

Зачем и какие суперкомпьютеры эксафлопсного класса нужны в естественных науках

Г. Э. Норман, Н. Д. Орехов, В. В. Писарев, И.М. Саитов, Г. С. Смирнов,
С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин

6 октября 2014 г.

Аннотация

Рассматривается подход, позволяющий выявить, для каких задач нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса. Возможности подхода рассмотрены на примерах актуальных задач механики, физики, химии и биологии, для решения которых необходимо атомистическое моделирование на современных и создаваемых в настоящее время суперкомпьютерах. Показано преимущество тороидальной топологии.

1 Введение

Развитие суперкомпьютерных технологий в США и других передовых странах встало на путь радикального наращивания числа вычислительных элементов. Серия систем IBM BlueGene/L [1] была с самого начала задумана для развития технологии массового параллелизма. В 2006 году, когда системы IBM BlueGene прошли начальную апробацию и появились суперкомпьютеры Cray XT3/4, для развития алгоритмов параллельного решения математических задач на этих новых системах Департамент энергетики США (DOE) расширил уже существовавшую ранее программу Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment (INCITE) [2]. Так в 2012 году на 60 проектов (таб. 1) было выделено 1672 миллиона процессор-часов на суперкомпьютерах IBM BlueGene/P и Cray XT5. Показательным является тот факт, что в программе INCITE участвуют системы только с

Таблица 1: Число проектов, получивших компьютерное время на системах IBM BlueGene L/P/Q и Cray XT3/4/5/XK7 по программе INCITE в 2006–2014 гг.

Год	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014
Число проектов	15	45	58	66	70	57	60	61	59

тороидальной топологией.

Как показано на рис. 1, тематика проектов INCITE охватывает практически все области науки и техники. Важно подчеркнуть, в каких областях суперкомпьютеры наиболее востребованы. На рисунке показано (а) число проектов по каждой тематике и (б) выделенное на каждую тематику вычислительное время в миллионах процессор-часов. Исходя из доступного краткого описания, все проекты с некоторой долей условности разделены на следующие тематики: атомистические модели (Ab initio — расчеты из первых принципов и MD — молекулярная динамика), модели в рамках механики сплошных сред (CFD), астрофизические модели (Astrophys), физика плазмы (Plasma), квантовая хромодинамика (QCD), физика ядра (Nuclear), computer science (CS). Атомистические модели (Ab initio и MD) охватывают очень широкие приложения от механики ударно-волнового разрушения

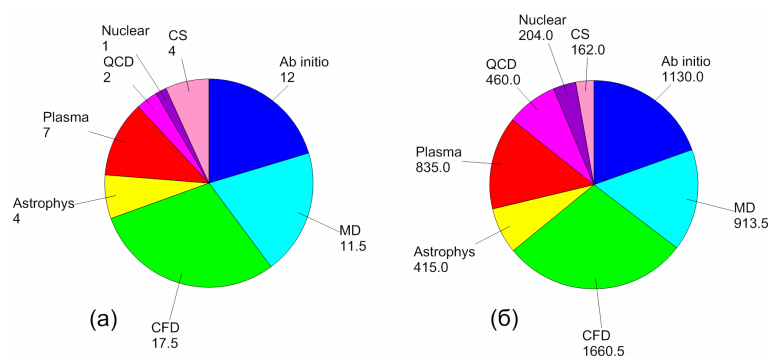


Рис. 1: Деление проектов INCITE 2014 г. по тематикам

до химических реакций и систем биомолекул. В программу INCITE принимаются проекты с международным участием, даже без партнера из США. Обязательным условием получения расчетного времени по программе INCITE является использование массового параллелизма. При этом задачи, связанные с одновременным запуском большого числа однотипных задач (тривиальный параллелизм для набора статистики), рассматриваются, однако не являются приоритетными [2]. От алгоритма решения прикладной задачи требуется демонстрировать параллельную эффективность на вычислительном поле порядка 20% используемой машины. В 2011 году это соответствовало размеру вычислительного поля порядка 20 тысяч ядер, а в 2013–14 гг. — 200 тысяч ядер! Как для задач крупномасштабного суперкомпьютерного физико-математического моделирования, так и для задач обработки больших объемов данных второй важнейшей технической задачей на пути в «эру эксафлопса» является организация параллельного ввода-вывода с сотен тысяч и миллионов ядер.

Эти цифры демонстрируют переход к новой эре использования вычислительных методов в науке и технике. Вместе с тем ученые не всегда представляют себе, как надо выбирать суперкомпьютер для задачи, которой они занимаются. Тем более неясным остаётся вопрос об архитектуре требуемого компьютера. Этим вопросам посвящена настоящая работа. Рассматривается подход, позволяющий выявить, для каких задач нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса. Имеются в виду задачи, для решения которых требуется загрузка всего или значительной части суперкомпьютера, т.е. сотен тысяч или даже миллионов вычислительных ядер одновременно под одну задачу.

В разделах 2-10 анализ ведётся на примерах из области многомасштабного атомистического моделирования — прорывного направления современной науки, как следует из рис. 1. Уравнения движения Ньютона и Шрёдингера, составляющие основу атомистического моделирования на микро- и наноуровнях, достаточно универсальны. Развивая различные подходы к их численному решению и их включению в многомасштабное моделирование, учёные создают аппарат, с помощью которого можно, опираясь на прогресс лучших суперкомпьютеров, решать новые задачи предсказательного моделирования многомасштабных процессов в физике, химии, биологии и других естественных науках.

Основное внимание уделено многомасштабным моделям и предсказательному моделированию свойств и процессов. Рассмотрены проблемы: (а) квантово-механического описания на наноуровне и применения классической молекулярной динамики (МД) на микроуровне, (б) установления взаимосвязи моделирования на нано- и микроуровнях и их связи с кинетическим описанием и механикой сплошных сред на макроуровне, в особенности, в сильно неравновесных средах.

Наряду с общей методологией (разделы 2 и 4), рассмотрены её применения к таким вопросам, как модификация поверхности при облучении металла субпикосекундными лазер-

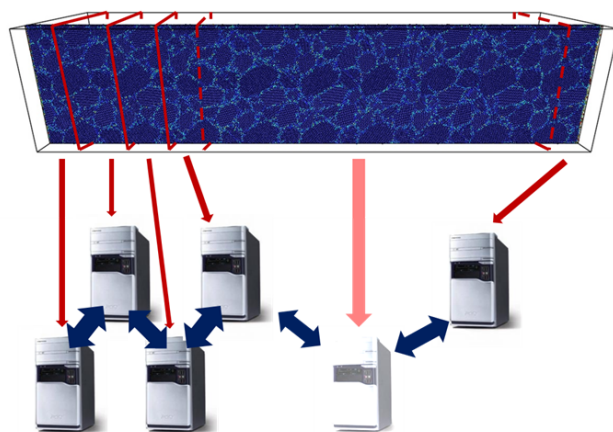


Рис. 2: Схема, поясняющая параллелизацию на основе декомпозиции по пространству в методе МД (краткодействующие потенциалы)

ными импульсами(раздел 3), радиационно-индуцированные структурные изменения в облучённом топливе ядерных реакторов нового поколения на быстрых нейтронах(5), кинетика фазовых переходов в метастабильных жидкостях: кристаллизация при переохлаждении и вскипание при перегреве для расплавов металлов и воды (6), деформация материалов(7), свойства и структура супрамолекулярных соединений включения — газовых гидратов (8), многомасштабные модели для полимеров и нанокompозитных материалов на их основе, обладающие высокой параллельной эффективностью (9), биомолекулы (10). Рассмотренный подход обобщается на задачи механики сплошной среды в разделах 11 и 12.2.

В разделе 12 сравниваются эффективности распараллеливания для топологий тора и толстого дерева для трёх классов задач. Наряду с классической МД и квантовым моделированием, рассмотрены численные решения на сетках в задачах механики сплошной среды. В заключении даются ответы на вопросы, зачем и какие нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса в научных исследованиях. Их развитие предварительно анализировалось в [3], где также затронуты требования к архитектуре суперкомпьютеров с точки зрения масштабируемости задач молекулярного моделирования.

2 Параллелизм в классических молекулярно-динамических (МД) расчётах

2.1 Локальность обменов данными

МД расчёты проводятся для миллионов и миллиардов частиц [4]. Для распараллеливания расчётный объем разделяется на подобласти (domain decomposition), каждая из которых «поручается» одному ядру, пример одномерного деления приведён на рис. 2. Ограничение масштабируемости алгоритмов молекулярной динамики определяется межпроцессорным обменом данными, что схематично проиллюстрировано для декомпозиции по пространству в одномерном случае на рис. 2 и двумерном—на рис. 3. В зависимости от геометрии системы задача разделяется на отдельные пространственные области, объёмы которых считаются на разных процессорах. На границе областей процессоры обмениваются данными для расчёта сил. Пространственная локальность взаимодействия обеспечивает

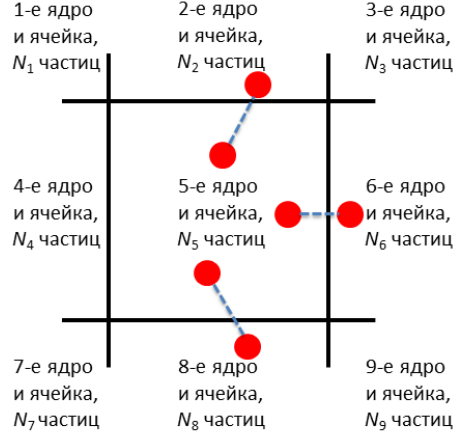


Рис. 3: Схематичное представление локальности обменов данными для двумерной системы при атомистическом моделировании. Система разбита на M ячеек (не путать с периодическими граничными условиями), полное число частиц в системе $N = N_1 + N_2 + N_3 + \dots + N_M$.

высокую параллельную эффективность данного подхода.

2.2 Масштабируемость

При фиксированном числе частиц увеличение числа подобластей, т.е. увеличение числа используемых вычислительных ядер и уменьшения числа частиц на каждое ядро вначале даёт линейное ускорение расчётов, а потом проходит через максимум (рис. 4, слева), когда межъядерный обмен становится затратным по времени. Таким образом, для каждого числа вычислительных ядер существует число частиц, оптимальное для расчётов. При увеличении числа ядер можно проводить расчёты для большего числа частиц (рис. 4, справа) и, соответственно, расширяется круг явлений и процессов, доступных для исследования. Такой подход предложен в [5], где он проиллюстрирован на примере пластической деформации и разрушения при высокоскоростном деформировании. Набор других примеров приведён в данной работе. Отметим, что для систем с короткодействующими потенциалами типа ЕАМ время расчёта пропорционально N , поэтому соответствующее увеличение M приводит к тому, что время расчёта остаётся неизменным с ростом N .

