

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Ю.Я. Болдырев, К.Ю. Замотин, Е.П. Петухов

Полномасштабная потребность и значимость инструментария математического моделирования, по-видимому, окончательно сформировалась во второй половине 19 века, когда очень быстрыми темпами начали появляться принципиально новые механизмы и машины, и стали появляться совершенно новые требования к самому существу проектирования и инженерной деятельности. При этом становилось все более очевидным, что многовековая практика физического эксперимента во многом исчерпала свои возможности, поскольку при решении все большего числа инженерных, да и многих естественнонаучных проблем не позволяла провести сам физический эксперимент либо из-за его сложности и (или) высокой стоимости, либо по причине принципиальной его невозможности. Последние обстоятельства привели инженерное и научное сообщество к необходимости использования все более и более глубоких методов математики в постановках инженерных задач или, говоря современным языком, методов математического моделирования. При этом любопытно отметить, что практически в то же самое время в самой математике произошли революционные изменения, существо которых заключалось в переходе от математики, построенной трудами И.Ньютона, Л.Эйлера и Ж.Лагранжа и других выдающихся ученых, к новым подходам, которые воплотились в трудах Р. Фреше (введение метрических пространств), Д. Гильберта (гильбертовы пространства) и многих других великих математиков.

Однако полномасштабный переход к широкой практике применения математического моделирования произошел во второй половине 20 века. Этому способствовали два обстоятельства. Во-первых, выдающиеся достижения в фундаментальной и вычислительной математике, такие как новые подходы к постановке начально-краевых задач на основе интегральных тождеств, введение классов пространств, получивших имя С.Л.Соболева и, восходящий к Р.Куранту, метод конечных элементов, ставший одним из фундаментов современной вычислительной математики. И, во-вторых, конечно, это возникновение и мощное развитие вычислительной техники.

Широчайшее внедрение подходов математического моделирования в инженерную практику и научные исследования способствовало переходу на качественно новый уровень как в инженерных расчетах и проектировании всего множества машин, так и систем в промышленности. Так же оно придало новое содержание исследовательскому процессу практически во всех отраслях научного знания. Это новое качество позволило в очень многих случаях коренным образом пересмотреть и перестроить сам процесс инженерного творчества, когда, исходя из уникальных возможностей математического моделирования и вычислительной техники, разработчики новой техники стали получать принципиально новые решения, характерным примером чего являются вычислительные технологии оптимизации конструкций и систем.

Причем особенно сильно эти новые качества стали проявлять себя в последние десятилетия в связи с широким применением суперкомпьютеров. Чего же нового привнесло применение суперкомпьютерных технологий в инженерную и научную деятельность?

Для ответа на этот вопрос мы должны обратиться к концепции технологии математического моделирования, восходящей к работам в первую очередь А.А.Самарского [1]. Концептуально важнейшими позициями-блоками являются следующие (здесь мы, преимущественно, следуем схеме изложенной в нашей работе [2]):

I блок. Составление математической модели явления, процесса, задачи и т.д. Это, вообще говоря, предметная область естественных и других наук, где составляются количественные соотношения для описываемых явлений и процессов. И это труднейшая область научной деятельности, составляющая основу естественных наук и фундаментальную базу инженерного знания. Выделяя самое основное, этот блок составляет существо некоторой «замены» реального физического процесса или явления его математической моделью, то есть описание всех его свойств-характеристик с помощью математических соотношений. Проблема полномасштабного применения методов математического моделирования является весьма многоплановой и имеет много трудных сторон. Стоит задуматься, например, над вопросом точного описания явления с помощью количественных (математических) соотношений. Как точно мы описываем то или иное явление? Для одного круга проблем достаточно выявления главных факторов описывающих процесс, для другого требуется гораздо более тонкое и глубокое описание процесса.

