среднее), 0.12 (худшее)
 - Оптимизированная версия - 0.6 (прогноз)
 - Задачи динамической прочности простых конструкций - 0.59 (факт.)

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. РАЗРАБОТКА ОТЕЧЕСТВЕННОГО ПРИКЛАДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИНЖЕНЕРНОГО АНАЛИЗА

Многофункциональный пакет программ Логос (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»)

- ✓ *Уровень разработки* – конкурентоспособный многофункциональный полностью отечественный программный комплекс
- ✓ *Уровень внедрения* – оснащено более 100 предприятий, 1 000 рабочих мест
- ✓ *Кроссплатформенность* (возможность использования) – от ПЭВМ и рабочих станций до сверхмощных супер-ЭВМ
- ✓ Включен в реестр отечественного ПО
- ✓ Количество специализированных версий для отраслей – 11 (5 в разработке)

Моделируемые процессы:

Аэро-, гидро-, газодинамика, теплоперенос, турбулентность, прочность, деформация, разрушение, кинетика горения ВВ, обледенение, многофазная фильтрация и др.

Области применения:

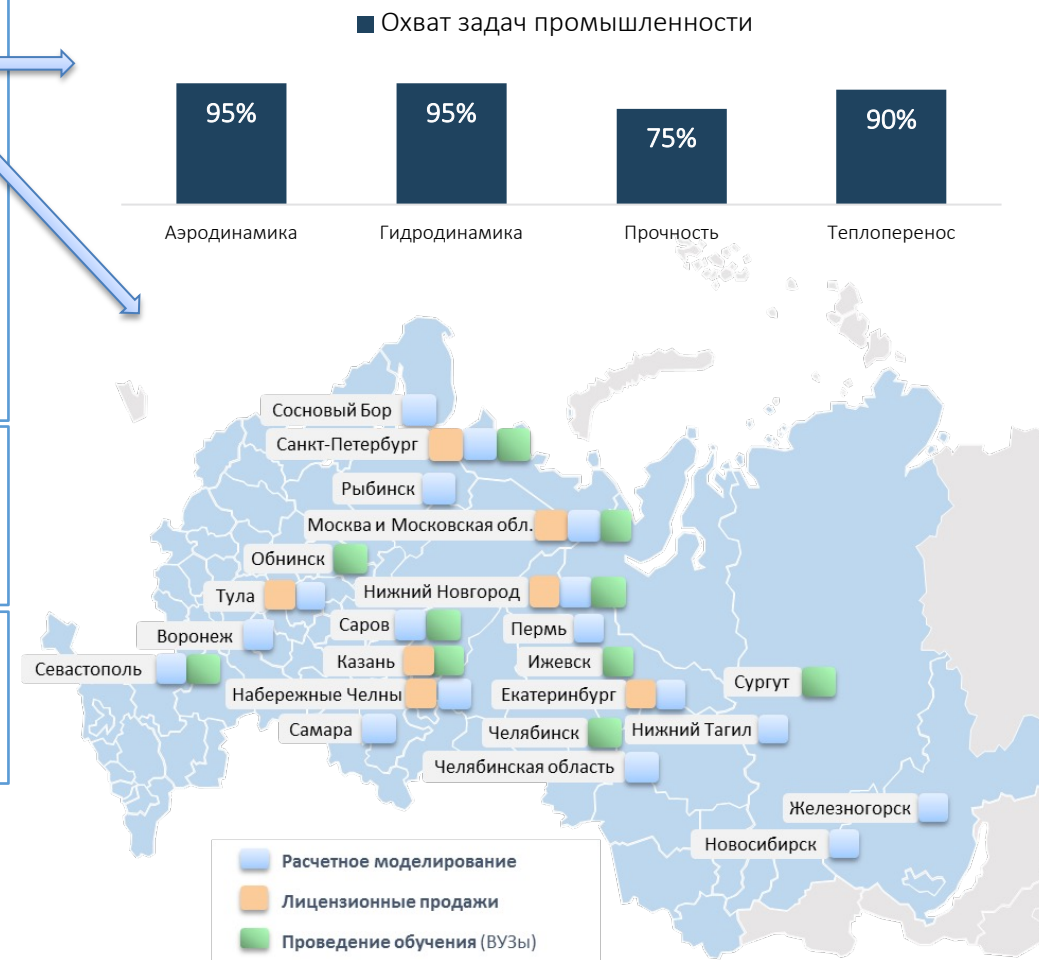
Авиастроение, ракетно-космическая отрасль, атомная энергетика, судостроение, автомобилестроение, обычные вооружения, нефтегазодобыча, экология и другие

Специализированные пакеты программ

(ЦИАМ им. П. И. Баранова, МГТУ им.Баумана, АО ГНЦ «Центр Келдыша», АО «ЦНИИмаш» и др.)

Актуальные задачи:

- Широкое внедрение в работы организаций ОПК
- Создание специализированных версий, глубокоадаптированных под конкретные режимы функционирования изделий
- Верификация и аттестация ПО для использования на этапах проектирования, создания и сдачи на вооружение изделий ВВСТ
- Техническая поддержка ПО, обучение



СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. РАЗРАБОТКА ИНТЕГРИРУЮЩЕЙ ПРОГРАММНОЙ ПЛАТФОРМЫ. **ЛОГОС ПЛАТФОРМА**

Базовый компонент интегрирования в единый отечественный пакет программ специализированных модулей разработки других организаций, а также специализированных версий пакета программ Логос

Ключевые задачи:

- ✓ *Достижение качественно нового уровня моделирования за счет учета специфики изделий, а также за счет проведения оптимизационных и параметрических исследований*
- ✓ *Достижение конкурентоспособности с лучшими мировыми аналогами*

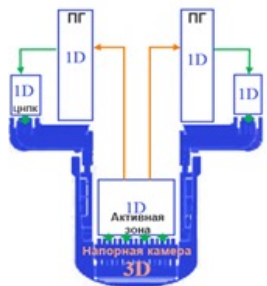


Интеграция программных продуктов сторонних организаций



Примеры использования (2021 год):

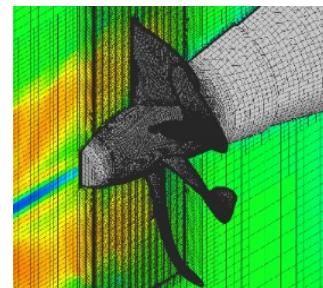
«Логос», «Борт-Т» (совместно с АО «ОКБМ Африкантов»)



Связанные расчеты 1D теплогидравлики и 3D гидродинамики

Оптимизированы алгоритмы управления ЯЭУ подводного плавательного объекта, обоснована возможность применения на очередных кораблях серии с повышенным энергозапасом

«Логос», «CATEC» (совместно с ИПФ РАН)



Отработка сквозной технологии моделирования виброакустики движителя с учетом влияния конструкции корпуса и вращения винта

Обосновано снижение шума при работе системы «Гребной винт-валопровод-корпус» изделий за счет модернизации облика

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