3 Лазерное наноструктурирование поверхности материала

Рассмотрим эту стратегию на примере моделирования лазерного наноструктурирования поверхности материала. Такой процесс имеет множество потенциальных технологических применений в микрообработке и создании поверхностных наноструктур. В то же время механизм наноструктурирования лазерным импульсом остаётся не вполне ясным.

В последнее время стало появляться значительное число экспериментальных работ, акцентирующих внимание на объёмном характере процесса модификации поверхности при лазерном облучении [7, 8, 9, 10, 11]. Однако расчёты, проводимые разными авторами, остаются или полностью одномерными (гидродинамическое моделирование) или квазиодномерными (атомистическое моделирование), когда только направление вглубь материала имеет микронный размер, а два других направления имеют размеры в несколько нанометров и сшиваются через периодические граничные условия [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]. Поэтому целесообразным является переход к полномасштабному объёмному атомистиче-

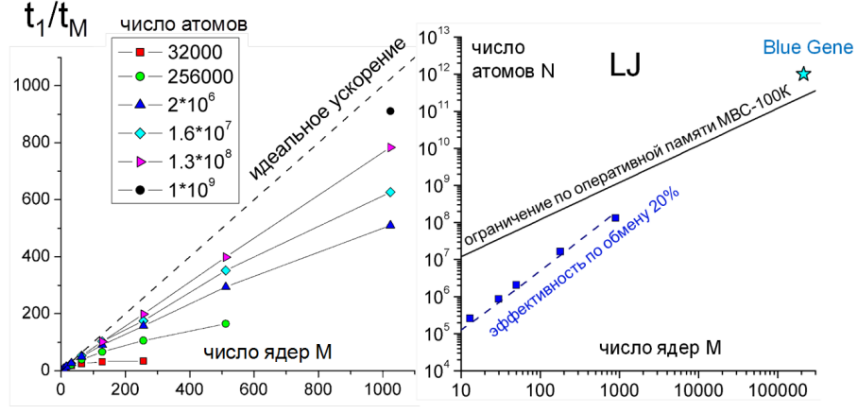


Рис. 4: Слева—зависимость ускорения от числа ядер для различных размеров систем с потенциалом Леннард-Джонса (указано число частиц в системе). Справа—оптимальное соотношение числа атомов и ядер. Точками показаны расчёты с эффективностью 80%. Сплошная кривая—ограничение по оперативной памяти. Для сравнения приведён расчёт на суперкомпьютере IBM BlueGene/L [5].

скому моделированию процесса модификации, что является логическим развитием модели, но требует достаточно больших вычислительных ресурсов. Стоит отметить, что менее затратное гидродинамическое (ГД) моделирование также может быть развито до объёмного моделирования, но для этого необходимо будет решить ряд принципиальных задач и, в частности, научиться корректно моделировать гидродинамику поверхностных волн. Однако даже при создании трёхмерной ГД-модели, точность её будет значительно уступать атомистическому моделированию, так как при лазерном наноструктурировании большую роль играют такие процессы как плавление, разрушение и нуклеация, т.е. процессы, учёт которых в ГД-подходе вызывает особую трудность. С другой стороны, в атомистическом моделировании все эти процессы описываются без привлечения каких-либо дополнительных приближений.

В подавляющем большинстве работ, посвященных модификации поверхности лазерным импульсом, основной характеристикой импульса является поглощенный флюенс энергии, усреднённый по освещенной поверхности. Однако в некоторых работах [21, 22] указывается на тот факт, что более удобными величинами для анализа являются полная поглощенная энергия импульса E_{abs} и поглощенный флюенс в центре лазерного пятна F_0 . Кроме того, сравнение теории и эксперимента следует проводить с учетом распределения энергии по всей освещенной поверхности. Если принять, что распределение флюенса $F(r)$ имеет гауссову форму, то связь между E_{abs} и F_0 можно записать следующим образом:

$$E_{abs} = \int_0^{+\infty} F(r) \cdot 2\pi r dr = \int_0^{+\infty} F_0 \exp[-r^2/R^2] \cdot 2\pi r dr = F_0 \pi R^2, \quad (1)$$

где R — параметр распределения Гаусса. Стоит отметить, что в формуле 1 величина R не соответствует радиусу модификации поверхности или какой-либо величине связанной с процессами на поверхности, а является характеристикой только лазерного импульса.

Остановимся более детально на модели, используемой в атомистическом моделировании для описания лазерного наноструктурирования. При взаимодействии короткого лазерного импульса с веществом происходит сильный нагрев, в первую очередь, электронной подсистемы. Характерное время установления равновесия между электронами и ионами соиз-

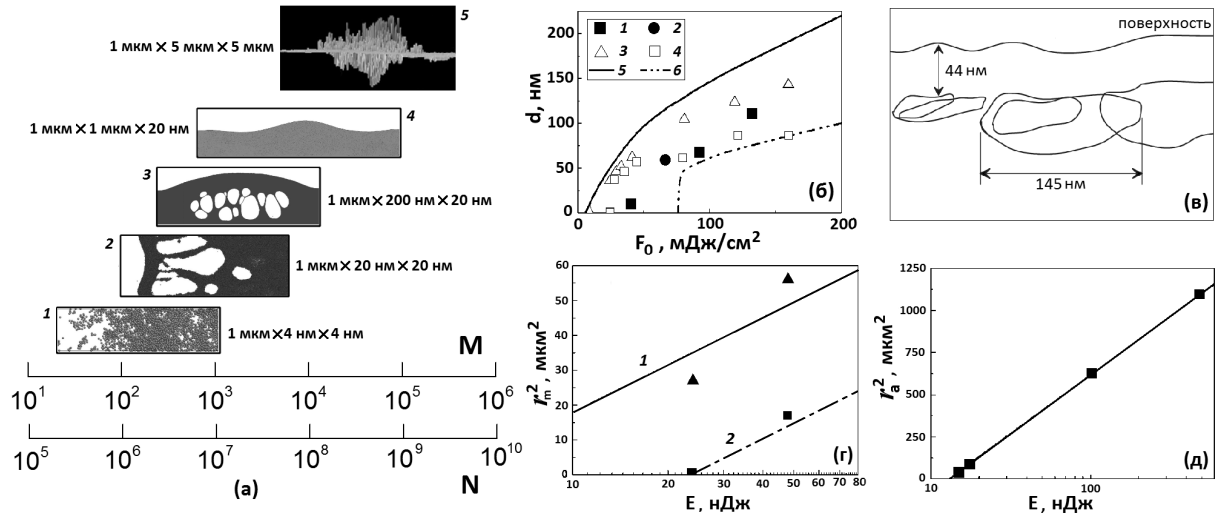


Рис. 5: (а) Сопоставление числа вычислительных ячеек M и требуемого количества атомов N с различными приближениями атомистического моделирования лазерной модификации поверхности: 1—квазиодномерный расчёт; 2—квазиодномерный расчёт с учётом особенностей нуклеации; 3—квазидвумерный расчёт лазерной абляции; 4—квазидвумерный расчёт процесса модификации вследствие плавления; 5—прямое моделирование процесса в условиях эксперимента (профиль взят из работы [17]). (б) Зависимость глубины расплава/абляции от флюенса F_0 для алюминия: 1—глубина модификации из экспериментальной части работы [22]; 2—глубина абляции из ГД-расчета [13]; 3 и 4—глубина расплава и абляции из ГД-расчета [12]; 5 и 6—глубина расплава и абляции из МД-моделирования [22]. (в) Сформировавшиеся нанополости из работы [10]. (г) Зависимость квадрата радиуса зоны модификации от энергии импульса из работ [17, 22]: линии—расчет по формуле 2; символы—экспериментальные данные [17, 22]; 1 и 2—результаты для алюминия и золота, соответственно. (д) Зависимость квадрата радиуса зоны набухания/абляции от энергии импульса для алюминия из работы [7]: линия—расчет по формуле 3; символы—экспериментальные данные [7].

меримо со временем самой модификации вещества и временами кинетических процессов происходящих при этом (телоперенос, фазовые переходы, возникновение ударных волн и т.д.) Таким образом начальная стадия является двухтемпературной, когда температура электронов на порядок превышает температуру ионов. Для моделирования процесса лазерной модификации поверхности в цикле работ [14, 16, 17, 20] авторами развивается атомистическая модель двухтемпературного состояния. В данной модели используется приближение сплошной среды для электронной подсистемы и молекулярно-динамическое моделирование для ионной подсистемы. Таким образом, совместно решается система уравнений Ньютона для ионов и кинетическое уравнение теплопроводности для электронной подсистемы. Одной из особенностей развиваемой модели является учёт влияния электронного давления на динамику ионов.

На рис. 5а различные приближения атомистического моделирования процесса модификации поверхности схематично сопоставлены с числом вычислительных ячеек (фактически с числом вычислительных ядер), требуемых для их реализации. Приближением, требуемым меньше всего вычислительных ресурсов, является квазиодномерный расчёт, когда вычислительная ячейка имеет размер около микрометра только в одном направлении (вглубь вещества), а два других направления имеют размеры в несколько нанометров и сшивают

ся через периодические граничные условия. Именно на таком типе задач отрабатывается и тестируется теоретическая основа модели. Стоит отметить, что необходимость микронного размера в направлении вглубь вещества обусловлена ударно-волновой природой лазерной абляции вещества и тем, что фазовые и структурные превращения происходят в поверхностном слое толщиной в несколько сотен нанометров.

Вторым по вычислительным затратам приближением является также квазиодномерный расчёт, но уже с размерами в несколько десятком нанометров по двум другим направлениям. Основным преимуществом такого вида расчёта перед первым, является возможность более корректно описывать процесс нуклеации полостей при лазерной абляции. В таком приближении можно исследовать более детально механизм разрушения вещества. На рисунке 5б показаны зависимости глубины расплава/абляции от флюенса F_0 для алюминия при облучении фемтосекундным импульсом, полученные в разных работах. Все рассчитанные зависимости вычислены в одномерном приближении (ГД-модель) или квазиодномерном приближении (МД-моделирование).

Третьим приближением является квазидвумерный расчёт, когда одно из направлений вдоль облучаемой поверхности имеет размер в несколько сотен нанометров. Такое приближение позволяет учитывать профиль энерговклада лазерного импульса. Стоит отметить, что в первых двух приближениях подразумевалось, что облучение происходит по всей поверхности с одинаковой интенсивностью, что конечно не соответствует действительности. Квазидвумерное приближение позволяет ввести распределение флюенса по поверхности $F(r)$, но в двухмерной геометрии. И хотя реальный диаметр лазерного пятна в эксперименте составляет несколько микрометров, однако уже такое приближение является существенным достижением по сравнению с первыми двумя. Для непосредственного сравнения с экспериментом нужно использовать размерный анализ и теорию подобия, чтобы экстраполировать результаты моделирования до реального размера распределения интенсивности по поверхности.