II блок. Анализ математической корректности построенной математической модели, описывающей нашу задачу. Весь спектр рассматриваемых здесь проблем носит сугубо математический характер и в подавляющем большинстве обходится исследователями и инженерами. Вообще, решение проблемы корректности той или иной задачи включает в себя решение следующих ключевых задач:

- существования решения (решений) в том или ином классе математических объектов (векторов, функций, целых или вещественных чисел и т.д.);
- единственность решения в этом классе;

- устойчивость решения по отношению к возмущению параметров задачи.

III блок. Переход от непрерывной математической модели к модели дискретной. Предварительно отметим, что в ряде задач этот блок может отсутствовать, то есть он, как правило, характерен для таких моделей - явлений, которые описываются дифференциальными и интегральными соотношениями. При переходе от непрерывной модели к дискретной мы, по сути дела, переформулируем нашу задачу и получаем некоторую новую, в которой присутствует один или несколько параметров, характеризующих новую дискретную задачу, и которых не было в исходной задаче. Простым примером этого являются задача вычисления интеграла - когда мы вычисляем его с помощью формул трапеций или Симпсона, в которых имеется параметр N , связанный с разбиением промежутка, который как раз и характеризует степень точности такого приближения.

IV блок. Анализ математической корректности вновь полученной дискретной задачи (на основе исходной). По сути дела, это и есть предмет вычислительной математики. Здесь рассматриваются те же проблемы, что и в блоке II, к которым добавляется еще одна задача, весьма важная. Решение этой задачи должно ответить на такой вопрос: будет ли построенная в блоке III дискретная задача, например, величина конечной суммы в упомянутом методе трапеций или Симпсона, при числе разбиений - параметре N стремящемся к бесконечности, стремиться к числу равному значению исходного интеграла?

V блок. Написание алгоритма для дискретной задачи, то есть последовательности вычислительных шагов и его перенос на компьютер - программирование. Этот блок носит совершенно особый характер и его роль со времени внедрения компьютеров в научную и инженерную практику непрерывно нарастала. Именно этому блоку, в значительной мере, и посвящена данная статья.

И, наконец, приведем еще один важный блок, также непосредственно связанный с рассматриваемыми здесь суперкомпьютерными технологиями.

VI блок. Отладка программы, то есть её тестирование, получение результатов и их анализ (в связи с появлением программных систем более правильным будет говорить о настройке такой системы на нашу задачу). Назначение этого блока вполне очевидно, и поэтому оставим его без комментариев.

Изложенная схема, конечно, является очень общей и её применение в полном объёме отдельным исследователем при решении какой либо задачи, в общем, не характерно и является, как правило, функцией научной группы или коллектива исследователей.

Итак, что же нового привнесли суперкомпьютерные технологии в изложенную нами концепцию? Прежде чем переходить к обсуждению этого вопроса уточним то, что мы понимаем под суперкомпьютерными технологиями [2,3]. Это следующая совокупность составляющих:

1. Производство СуперЭВМ.
2. Разработка системного и прикладного программного обеспечения для СуперЭВМ.
3. Совокупность знаний и технологий, необходимых для предметного использования СуперЭВМ (включая образовательную деятельность).

Последняя позиция, как видим, крайне широка, и как раз в её рамках и реализуется весь потенциал математического моделирования во всё возрастающем использовании суперкомпьютеров во всех сторонах человеческой практики. И именно здесь сосредоточена вся приведенная выше совокупность блоков, составляющих технологии математического моделирования. И, конечно, здесь же мы и находим ответы на вопрос, который содержится в наименовании нашей работы. Поэтому далее мы постараемся придерживаться приведенной выше последовательности блоков.