Четвёртое приближение является также квазидвумерным, но уже с микронным размером в двух направлениях. Такая модель позволяет рассмотреть лазерное наноструктурирование за счёт плавления вещества. По результатам проведённых расчётов было установлено, что при небольших энерговкладах модификация поверхности может происходить не только за счёт лазерной абляции, но и за счёт плавления и расплескивания металла (прямая аналогия с капиллярными волнами на поверхности). Данный процесс хорошо демонстрирует, что при переходе к моделированию на больших масштабах существует возможность обнаружить новые коллективные явления атомов, недоступные для моделирования на меньших масштабах. Выполненные расчёты хорошо согласуются с недавними экспериментами (см. например [9, 17]), где обнаружена модификация поверхности при низких энерговкладах в отсутствие абляции. Нужно отметить, что процесс модификации поверхности при использовании рентгеновских импульсов [9, 17] может существенно отличаться от случая, когда используются оптические импульсы [7, 10, 11]. Это обусловлено тем, что при модификации поверхности вследствие плавления большую роль играют локальные градиенты температуры/давления вдоль поверхности, которые для рентгеновских импульсов значительно выше, чем для оптических.

Рисунок 5в иллюстрирует другое интересное явление, которое возможно смоделировать в квазидвухмерном приближении, — формирование нанополостей при распухании вещества, как первая стадия абляции. Рисунок взят из работы [10] и соответствует экспериментальным наблюдениям. Механизм этого явления пока исследован не полностью и описывается в основном на основе анализа экспериментальных фактов [7, 10].

Моделирование в третьем и четвертом приближениях подтвердило высказанную ранее гипотезу, что размер зоны наноструктурирования (т.е. области поверхностной моди-

фикации с глубиной от нескольких нанометров) определяется плавлением. Таким образом можно сформулировать критерий, позволяющий рассчитать диаметр зоны модификации во всем диапазоне энерговкладов. Граница зоны модификации поверхности, облучаемой лазерным импульсом, определяется той точкой пространства, где локальный поглощенный флюенс соответствует пороговому флюенсу плавления. Кроме того, аналогичным образом можно получить оценку размера области абляции (или распухания, как первого этапа абляции [7, 9, 10]), которая соответствует точке на поверхности, где поглощенный флюенс равен пороговому флюенсу для абляции. Данные критерии для радиуса наноструктурирования r_m и радиуса абляции/распухания r_a можно записать в следующем виде:

$$r_m^2 = R^2 \ln(F_0/F_{melt}) = R^2 \ln(\alpha E/\pi R^2 F_{melt}), \quad (2)$$

$$r_a^2 = R^2 \ln(F_0/F_{abl}) = R^2 \ln(\alpha E/\pi R^2 F_{abl}), \quad (3)$$

где α — коэффициент поглощения, E — полная энергия импульса ($E_{abs} = \alpha E$). На рисунках 5г и 5д показаны зависимости $r_m(E)$ и $r_a(E)$ для алюминия, рассчитанные из формул 2 и 3 с учетом характеристик импульсов в работах [7, 17, 22]. Стоит отметить, что входящие в формулы пороговые флюенсы плавления и абляции F_{melt} и F_{abl} можно рассчитать в квазиодномерном расчете, однако справедливость самих формул можно проверить только в двух- или трехмерных расчетах.

Пятое приближение подразумевает проведение полностью трёхмерного расчёта, на масштабах сопоставимых с экспериментом. Формулы 2 и 3 дают возможность оценить требуемые размеры моделируемых систем для корректного описания процесса модификации поверхности. Несмотря на то, что все остальные приближения могут дать много полезной информации о процессе лазерного наноструктурирования, полностью описать динамику этого процесса возможно только в полномасштабном расчёте с микронными размерами во всех направлениях. Данный тип расчёта пока не был проведён, однако прогресс в вычислительных ресурсах, который наблюдается в последние годы, позволяет говорить о принципиальной возможности такого моделирования [22, 23, 24]. Проведение такого расчёта позволит напрямую сравнить эксперимент и атомистическое моделирование, опирающееся только на теорию из первых принципов. Такое сравнение важно и само по себе, и как возможность доказать или опровергнуть все предположения и гипотезы, который были выдвинуты при моделировании на меньших масштабах. Кроме того, только в этом приближении возможно описать образование различных наноструктур, формирующихся при взаимодействии лазерного импульса с поверхностью [8, 11].

4 Стратегия развития МД modeling&simulation

4.1 Основания МД modeling & simulation

Задачи, представленные на рис. 5, требуют привлечения нескольких составляющих для своего решения, помимо обязательного сравнения с экспериментом.

Стандартный для англоязычной литературы термин «modeling & simulation» обычно переводится на русский как «моделирование», что искажает смысл термина.

Simulation означает проведение вычислений. Выявление, анализ и решение проблем, возникающих при увеличении числа ядер M , включая оптимальный выбор суперкомпьютера, относятся к области Computer Science. Будем затрагивать эти проблемы ниже.

Но прежде чем начать расчёты, надо провести modeling, т.е. сформулировать постановку задачи и создать модель вещества, которая будет затем изучаться численно. К модели относятся уравнения, которые её описывают, потенциалы межчастичного взаимодействия,

выбор числа частиц N , начальные и граничные условия и т.п. Это вопросы теоретической физики, как и построение многомасштабных моделей, позволивших бы выйти за пределы временных и пространственных масштабов, доступных атомистическому моделированию. Многие из этих вопросов специфичны и рассматриваются для каждого из примеров.

Способы оценки значения N достаточно универсальны. Выбор его определяется масштабами пространственных и временных корреляций, характерных для поставленной задачи. В системе существует иерархия корреляций $r_{c1} < r_{c2} < r_{c3} < \dots$, которой соответствует иерархия $N_1 < N_2 < N_3 < \dots$, где $N_i = nr_{ci}^3$. Здесь n — концентрация частиц, r_c — область расстояний, которая исследуется. Иными словами, можно сказать, что, выбирая то или иное значение N , мы тем самым обрываем ряд корреляций, которые можно будет исследовать в данном МД-расчёте. Выбирая $N = nL^3$, мы также ограничиваем длины волн $\lambda < L$ равновесных флуктуаций, т.е. фиксируем диапазон волновых векторов, для которого можно будет рассчитать дисперсию колебаний плотности: фононов в конденсированных средах, плазменных волн в неидеальной плазме, колебаний биомолекул и т.п. Подобным же образом выбор N ограничивает область исследуемых характеристик таких кооперативных явлений, как нуклеация, образование дислокаций и трещин и др.

Существует также иерархия времён корреляций $\tau_{c1} < \tau_{c2} < \tau_{c3} < \dots$. Выбор L обрывает этот ряд, в частности, двумя неравенствами: $6D\tau_{ci} < L^2$, где D — коэффициент диффузии, $a_s\tau_{ci} < L$, где a_s — скорость звука.

Свои варианты требований возникают при моделировании поверхностей, фазовых равновесий и т.п. Так, выбор N на рис. 5 означает предельные горизонтальные и вертикальные размеры полостей, которые можно исследовать. При переходе к исследованию релаксационных процессов следует учитывать возможность появления дополнительных пространственных и временных характерных масштабов и соответствующих требований на выбор N .

Общий вывод заключается в том, что выбор размера системы (числа частиц) ограничивает предельные значения r_c , τ_c , λ , характерных неоднородностей и т.п., и, таким образом, ограничивается круг явлений и процессов, которые можно исследовать. И, наоборот, требования на выбор числа частиц определяются рассматриваемым физическим явлением и структурой.

Физически обоснованный выбор числа частиц в сочетании с тестированием эффективности распараллеливания (см. выше) позволяет установить оптимальное соотношение «число частиц — число вычислительных ядер» и выполнить исследование выбранного свойства, явления и процесса именно в рамках этого соотношения. Естественно, систему можно исследовать и при меньшем числе ядер. Соответственно увеличится время расчёта.

4.2 Многомасштабные подходы

Переход к кинетическим подходам, механике сплошных сред и др. позволяет выйти за пределы временных и пространственных масштабов, доступных атомистическому моделированию. При этом возникают теоретико-физические проблемы связи между моделями на разных масштабах. Последовательность взаимосвязанных подходов выстраивается от квантовых наномасштабов до макромасштабов для решения конкретных задач (рис. 6). Возможно, первый пример такого подхода, включивший кинетику и классическую МД дан в [6].



Рис. 6: Ступени многомасштабного подхода и их взаимосвязи.

5 Радиационные повреждения в ядерных топливах

В настоящее время наблюдается рост интереса к обоснованию эффективности и безопасности атомной энергетики. В частности, это привело к тому, что перед радиационным материаловедением была поставлена задача о создании методики точного прогнозирования поведения ядерного топлива в условиях эксплуатации. Данная задача допускает несколько подходов к её решению, но наиболее перспективным представляется многомасштабный подход, когда методами моделирования и теоретической физики совместно решаются подзадачи на различных временных и пространственных масштабах [25, 26]. Кооперация таких методов (квантовые расчеты, атомистическое моделирование, метод Монте-Карло, метод кинетических уравнений и приближение сплошной среды) может позволить предсказывать/объяснить поведение ядерных материалов практически без привлечения экспериментальных данных, которые в этом случае могут быть использованы для верификации всей модели. На данный момент такая многомасштабная модель только разрабатывается, однако её развитие уже привело к существенным достижениям в методах расчета радиационных повреждений на различных масштабах.

Стоит отметить, что рисунок 7 иллюстрирует два подхода к увеличению масштаба при моделировании задач радиационного материаловедения. На рисунке 7а показано, какие задачи возможно решить в рамках одного только атомистического моделирования. Рисунки 7б-д демонстрируют многомасштабный подход, как совокупность различных моделей, где выходные параметры на одном уровне являются входными параметрами для моделей более высокого уровня. В радиационном материаловедении оба подхода к увеличению масштаба активно развиваются и дополняют/корректируют друг друга.

При отсутствии необходимых экспериментальных данных изучение механизмов и вычисление микроскопических параметров моделей образования и накопления радиационных дефектов, по-видимому, возможно лишь в рамках методов атомистического моделирования: молекулярной динамики, Монте-Карло и функционала электронной плотности. Для уточнения полученных таким образом количественных характеристик можно использовать данные сравнительно маломасштабных экспериментов, интерпретация которых чрезвычайно сложна при отсутствии представлений о механизмах элементарных стадий. Например, таковы эксперименты по отжигу дефектов после облучения и измерению коэффициентов самодиффузии ионов. Все это увеличивает предсказательную способность механистических моделей и расширяет область их применимости за рамки небольшого количества экспериментов, на базе которых эти модели разрабатывались.