Итак, в той части, которая относится к I блоку, связанному с постановкой задач, безусловно, следует выделить то, что суперкомпьютерные технологии позволяют решать вычислительно ресурсоемкие задачи. Причем сама эта вычислительная мощность приобрела совершенно новое качество, позволяя исследователям и инженерам ставить задачи, которые на данном уровне человеческих знаний весьма близки к описанию процессов реального физического мира. Существо таких постановок связано с чрезвычайной многофакторностью процессов происходящих в природе. А это требует от нас постановок междисциплинарных задач, где мы обязаны выписывать совокупность связанных краевых или начально краевых задач математической физики, что, в свою очередь, порождает массу чисто математических проблем. Таким образом, исследователи вынуждены рассматривать в блоке II качественно гораздо более сложные задачи, но все-таки, это забота «чистых» математиков. Авторы имеют определенный опыт решения таких классов задач. К ним, в частности, относятся задачи горения, которые рассматривались в нашем проекте с компанией Microsoft [4] и задачи из области нанотехнологий, проект в области газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов [5-7], часть результатов работы по которому докладывалась нами на конференциях по суперкомпьютерным технологиям в 2011 г.

Кратко остановимся на постановке характерной междисциплинарной задачи - задачи газофазного синтеза наноразмерных структур, отмечая, что даже для класса междисциплинарных задач она представляется уникальной по множеству протекающих здесь процессов. Действительно, проблема самой постановки задачи существенным образом определяется выбором моделей физико-химических процессов в реагирующем течении газовой среды и её взаимодействии с элементами реакционного объема. В основе математических моделей процессов газофазного синтеза лежит вся гамма законов сохранения массы, импульса и энергии, образующих в совокупности систему уравнений Навье-Стокса для многокомпонентной реагирующей среды. В случае

многокомпонентной реагирующей смеси система уравнений Навье-Стокса дополняется уравнением для концентраций, а также уравнением энергии, с целью учета больших температур. Указанные уравнения являются достаточно универсальными для описания изменения скоростей, плотностей и давлений, происходящих в зоне физико-химических процессов. Но есть одно и очень существенное обстоятельство, которое не позволяет в большинстве практически важных случаев воспользоваться системой уравнений Навье-Стокса. Это проблема турбулентности, с которой сталкиваются при моделировании течения жидкости и газа, т.е. хаотического движения среды. Вообще, турбулентное движение можно считать самой распространенной формой движения сплошной среды, характеризующейся отсутствием некоторой «гладкости» и устойчивости линий тока и компонент скорости, присущей ламинарным течениям. Турбулентное течение характеризуется наличием колебаний около некоторого среднего значения всех величин, описывающих течение (компонент вектора скорости, плотности и давления и т.д.). Турбулентность начинающаяся проявляться при больших числах Рейнольдса

$$Re = V L / \nu$$

где V и L – характерные скорость и размер течения, а ν – кинематическая вязкость среды, крайне осложняет решение задач механики жидкости и газа, и её моделирование одна из серьезнейших проблем. Достаточно упомянуть только то, что в технических системах с наличием развитой турбулентности спектры временных и пространственных пульсаций физических величин становятся непрерывными и охватывают частотный и пространственный диапазон шириной до 4-5 порядков [8,9]! Это делает почти невозможным на данный момент прямое численное разрешение всего спектра турбулентных пульсаций.

Здесь уместно отметить, что исторически именно моделирование турбулентности, в силу своей исключительной важности для самых различных приложений, в значительной степени стимулировало развитие вычислительной техники, вообще, и высокопроизводительных вычислений, в частности [9]. И сегодня моделирование турбулентных течений является важнейшей проблемой современной гидрогазодинамики.

Итак, мы только остановились лишь на одной стороне нашей междисциплинарной задачи – течения газовой среды. Теперь перейдем к важнейшей составляющей рассматриваемых процессов – моделям химической кинетики. Все обилие технологий и множество процессов газофазного синтеза реализуется большим типом наноразмерных структур: пленок, нанопорошков и нанотрубок, синтезированных различными типами реакций, включая пиролиз, восстановление, окисление и дипропорционирование реагентов. Лежащие в их основе химические процессы чаще всего представляют собой комплексное сочетание пристеночных и объемных химических реакций и исходных физических процессов. К настоящему моменту основополагающие цепи реакций и их кинетика были исследованы только для некоторых подробно описанных и значимых для промышленности химически реагирующих систем [10-12]. Подробное описание всей их совокупности выходит за рамки нашей статьи.