Особую роль в атомистическом моделировании радиационных повреждений играют межатомные потенциалы. В ряде работ показано, что большинство потенциалов некорректно описывают поведение радиационных дефектов в веществе [27]. Это объясняется

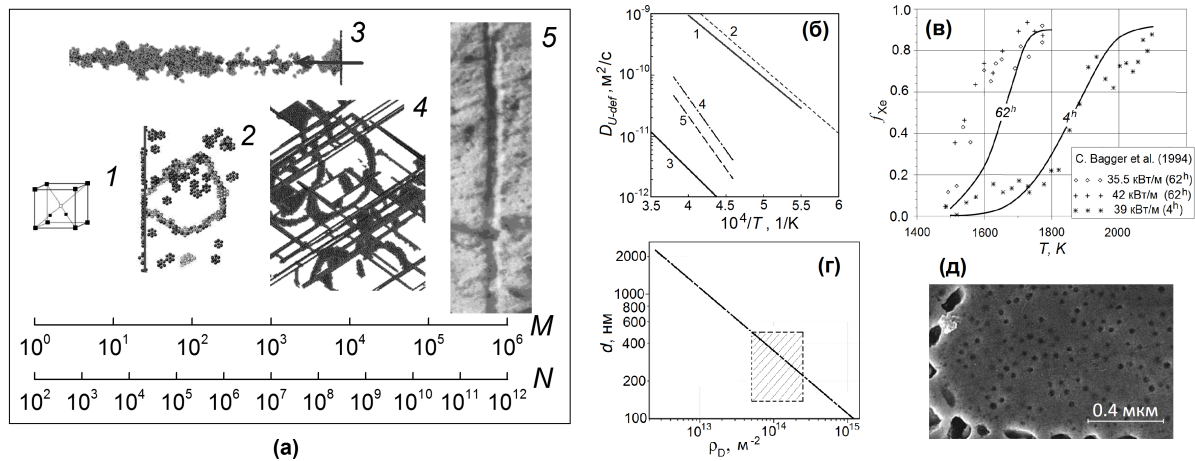


Рис. 7: (а) Перспектива расширения круга доступных процессов при увеличении числа ядер M в атомистических расчётах радиационных повреждений: 1 — МД и DFT расчёты энергий образования и миграции точечных дефектов; 2—взаимодействие точечных дефектов друг с другом и кластерами, дислокационными петлями; 3—генерация дефектов в столкновительных каскадах; 4— расчёты подвижности дислокационных петель и пор, их взаимодействий; 5—формирование дефектов при пролёте осколков деления в объёме и на поверхности материала (на данный момент такие расчёты ещё не проведены). Фрагменты моделирования и эксперимент взяты из работ авторов [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31]. (б) Зависимость коэффициентов диффузии точечных дефектов в урановой подрешётки UO_2 от температуры: 1 и 3 — $D_{U_{SIA}}$ и $D_{U_{vac}}$, полученные на основе экспериментальных данных [32]; 2, 4 и 5 — $D_{U_{SIA}}$, $D_{UO_{divac}}$ и $D_{UU_{divac}}$, рассчитанные МД в [30]. (в) Сравнение измеренных (маркеры) и рассчитанных (кривые) выходов газа при различных временах выдержки в экспериментах с переходными режимами с повышением мощности (из работы [26]). (г) Размер периодической структуры дислокаций от концентрации дислокаций в UO_2 : линия — результат расчета дислокационной динамикой [34]; заштрихованная область — оценки из экспериментальной работы [33]. (д) Сформировавшиеся газовые пузыри в UO_2 [35]

тем, что большинство потенциалов (в первую очередь это относится к полуэмпирическим потенциалам) создаются с использованием равновесных характеристик вещества: постоянная решетки, упругие константы, коэффициент Грюнайсена и др. Однако все эти характеристики описывают вещество в условиях близких к нормальным, когда межатомные расстояния не сильно отличаются от равновесных. С другой стороны межатомные расстояния в непосредственной близости к дефектам кристаллической решетки значительно меньше равновесного. Поэтому при создании потенциалов для задач радиационного материаловедения особое внимание нужно уделять описанию межатомных сил на малых расстояниях между атомами. Одним из наиболее успешных способов создания межатомных потенциалов является метод согласования по силам («force-matching») [27, 28, 29]. Идея метода заключается в конструировании потенциала, основываясь только на расчетах из первых принципов, которые соответствуют наименьшему масштабу на рисунке 7а (стоит отметить, что квантовые расчеты могут быть очень затратные, однако для создание потенциала нужно проводить большое количество небольших квантовых расчетов с системами порядка 100 атомов).

Атомистическое моделирование позволяет моделировать такие сложные процессы, как столкновительные каскады, подвижность и взаимодействие дислокационных петель, фор-

мирование радиоационных треков осколков деления (уровни 2–5 на рис. 7а). Существует большая область задач, которые возможно решить только такими методами. Однако задача описания ядерного материала на временах и масштабах эксплуатации требует привлечения приближенных моделей более высокого уровня. Рассмотрим это на примере диоксида урана (UO_2).

Расчёт механизмов и коэффициентов диффузии точечных дефектов является одним из базовых процессов радиационного повреждения, доступных для моделирования в рамках классической МД. На рисунке 7б показаны зависимость коэффициентов диффузии точечных дефектов (коэффициент диффузии междоузлия $D_{U\text{ SIA}}$, диффузии дивакансии U-O $D_{UO\text{ divac}}$, диффузии дивакансии U-U $D_{UU\text{ divac}}$) в UO_2 от температуры из работы [30]. Видно, что результаты хорошо согласуются с доступными экспериментальными данными [32] и описываются уравнением Аррениуса:

$$D = D_0 \exp(-E_m/kT), \quad (4)$$

где E_m — энергия миграции. Не все коэффициенты диффузии могут быть найдены из анализа экспериментальных данных и поэтому МД является единственным методом их получения.

Рассчитанные коэффициенты диффузии, энергии образования, радиусы рекомбинации, коэффициенты фононного трения и другие рассчитанные характеристики используются в кинетических моделях [26] и в дислокационной динамике [34]. Обе эти модели являются менее точными чем МД, однако способны описывать поведение вещества на макроуровне. На рисунках 7 в-г показаны результаты расчетов этих моделей в сравнении с доступными экспериментами. Данные модели уже способны описывать такие процессы как накопление и структурирование дислокаций, образование газовых пузырей из продуктов деления (рисунках 7д), набухание и охрупчивание вещества и др. Все эти процессы имеют большое значение в ядерной инженерии.

Важно также отметить, что сейчас в ядерной энергетике наблюдается начало революции связанной с переходом от реакторов на тепловых нейтронах к реакторам на быстрых нейтронах. В связи с этим происходит введение в эксплуатацию новых видов ядерных топлив и конструкционных материалов, радиоационные свойства которых еще достаточно плохо исследованы. В связи с этим развитие описанных выше методов для новых веществ (от создания потенциалов до составления новых кинетических уравнений) является крайне актуальной задачей.

6 Нуклеация и кинетика фазовых переходов

Разрушение материалов при интенсивных импульсных воздействиях протекает через образование и распад метастабильных фазовых состояний — например, перегретой или переохлажденной жидкости, растянутого кристалла или жидкости. Распад таких состояний происходит через образование зародышей новой фазы—нуклеацию. В большинстве моделей распада метастабильного состояния используется классическая теория нуклеации (КТН), разработанная в 1920–1950-е гг. в предположении слабого отличия свойств зародыша от свойств объемной среды. В ряде работ указывается на то, что это предположение может не выполняться [37, 36, 38], вследствие чего КТН иногда даёт катастрофическое (5–10 порядков величины) несоответствие результатам экспериментов или прямого атомистического моделирования.

Метод МД позволяет вычислить частоту нуклеации, не привлекая дополнительных сведений о структуре и свойствах зародыша, поскольку они получаются автоматически за счёт

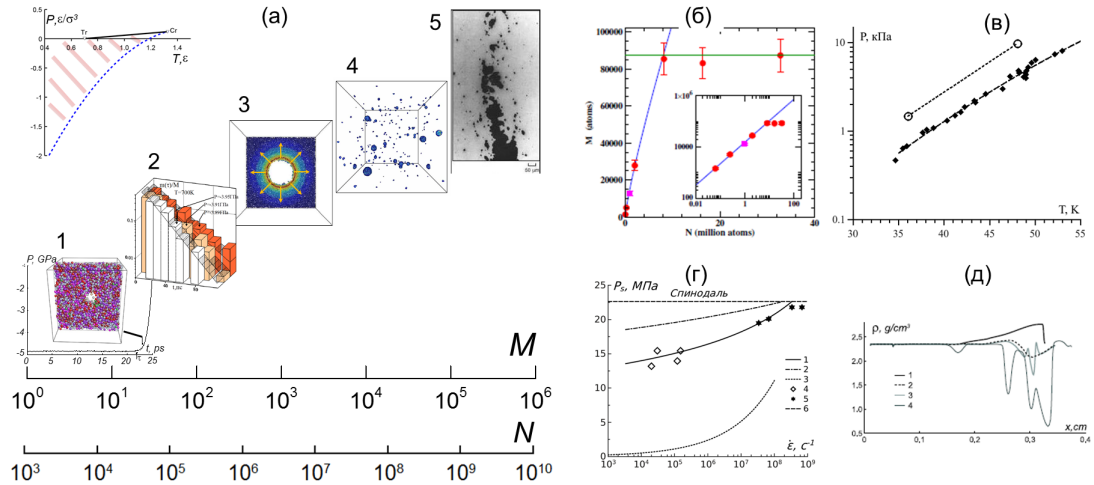


Рис. 8: а) Расширение круга доступных явлений при увеличении числа ядер для расчётов нуклеации полостей в растянутой жидкости. 1–7: см. текст. Врезка сверху справа: фазовая диаграмма Леннарда-Джонсовской жидкости. Заштрихованная область—зона существования метастабильной (перегретой) жидкости между кривой испарения (сплошная линия) и спинодалью (пунктирная линия). Врезка слева сверху: примеры многомасштабного моделирования. б) Средний размер зерна при моделировании кристаллизации расплава тантала в зависимости от размера системы [39] в) Линии постоянной частоты нуклеации $J = 10^{17 \pm 1} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$ в пересыщенных парах аргона. Ромбы—экспериментальные результаты [40], кружки—прямое МД моделирование [41]. г) Распределения полостей по размерам при отколе в жидком гексане, рассчитанные в прямом МД моделировании (синий) и по модели «нуклеация и рост» (красный) [36]. д) Гидродинамический расчет профиля плотности в жидком алюминии при ударно-волновом воздействии с учетом зарождения и роста полостей в метастабильной фазе [50].