Думается, что здесь достаточно остановиться, чтобы подвести некоторый итог. А он таков, что масштабность постановки задачи, в которой мы опустили множество важных деталей, демонстрирует нам очень высокую сложность в её постановке, которая, очевидно, требует не только мощных вычислительных ресурсов, но и предварительного серьезного анализа характера самих вычислений.

Приведенная постановка задачи показывает, что перед математиками «прикладниками» и множеством исследователей и инженеров встают проблемы численной реализации таких классов задач, то есть те проблемы, которым посвящен III блок вышеприведенной концепции. Спектр стоящих здесь проблем весьма широк и не исчерпывается проблемами аппроксимации дифференциальных уравнений задачи. При реализации на современных суперкомпьютерах, мы сталкиваемся с совершенно новым кругом проблем, которые были не характерны для подходов математического моделирования с использованием компьютеров в предыдущие десятилетия. Действительно, многопроцессорность современных суперкомпьютеров порождает важнейшую проблему распределения вычислительных запросов задачи между множеством процессоров, или говоря иначе распараллеливание задачи. Именно здесь и сосредоточены все тонкие аспекты связи математического моделирования и суперкомпьютерных технологий. Укажем на ключевые из них. Во-первых, это декомпозиция области решения задачи, в рамках которой происходит распределение всех отдельных частей по узлам или по процессорам (процессорным ядрам суперкомпьютера) при её решении. Чтобы пояснить важность и сложность этой проблемы, а также её масштабы укажем на работу научной группы Политехнического университета под руководством профессора М.Х.Стрельца [13], которая была выполнена в 2009 -2010 гг и, безусловно, является уникальной и сегодня. В этой задаче об обтекании тандема цилиндров расчет выполнялся на сетке, содержащей примерно 60 миллионов узлов на 8160 узлах суперкомпьютера Blue Gene/P «Intrepid», при общем числе задействованных в расчетах ядер 65280. Во-вторых, это проблема построения сеток при таком разбиении. Третьей нужно назвать сугубо алгебраическую задачу решения на множестве процессоров полученной алгебраической системы, которая в общем случае является нелинейной. При этом нельзя упускать из виду и задачу «стыковки-согласования» решений на внутренних границах подобластей, которая необходима при проведенной декомпозиции области решения задачи.

Следующим блоком является блок IV, существо которого вполне очевидно и не требует отдельного рассмотрения в рамках обсуждаемых проблем. Но блоки V и VI носят уже принципиально важный характер. В рамках V блока как раз и реализуются все алгоритмические и вычислительные особенности присущие решению

и прохождению задачи на суперкомпьютере, в частности и те, что затронуты выше. Сегодня научное и инженерное сообщество, использующее в своей деятельности суперкомпьютеры, имеет несколько путей решения возникающих здесь проблем. Первый, традиционный и наиболее трудный, – это путь полномасштабного написания программ решения задач с использованием богатой гаммы компиляторов, отладчиков и разного рода сред разработки. Этот путь требует освоения всех тонких вопросов параллельного программирования, и в первую очередь знания и умения работы с библиотеками параллельного программирования. Второй путь – это путь использования прикладного программного обеспечения, которое в большой массе имеется на современном рынке и в свободном доступе. Этот путь предполагает использование коммерческих или «открытых» программных комплексов, которые в своих многопроцессорных версиях имеются практически для всех отраслях естественнонаучного и инженерного знания.