прямого решения уравнений движения в атомной системе. Таким образом, на основе МД расчётов возможно проводить определение параметров различных теорий нуклеации, определять границы их применимости, а также исследовать кинетику зародышеобразования в тех процессах, для описания которых не создано надёжной теории.

МД моделирование фазового перехода в метастабильной фазе рассмотрим на примере спонтанного вскипания жидкости при перегреве или растяжении. Явления, доступные для моделирования с различным числом частиц, показаны на рис. 8 и сопоставлены с числом вычислительных ядер, необходимых для решения задачи. Выбор размера системы в МД моделировании определяется характерными временными и пространственными масштабами решаемой задачи [43]. Для моделирования фазового перехода в качестве пространственных масштабов могут выступать

- а) размер зародыша новой фазы;
- б) область влияния растущего зародыша на окружающее вещество;
- в) расстояние между зародышами.

В качестве характерных времен обычно представляют интерес время ожидания первого зародыша и время, необходимое на полное протекание фазового перехода (перехода всей моделируемой системы в устойчивую фазу).

Наименее трудоёмкой задачей является наблюдение нуклеации единичной полости в за-

данном объёме (1 на рис. 8а). Пространственный масштаб задачи определяется размером критического зародыша при заданной степени метастабильности, а временной — временем ожидания критического зародыша. Сложность задачи, таким образом, растёт при движении от границы устойчивости фазы к кривой равновесия в силу роста размера критического зародыша и резкого увеличения времени жизни метастабильной фазы [36, 42, 43, 44].

Второй этап моделирования—расчёт частоты нуклеации. Она является динамической характеристикой системы, и для её расчёта требуется усреднение времени ожидания зародыша по ансамблю МД запусков для систем, находящихся в одном и том же термодинамическом состоянии (2 на рис. 8а). Эта задача допускает два способа распараллеливания [42, 43, 44]. Во-первых, каждый из расчётов в ансамбле может быть распараллелен при помощи декомпозиции по пространству. Во-вторых, для расчётов средних величин по ансамблю можно применить «декомпозицию по ансамблю», т.е. параллельный расчёт нескольких независимых МД траекторий на различных узлах многоядерной системы. Отметим, что в силу независимости МД траекторий в ансамбле при втором виде распараллеливания достигается идеальная масштабируемость из-за отсутствия межпроцессорного взаимодействия.

Третьей по вычислительной сложности задачей является исследование роста зародыша новой фазы (3 на рис. 8а). Пространственный масштаб здесь определяется влиянием роста полости на параметры среды. Динамика роста полости в жидкости в кубической ячейке с ребром L может быть исследована лишь на временах, меньших $t_{max} = L/c_s$, где c_s — скорость звука в жидкости, т.к. затем на рост полости существенно влияют выбранные граничные условия.

Переход на более крупные масштабы расчетов позволяет расширить диапазон доступных для моделирования степеней метастабильности за счет сокращения времени ожидания первого зародыша при увеличении объема системы, а также наблюдать качественные изменения кинетики зародышеобразования с уменьшением степени метастабильности. К примеру, при высоких степенях метастабильности фазовый переход протекает как коллективный процесс, охватывающий весь объём вещества, в то время как при умеренных степенях метастабильности происходит переход к «классической» нуклеации с образованием компактного зародыша [45, 46, 47].

Особенность прямых МД расчетов состоит в том, что объемная концентрация любых неоднородностей (зародыши новой фазы, дефекты кристаллической решетки, примеси и т. д.) при использовании периодических граничных условий ограничена снизу величиной $C_{min} = 1/V_{MD}$, где V_{MD} — объём ячейки моделирования. Поэтому на этапе роста новой фазы, где важно взаимное влияние зародышей, может проявляться размерный эффект. Четвёртый масштабный уровень соответствует переходу к режиму, в котором концентрация зародышей определяется характеристиками физического процесса, а не лимитируется объёмом расчетной области. Он достигается, когда характерный размер МД ячейки превышает среднее расстояние между зародышами новой фазы. Тогда происходит одновременное зарождение и рост множества ($10^2 - 10^3$) полостей в объёме расчётной ячейки (4 на рис. 8а). Такие расчёты позволяют, к примеру, рассчитать предельно достижимое напряжение в микрообъёме жидкости при его однородном нагружении [36].

На рис. 8б показано, как меняется средний размер кристаллического зерна при МД моделировании кристаллизации расплава тантала [39]. Он иллюстрирует влияние границ расчетной области на наблюдаемую в расчетах кинетику фазового перехода. При размере моделируемой системы менее 10 млн. атомов существенным оказывается размерный эффект: среднее число частиц в кристаллическом зерне оказывается прямо пропорционально общему числу частиц в системе. При большем размере системы размерный эффект исчезает, и лишь в этом случае протекание фазового перехода можно считать соответствующим

макроскопически большому объёму.

Пятый масштабный уровень может быть достигнут на мощнейших на данный момент суперкомпьютерах. Прямое МД моделирование объёма 1 мкм^3 и более уже позволяет исследовать с атомным разрешением процессы в системе с неоднородно распределёнными термодинамическими характеристиками: эффекты прохождения ударной волны, её отражения от свободной поверхности и формирования откольной пластины (5 на рис. 8а). Результаты расчетов с 10^9 и более атомов в некоторых случаях могут быть непосредственно сопоставлены с экспериментом. К примеру, в работе [41] результаты МД расчетов напрямую сравниваются с экспериментальными измерениями частоты нуклеации в пересыщенных парах аргона в сопле Лавала [40] (рис. 8в). Отметим, что подобные расчёты предъявляют высокие требования не только к вычислительной системе, но и к дисковому хранилищу: объём выходных данных такого расчёта составляет до десятков и даже сотен терабайт.

Для перехода к кинетике фазового перехода на мезо- и макро-масштабах по данным МД расчётов строятся кинетические модели фазового перехода. На основе рассчитанных частот нуклеации и скорости роста зародышей строятся аппроксимационные зависимости этих скоростей от давления и температуры. На основе этих зависимостей с помощью кинетической модели типа «нуклеация и рост» (NAG—«nucleation and growth») рассчитывается суммарный объём полостей и их распределение по размерам в произвольный момент времени при заданной истории нагружения [36, 49]. Такой подход позволяет рассчитать откольную прочность—предел достигаемых в жидкости напряжений,—а также время жизни жидкости до разрыва. На рис. 8г показан пример расчета откольной прочности жидкого гексана по результатам МД моделирования и сопоставление модели NAG с экспериментом и прямым МД моделированием. Для сравнения показан расчет минимально возможной откольной прочности по широко используемому критерию Грэди [48].

Введение кинетической модели фазового перехода в расчёт методом механики сплошной среды позволяет более точно рассчитывать результат импульсных механических и тепловых воздействий на вещество, в частности, рассчитывать скорость свободной поверхности и профили давления в образцах при ударно-волновом воздействии, предсказать микроструктуру откольной пластины, воздействие схлопывания полостей (кавитации) на находящиеся в жидкости тела. В [50] приведены первые результаты подобного расчёта для откола в жидком алюминии (рис. 8д). В [51] приводятся результаты рекордного гидродинамического расчёта схлопывания 15000 кавитационных полостей в воде. Отметим, что параметры нуклеации и роста зародышей для модели фазового перехода, а также уравнение состояния и коэффициенты переноса для модели сплошной среды могут быть рассчитаны методами классической или квантовой МД [36, 49, 52]. Таким образом, возможно построение моделей поведения вещества при импульсном воздействии без необходимости введения свободных параметров.

Построение многомасштабных моделей для других типов фазовых переходов проводится по той же общей схеме. При этом могут возникать некоторые особенности, связанные со спецификой данного фазового перехода. Так, кинетика роста кристаллического зародыша сложнее, чем для полости в жидкости, из-за асимметрии скорости роста вдоль различных кристаллических направлений. Также при высокоскоростном охлаждении жидкостей может происходить как кристаллизация, так и переход в стекло, в котором не происходит дальнейшего формирования кристаллических зародышей. Эти эффекты исследуются отдельно при помощи МД моделирования и также должны быть включены в кинетическую модель

7 Деформация материалов

Деформация материалов - это один из самых распространенных макроскопических процессов, с которым мы сталкиваемся в обыденных условиях, например, забивая гвозди. Несмотря на распространенность явления, многие модели, описывающие деформацию, остаются феноменологическими или полуфеноменологическими, опираясь на множество проведенных экспериментов. Недостаток таких моделей в том, что они хорошо предсказывают поведение материала в условиях, близких к области их подбора, но могут давать существенные ошибки в свойствах материала за этой областью. Причина заключается в отсутствии адекватной теоретической модели, лежащей в основе моделей.

В последние годы широко развиваются многомасштабные подходы, в основе которых лежит построение многомасштабной модели поведения материала с атомного уровня. Такой подход успешно применяется и для построения моделей деформации материала. Суть его состоит в построении микроскопической модели деформации материала на основе атомистических расчетов, которая затем используется для расчета деформаций на макроскопическом уровне.

В качестве примера рассмотрим модели пластической деформации металлов и сплавов [53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63]. Объектом исследования в таких системах являются дислокации - основные переносчики пластической деформации. В качестве микроскопической модели используют дислокационную динамику, описывающую поведения ансамбля дислокаций в целом. Для замыкания уравнений необходимы константы, характеризующие поведение отдельных дислокаций. Такие константы получают с помощью метода молекулярной динамики. Рассмотрим различные молекулярно-динамические модели, характеризующиеся различным уровнем вычислительной сложности, от более простых к сложным. Конечно, невозможно отобразить полную картину всех молекулярно-динамических расчетов, поэтому будут выделены основные модели, качественно отличающие друг от друга.

Первым уровнем молекулярно-динамических моделей является структура монокристалла, подвергающаяся деформации сдвига. Такая модели не требует больших размеров расчетных ячеек и позволяет исследовать процессы зарождения дислокаций в объеме при сдвиговой деформации [64, 65] (1 на рис.9). Этот процесс играет существенную роль в условиях очень коротких импульсов, когда других процессов зарождения и размножения недостаточно для обеспечения достаточной скорости пластической деформации. С использованием подобных моделей исследуются процессы зарождения дефектов с поверхности [66], являющиеся актуальными для деформации тонких капилляров.

Вторым уровнем является модели поведения одиночной дислокации под действием приложенных напряжений [67, 68, 69, 74, 76] (2 на рис.9). Такие расчеты требуют значительно больших моделируемых систем, поскольку из-за дальнего действия упругого поля дислокации она будет чувствовать сама себя в маленькой системе. Или необходимо учесть более-менее реалистичную структуру материала. Моделирование движения дислокации позволяет определить их подвижность в материалах при различных уровнях напряжений и температурах. Для верификации расчетов проводится сопоставление с имеющимися экспериментальными данными [77, 78] (6) на рис.9). С помощью таких расчетов удалось численно объяснить «аномальную» зависимость предела текучести от температуры [79, 80], наблюдающуюся в эксперименте [81, 82].

Третьим уровнем является учет внутренней микроструктуры материалов (3, 4 на рис.9). Почти все конструкционные материалы не являются монокристаллическими - они обладают зеренной и дислокационной структурой, а также в них вводят специальные упрочняющие добавки. Учет такой сложной микроструктуры накладывает естественные ограничения на размеры расчетных моделей, связанные с размерами кристаллитов [71, 72] или

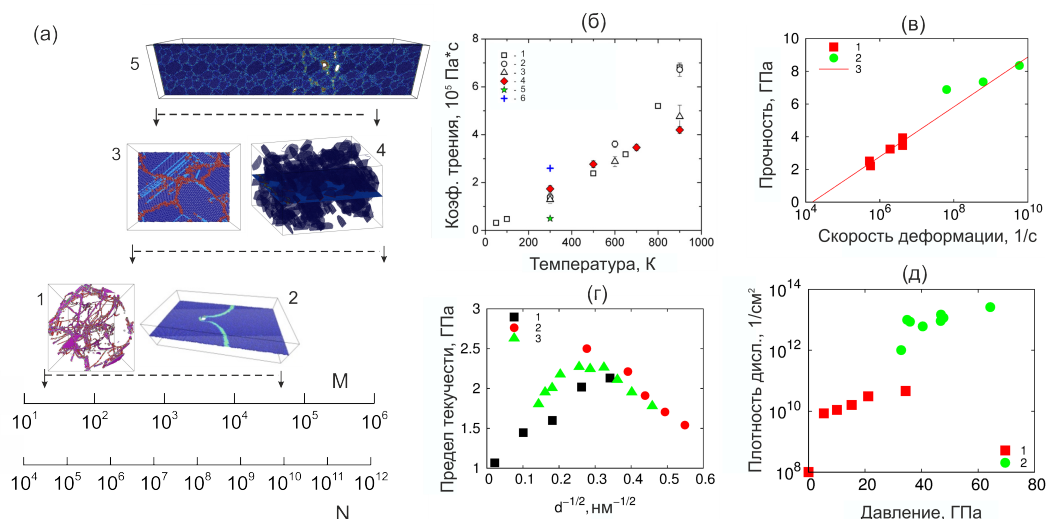


Рис. 9: а) Расширение круга доступных явлений, необходимых для исследования деформации материалов, с увеличением числа ядер. 1–5: см. текст. б) Коэффициента торможения дислокаций в алюминии от температуры: 1-4 – МД расчеты [74, 76]; 5,6 – эксперимент [77, 78]. в) Откольной прочности алюминия от скорости деформирования: 1 – эксперимент [85], 2 – МД расчет [86]. г) Предел текучести от размера зерна нанокристаллической меди: 1 – эксперимент [70]; 2,3 – МД расчеты [71, 72]. д) Плотность дислокаций в алюминии от давления в ударной волне: 1 – эксперимент [87], 2 – МД расчет [88].

концентрацией и размерами упрочняющих выделений [73, 83, 75, 84, 63]. Примером использования таких моделей являются расчеты откольной прочности материала с дислокациями (в) на рис.9), и предела текучести нанокристаллических материалов (г) на рис.9).

Последним пунктом идут прямые молекулярно-динамические расчеты (5 на рис.9). Прямые молекулярно-динамические расчеты являются основным способом моделирования явления в целом, включая все контролирующие процессы. Но, хотя вычислительные мощности с каждым годом возрастают, характерные масштабы пространства и времени в таких расчетах остаются небольшими. Во многих случаях с помощью таких расчетов удается ухватить качественно картину явления, коррелированность протекающих вместе явлений. Например, в расчетах по зарождению дислокаций в условиях ударно-волнового нагружения [88, 89, 90] (д) на рис.9). В последние годы делаются попытки учесть также микроструктуру материала [91, 92].

Таким образом, увеличение суперкомпьютерных мощностей приводит к расширению круга решаемых задач, при этом зачастую к качественно другим явлениям. Так моделирование деформации материалов начиналось с рассмотрения монокристаллических материалов небольших размеров на временах порядка пикосекунд, тогда как сейчас доступны расчеты материалов с микроструктурой и в сложных деформационных процессах.

8 Супрамолекулярные системы

Газовые гидраты—нестехиометрические кристаллические соединения, внешне напоминающие лёд. Они состоят из молекул воды, образующих кристаллическую решётку, и молекул газа, заключённых в её полостях. Данные соединения, как правило, устойчивы при повышенных давлениях и низких температурах. Газовые гидраты формируют различные типы структур, что определяется главным образом размером молекул включения. Газовые гид-

Рис. 10: Расширение круга доступных явлений при моделировании газовых гидратов.

раты активно изучаются в последние годы из-за их энергетического потенциала, а также рассматриваются как средство транспортировки газа на большие расстояния. Методы компьютерного позволяют исследовать свойства таких систем в широком диапазоне времён, недоступных экспериментов.

Квантовый уровень используется в первую очередь для расчёта энергий взаимодействия молекул и создания потенциалов взаимодействия. Полученные результаты могут использоваться напрямую либо в термодинамических моделях, либо в методах молекулярной динамики и Монте-Карло. Термодинамические модели основаны на уравнениях статистической физики, записанных с теми или иными упрощениями, и позволяют получать фазовые диаграммы различных газовых гидратов и их степени заполнения. Такой способ даёт предсказания, достаточные для инженерной точности, однако не подходит для изучения свойств на микроуровне. Для этих целей лучше подходят методы молекулярной динамики и Монте-Карло. Они используются для изучения устойчивости структур, нуклеации и гидратообразования, процессов ингибирования, поверхностных, спектральных (получение колебательных спектров) и транспортных (диффузия, теплопроводность) свойств. Точность таких методов зависит от выбранного потенциала взаимодействия и требует дополнительной верификации. В работах авторов [93, 94] приведены примеры использования этих методов для моделирования фазовой диаграммы и процессов нуклеации в гидратах метана, а также определения стабильности новых структур гидратов водорода.

Для моделирования газовых гидратов преимущественно используются дальнодействующие потенциалы взаимодействия, что сильно снижает пространственные и временные размеры моделируемой системы. Обычный размер расчётной ячейки не превышает десятков тысяч атомов, что может приводить к появлению размерных эффектов и затрудняет прямое сравнение с экспериментом. Дальнейшее развитие связано с распространением суперкомпьютеров типа Blue Gene с тороидальной архитектурой, что позволит уже в ближайшей перспективе вывести расчёты на уровень миллионов атомов. Возможность эффективного распараллеливания МД расчётов газовых гидратов на Blue Gene продемонстрирована в статье [95]. Дальнейший переход на эксафлопсный уровень суперкомпьютеров позволит моделировать микрокристаллы с ярко выраженными размерными эффектами. Возможная такого перехода и перспектива дальнейшего развития схематично представлена на рис. 10.

9 Полимеры

В последнее десятилетие в индустрии конструкционных материалов наблюдается заметный рост интереса к сфере полимерных наноккомпозитов. В первую очередь это обусловлено их необычными механическими свойствами при сравнительно небольшой плотности и высокой

коррозионной стойкости. В качестве наполнителя в полимерной матрице могут выступать углеродные волокна, нанотрубки, фуллерены или иные наночастицы.

Свойства полимерных нанокомпозитов существенным и не вполне очевидным образом зависят от целого ряда параметров: типа, концентрации, ориентации, упругих свойств наполнителя, пластических и термических свойств самой полимерной матрицы. Описание подобной многопараметрической задачи на микроуровне с использованием сугубо экспериментальных методов крайне затруднительно и пока во многом носит эмпирический характер. В то же время предсказательные возможности методов компьютерного моделирования достаточно давно достигли уровня, позволяющего как изучать природу химических процессов, происходящих на атомарном уровне, так и производить качественную и количественную оценку макропараметров нанокомпозитных материалов. Если в первом случае речь идёт о квантовомеханических и классических полноатомных молекулярно-динамических расчётах, то вторая ситуация требует привлечения методов, позволяющих выйти за пространственные (и временные) масштабы, характерные для типичных МД расчётов. На помощь в этом случае приходят методы огрублённой (т.н. coarse-grained) молекулярной динамики.

В огрублённой модели составные части полимеров и полимерных композитов представляются в упрощённой геометрии. Основной идеей метода является объединение нескольких маленьких частиц (групп атомов) в один большой блок (супер-атом) и использование общих силовых постоянных и геометрических параметров, основанных на простых соображениях гибридизации. При таком упрощении функциональной формы описания межатомных взаимодействий важно следить за сохранением физических свойств материалов.

Для сложных полимерных систем не существует универсального алгоритма задания структуры супер-атома (т.н. mapping). Для каждой конкретной задачи методика огрубления атомарной структуры (определение групп атомов, которые в дальнейшем сформируют супер-атомы), как правило, выявляется путём рассмотрения нескольких наиболее уместных вариантов. От выбора варианта огрубления напрямую зависит описательная способность создаваемой упрощённой модели.

Связь масштабов помимо сохранения характера межмолекулярных взаимодействий обеспечивается передачей параметров структуры материала между уровнями. Ценность подобного последовательного с физической точки зрения подхода определяется тем, что основанные на нем многоуровневые модели могут иметь не только описательную, но и прогностическую силу, что чрезвычайно важно для решения задачи о создании материала с заданными свойствами и для разработки его состава *in silico* (рис. 11). Представленную на иллюстрации иерархию элементарных процессов необходимо проследивать, начиная с атомистического уровня классических и квантовых моделей межатомного и межмолекулярного взаимодействия, т.к. только в этом случае создаваемые многомасштабные модели будут способны учитывать нюансы изменения свойств материала при изменении деталей его атомарной структуры. В качестве иллюстрации ускорения вычислений при переходе к огрублённой системе и проверки её масштабируемости был проведён ряд расчётов с моделью полиэтиленовой матрицы, насчитывавшей 30000 атомов. На рис. 12 представлена зависимость реального вычислительного времени, требуемого на расчёт траектории длительностью в одну пикосекунду ($T_{\text{пс}}$), от величины задействованных вычислительных ресурсов. Расчёт производился в пакете LAMMPS с использованием потенциала AIREBO [96] для полноатомной модели и силового поля DREIDING [97] для огрублённой. Силовые константы последнего предварительно вычислялись с помощью методики согласования по силе (force-matching method) на основе поведения полноатомной модели. В качестве супер-атомов рассматривались CH_2 группы.