Подход, использования таких комплексов, сегодня, оказывается весьма эффективным, особенно тогда, когда требуется быстро получить результаты. При этом важнейшим обстоятельством, которое имеет здесь место, является то, что в наиболее мощных программных комплексах «защиты» ключевые шаги приведенной выше концепции математического моделирования. Более того, в них реализованы и важнейшие составляющие реализации алгоритма решения задачи на многопроцессорной вычислительной системе, такие как декомпозиция области, построение сеток и использование эффективных алгебраических процедур решения получающихся систем уравнений. Крайне важным обстоятельством является и то, что в таких комплексах имеется богатейший инструментальный для визуализации результатов вычислений, позволяющий не только демонстрировать результаты в «статике», т.е. графики, но и их «динамику», дающий возможность просматривать их в развитии в форме фильмов, что делает результаты вычислений особенно эффективными.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. — 2-е изд., испр. - М.: Физматлит, 2001. — 320 с. — ISBN 5-9221-0120-X.
2. Болдырев Ю.Я., Петухов Е. П. Суперкомпьютерные технологии и их приложения. Учебное пособие. СПбГПУ, 2011, С.92.
3. Болдырев Ю.Я. Суперкомпьютерные технологии как современное воплощение междисциплинарного подхода в научно-образовательной деятельности. СПб. Научно-технические ведомости СПбГПУ. № 4, 2010. С. 99-106 (вып. «Информатика. Телекоммуникации. Управление»).
4. Болдырев Ю.Я., Снегирев А.Ю., Петухов Е. П., Замотин К.Ю. и др. «Технологии высокопроизводительных вычислений Microsoft для обеспечения безопасности и охраны окружающей среды». Исследовательский проект СПбГПУ- Microsoft, 2007-2009 гг.
5. Александров С.Е., Болдырев Ю.Я., Петухов Е. П., Замотин К.Ю. и др. «Создание функционирующего в режиме удаленного доступа интерактивного учебно-научного комплекса для выполнения работ по моделированию процессов газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов в проблемно-ориентированной среде высокопроизводительных вычислений». СПбГПУ. Госконтракт № 16.647.12.2020 от 25 ноября 2010 г. Отчетные материалы этапы 1-3, 2010-2011 гг.
6. Александров С.Е., Болдырев Ю.Я., Петухов Е. П., Замотин К.Ю. и др. Высокопроизводительные вычисления и нанотехнологии на примере задач газофазного синтеза. Труды Международной научной конференции «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопное будущее». М.: Изд-во МГУ, 2011 г. С. 41.
7. Болдырев Ю.Я., Петухов Е. П., Замотин К.Ю. Высокопроизводительные вычисления в задачах газофазного синтеза получения наноматериалов. Книга. Суперкомпьютерные технологии в науке и образовании и промышленности (ред. В.А.Садовничий, Г.И.Савин, В.В.Воеводин). Изд-во МГУ, Москва, 2011 с. 89-95.
8. Снегирёв А.Ю. Высокопроизводительные вычисления в технической физике. Численное моделирование турбулентных течений. Санкт-Петербург, Изд-во Политехн. ун-та, 2009, 143 с. (ISBN 978-5-7422-2317-7).
9. Spalart, P.R., Jou, W.-H., Strelets, M., and Allmaras, S. R., «Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach», 1st AFOSR Int. Conf. on DNS/LES, Aug. 4-8, 1997, Ruston, LA. In: «Advances in DNS/LES», C. Liu and Z. Liu (Eds.), Greyden Press, Columbus, OH.
10. Александров С.Е. Технология материалов электронной техники. Процессы химического осаждения из газовой фазы: Учеб. пособие. / СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2005, 92 с.
11. Hitchman, M.L. and Jensen, K.F. Chemical Vapor deposition: Principles and applications. Academic Press, London, 1993.
12. Chemical Vapour Deposition. Precursors, Processes and Application / Eds. A.C. Jones, M.L. Hitchman, London: RSC Publishing, 2009, 582 с.
13. Garbaruk, A., Shur, M., Strelets, M., Spalart, P.R., Balakrishnan, R. «DDES and IDDES of Tandem Cylinders». In CD-Room Proceedings of BANC-I Workshop, Stockholm, 2010.