Основными факторами, обеспечивающими ускорение расчёта с огрублённой моделью на

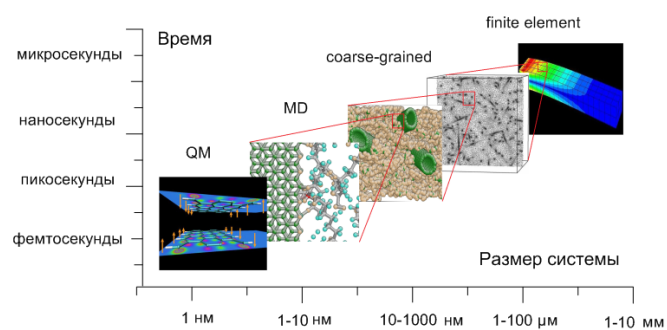


Рис. 11: Принципиальная схема многомасштабного моделирования полимерных композитов

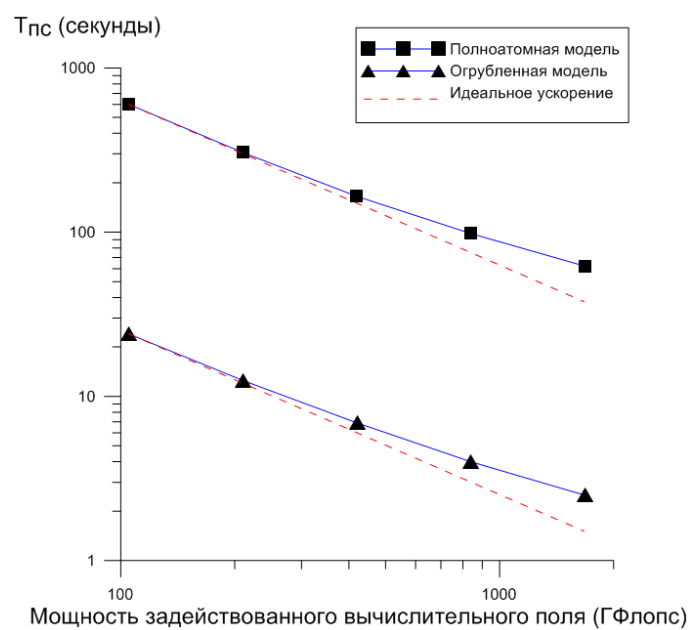


Рис. 12: Зависимость вычислительного времени, требуемого на расчёт траектории длительностью в одну пикосекунду ($T_{пс}$), от величины задействованных вычислительных ресурсов.

фоне полноатомного варианта, являются уменьшение числа атомов в системе и переход к более простым формам межатомных потенциалов. В данном случае переход к огрублённой модели обеспечил ускорение расчёта более чем в 30 раз.

Концентрации наполнителя в нанокompозитах невелики, их массовые доли, как правило, не превышают 4-5%. Помимо того, что сами нановключения в контексте метода молекулярной динамики являются достаточно крупными объектами, содержащими от нескольких десятков тысяч атомов, для расчёта макропараметров материала требуется задействовать в модели существенное их количество. Таким образом, задача анализа свойств полимерных нанокompозитов предполагает проведение расчётов со сверхкрупными системами, отражающих при этом тонкости взаимодействия полимера с нановключением на атомарном уровне. Многомасштабный подход в подобных задачах потенциально позволяет выйти к системам с геометрическими размерами порядка десятков микрометров. Общемировые тенденции к увеличению мощностей и развитию вычислительных кластеров должны внести существенный вклад в задачу изучения свойств полимерных систем.

10 Биология

Прикладную направленность проектов INCITE можно проиллюстрировать работой 2011-2012 гг., посвященной моделированию кровотока в артериях головного мозга [98]. Единая многомасштабная модель объединяет гидродинамическое описание течения крови в рамках модели Навье-Стокса и детальное описание холестеринных частиц методом молекулярной динамики (см. РИС. 8).

Для решения одной задачи в работе используется от 20 до 300 тыс. ядер. Рассматривается структура участка системы артерий. Структура подразделяется на области, каждая из которых рассчитывается на вычислительном поле порядка 5–70 тыс. ядер. ТАБЛИЦА 7 показывает возможность высокой параллельной эффективности расчетов данной модели на размерах вычислительного поля до 200–300 тыс. ядер.

Исследование, выполненное в приведенной работе [98], состоит из следующих частей:

- связь континуального и дискретного алгоритмов с разными временными шагами;
- обмен данными в процессе расчета между частями системы и между континуальным и дискретным уровнями;
- оптимизация производительности с учетом специфики систем IBM BlueGene/P и Cray XT5;
- анализ параллельной эффективности на обеих системах.

Пример работы [98] показывает нетривиальность самого процесса использования новых суперкомпьютерных возможностей, начиная с процесса задания начальных условий и заканчивая обработкой больших массивов выходных данных. Решение подобных проблем, очевидно, имеет высокую научно-техническую ценность.

Таблица 2: Демонстрация сохранения эффективности распараллеливания решения одной задачи на системах BlueGene/P и Cray XT5 до 295 тыс. и 191 тыс. ядер соответственно (из работы [98])

В процессе подготовки

Рис. 13: Многомасштабная модель кровотока с эффектами отложения холестериновых бляшек, сочетающей атомистическое моделирование с моделью жидкости Навье-Стокса [98].

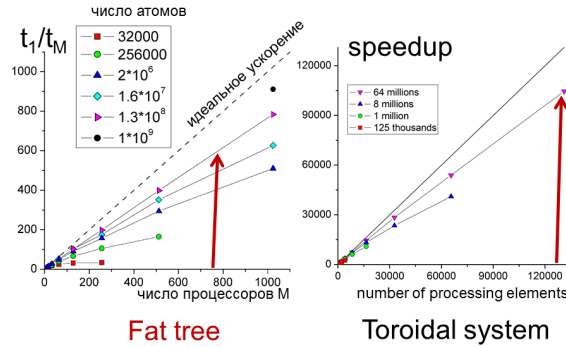


Рис. 14: Схематичное сопоставление масштабируемости на системах толстого дерева (слева) и тора BlueGene/P, ANL (справа) для леннард-джонсовской системы. В обоих случаях использован пакет LAMMPS.

11 Механика сплошных сред

Картинки, аналогичные вышеприведённым, могут быть построены и для задач, решаемых численными методами МСС. По нашему предложению Петров и Хохлов [99] построили пример для задач сеймики.

12 Какие нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса?

Рассмотрим три класса задач.

12.1 Классическое атомистическое моделирование

Результаты, представленные на рис. 14, показывают, что, например, для 10^8 частиц снижение эффективности распараллеливания до 80% для толстого дерева происходит при 700 процессорах, когда ускорение составляет всего ≈ 600 раз, в то время, как для тора – при ≈ 120000 процессорах, когда ускорение составляет уже $\approx 10^5$ раз. Преимущества тороидальной системы весьма значительны. В силу этого, соотношения между осями M и N на рисунках, приведённых в разделе 1.2, будут различаться для систем толстого дерева и тора.

Большую популярность приобрели гибридные системы, включающие графические ускорители (GPU) или сопроцессоры Intel Phi. Однако их использование требует серьезной пе-

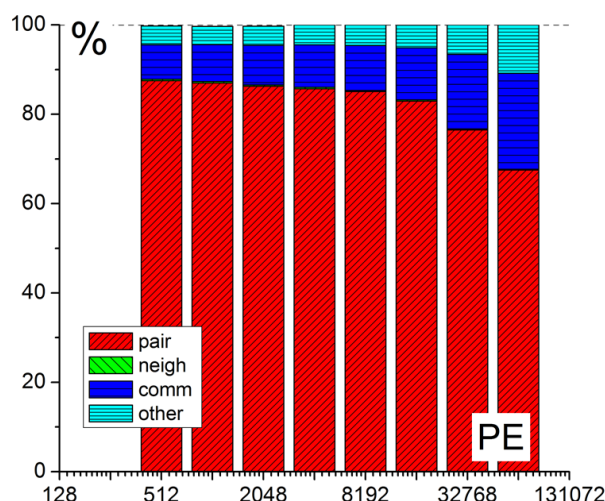


Рис. 15: Распределение потерь времени для тороидальной системы.

В процессе подготовки

Рис. 16: Анализ производительности LAMMPS [122] на системах с различной архитектурой

переработки программ, а выигрыш производительности не всегда оправдывает затраты на разработку (см рис. 16)

12.2 Механика сплошных сред

Ограничение масштабируемости алгоритмов как молекулярной динамики, так и механики сплошных сред (МСС), определяется межпроцессорным обменом данными, что схематично проиллюстрировано на рис. 3 и 17. При декомпозиции по пространству система разделяется на отдельные пространственные области, объёмы которых считаются на разных процессорах. На границе областей процессоры обмениваются данными для расчёта сил в атомистическом моделировании или данными для решения дифференциальных уравнений в частных производных в МСС. И в атомистических, и в МСС моделях пространственная локальность взаимодействия обеспечивает высокую параллельную эффективность данного подхода.

Очевидно, что такого рода параллельные алгоритмы могут быть особенно хорошо оптимизированы на большие размеры вычислительного поля для сетей с тороидальной топологией, которая демонстрирует аналогичную локальность и, соответственно, обеспечивает высокую скорость обменов данными между топологически близкими вычислительными элементами [101]. Для задач классической МД это показано в предыдущем разделе.

В работе Чуданова, Горейнова и др. [102] представлен новый метод решения задач

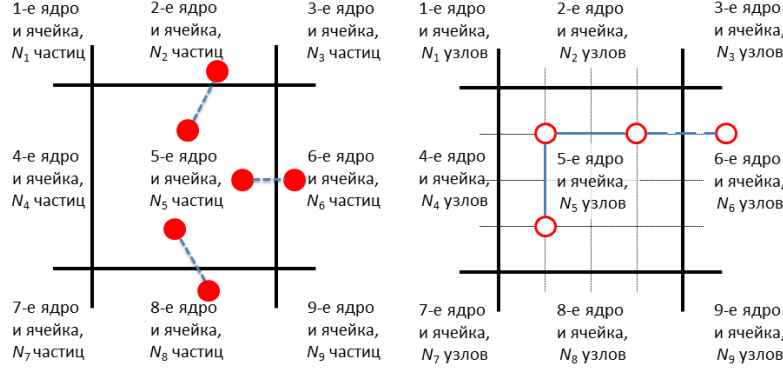


Рис. 17: Схематичное сопоставление масштабируемости атомистического моделирования (слева, см. рис. 3) и в задачах механики сплошных сред (справа), где система разбита на M ячеек, полное число узлов $N = N_1 + N_2 + N_3 + \dots + N_M$.

вычислительной гидродинамики на суперкомпьютерах петафлопсной производительности. Продемонстрирована масштабируемость, близкая к идеальной, вплоть до 100 000 процессоров на BlueGene/P (ANL). Петров и Хохлов [99] продемонстрировали масштабируемость задач сейсмологии, близкую к идеальной, вплоть до 10 000 процессоров. В работе [100] представлены результаты оптимизации производительности прямого численного моделирования (direct numerical simulation (DNS)) турбулентного потока в плоском канале. В методе DNS уравнения гидродинамики решаются без использования подсеточного моделирования. Моделирование турбулентности с большими числами Рейнольдса представляет сложную вычислительную задачу из-за высоких требований к пространственному и временному разрешению. Оптимизированный код был разработан с использованием спектральных методов. Целью оптимизации было решение трех важных проблем: эффективность алгоритмов линейной алгебры для работы с ленточными матрицами, повторное использование кэша и доступа к памяти, обмен данными при транспонировании. Результаты показывают, что производительность зависит от характеристик коммуникационной сети, а не от производительности одного ядра. В тестах они достигли 80% эффективности сильного масштабирования на 786000 ядрах по сравнению с производительностью на 65000 ядрах.

Подход [100] отличается от подхода, использованного в работе Чуданова [102]. В последнем используются естественные переменные скорость-давление (а не вихрь-функция тока), переменные коэффициенты (а не спектральный метод), метод фиктивных областей (а не плоские границы). Заметим, что в докладе на НСКФ-13 по работе [102] было отмечено, что расчёты по их алгоритму не показали насыщения на тороидальной системе, в то время как для толстого дерева наблюдалось насыщение.

12.3 Квантовое (*ab initio*) атомистическое моделирование

Параллелизм и масштабируемость Хотя наличие более глубокого, квантового уровня подразумевалось и в предыдущих разделах, его масштабируемость квантового уровня дана весьма условно, поскольку по сравнению с одномерной масштабируемостью (рис. 4) появляется ещё одна ось—число базисных функций, по которым раскладывается квантовое решение (рис. 18). В работе [103] представлен обзор распараллеливания алгоритмов *ab initio* МД на основе теории функционала электронной плотности в базисе плоских волн. Проанализированы требования к балансу вычислительной мощности узлов и коммутационной сети суперЭВМ с точки зрения достижения максимальной эффективности для примеров

Масштабируемость

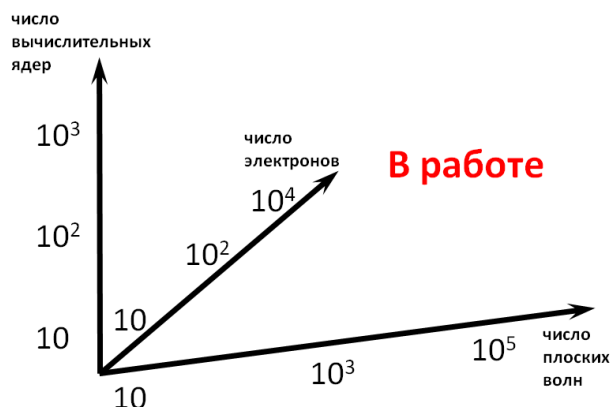


Рис. 18: Схема, иллюстрирующая многопараметрическую масштабируемость задач квантового моделирования.

особенно требовательных в вычислительном отношении задач физики разогретого плотного вещества. Описана альтернативная стратегия параллелизации в вейвлетном базисе и выигрыш в производительности при использовании гибридных вычислительных систем в этом случае.

Роль архитектуры Как и молекулярно-динамические задачи, *ab initio* расчёты являются чувствительными к архитектуре вычислительных кластеров. Вклад в снижение масштабируемости вносит обмен данными между узлами, поскольку в задачах данного типа не представляется возможным добиться распараллеливания вычислений на полностью независимые потоки. В связи с этим, при увеличении количества задействованных вычислительных модулей величина эффективного ускорения расчёта падает.

На рис. 19 представлено сравнение эффективности масштабирования ТФП расчёта для двух суперкомпьютеров с различной топологией коммутационных сетей: толстое дерево и трёхмерный тор. В качестве тестового примера производительности был выбран пакет CP2K. Расчёты проводились для системы, насчитывающей 2048 молекул воды. Данные для IBM BlueGene/P взяты из [104]. Из графика видно, что на системе с топологией толстое дерево данный тип задач в пределах больших размеров вычислительного поля масштабируется хуже: существенное отклонение от прямой идеального масштабирования наблюдается уже при использовании 512 ядер, в то время как на IBM BlueGene/P ускорение растёт линейно вплоть до подключения нескольких тысяч ядер.

12.4 Локальность обменов данными

Нелокальные обмены, однако, являются распространённой чертой вычислительных алгоритмов. Широкий класс подобных алгоритмов в области молекулярного моделирования соответствует многомерному быстрому преобразованию Фурье. Адаптация подобных алгоритмов на сети тороидальной топологией является уже весьма разработанной частью необходимого инструментария параллельных вычислительных алгоритмов [105].

Тороидальные топологии представляют собой одно из магистральных направлений развития интерконнекта. Суперкомпьютеры IBM BlueGene/Q основаны на топологии 5-ти мер-

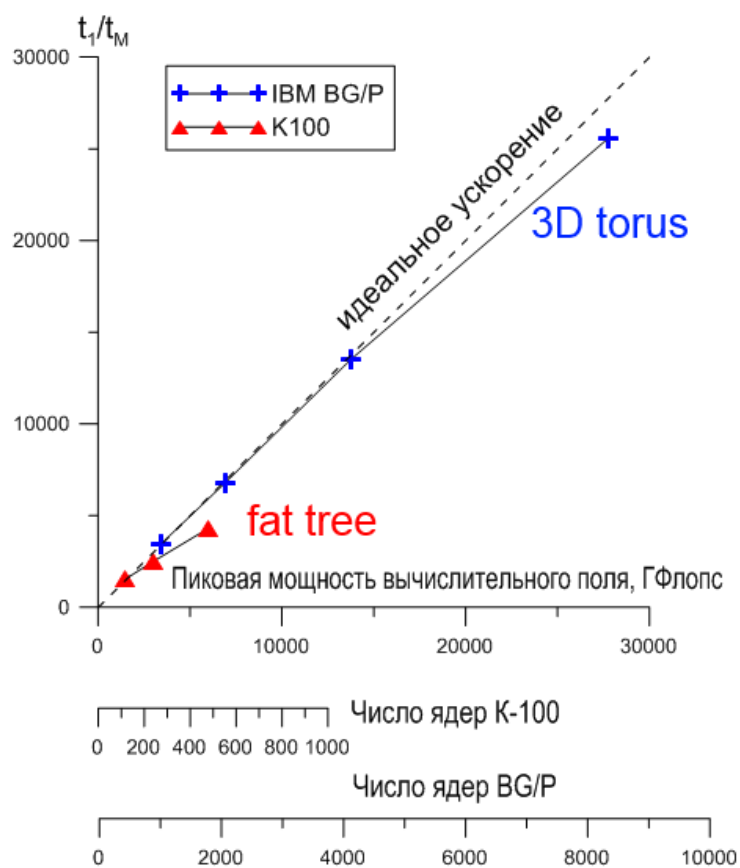


Рис. 19: Оценка параллельной эффективности для модели 2048 молекул воды для различных топологий суперкомпьютеров (расчёт в рамках ТФП с использованием пакета SP2K). Приведены данные для топологии толстое дерево (суперкомпьютер K-100, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) и 3-х мерный тор [104] (IBM BG/P, Research Center Jülich, Германия)

ного тора, интерконнект Fujitsu Tofu соответствует неполному 6-ти мерному тору. Таким образом, развитие идёт в направлении роста локальной связности коммуникаций. Хотя «тороидальность» сама по себе и не является обязательной. Так на смену интерконнекту с топологией 3-х мерного тора Cray Gemini пришла новая коммуникационная сеть Cray Aries с гибридной топологией «стрекоза» (dragonfly).

Очевидно, что развиваемые вычислительные алгоритмы «эксафлопсной эры» должны будут учитывать особенности интерконнекта. И наоборот: выбор коммуникационной сети должен определяться будущими задачами. При этом проблема наилучшего отображения коммуникационного шаблона задачи на топологию коммуникационной сети — выходит на передний план [106] вместе с требованиями повышения локальности коммуникаций используемых алгоритмов для снижения энергозатрат [107].

13 Развитие программного обеспечения в России

13.1 Новые тенденции не замечены?

Отставание в производительности суперкомпьютерных систем может рассматриваться как количественное отставание (т.е. мы решаем задачи на мировом уровне, но в меньшем количестве и дольше). К сожалению, отсутствие суперкомпьютеров с перспективной топологией интерконнекта и отставание в размере вычислительного поля является уже в большей степени качественным отставанием. Это значит, что российские исследователи вообще лишены возможности разрабатывать алгоритмы мирового уровня.

С начала 2000-х годов активное развитие систем с топологией типа тор стимулирует целую область исследований на стыке computer science и вычислительной математики, а именно — исследование алгоритмов коллективных коммуникаций в сетях с подобной топологией. В связи с отсутствием подобных суперкомпьютерных систем в России данная область развивается крайне медленно.

В качестве примеров зарубежных работ этой тематики можно привести две публикации ученых из США [108] и [109]. На работу [108] за период немногим больше 3 лет была дана 31 ссылка в научной периодике (авторы цитирующих статей из Австрии, Германии, Индии, Италии, Испании, Китая, США и Турции). На работу [109] за период немногим больше 1 года было дано 21 ссылка в научной периодике (авторы цитирующих статей из Бельгии, Германии, Индии, Испании, Китая и США).

Пример данных статей показывает высочайшую востребованность в мире исследований в данной области. К сожалению, косвенно подобный анализ литературы выявляет скромный вклад российских ученых в данном направлении. Результаты исследований по разработке вариантов российского интерконнекта представлены всего в нескольких статьях [110, 111, 112, 113, 114].

Появление технологии параллельного программирования MPI (совпавшее с появлением рейтинга Top500) в значительной степени скрыло архитектурные различия высокопроизводительных систем. Однако технологические трудности продвижения «по пути к эксафлопсу» показывают, что оптимизация приложений на сверхбольших вычислительных полях не может не учитывать деталей их аппаратного устройства. Эффективное использование системы с тороидальным интерконнектом основано на использовании топологически определенных сегментов системы (например, «замкнутых» сегментов из 512 ядер) и специальной организации расположения данных на узлах с учетом топологии для минимизации обменов. Проблемы такого рода для систем с топологией «толстое дерево» выражены слабее и, главное, требуют принципиально иных подходов для решения. На уровне узлов стандарт MPI тоже не может «автоматически» обеспечить высокую эффективность. Большинство

современных гибридных GPU-систем основано на связке MPI+CUDA. На первый взгляд архитектурно однородные системы с ускорителями Intel Phi также требуют решения проблемы MPI-обменов как внутри одного ускорителя, так и внутри одного узла.

13.2 Параллельные алгоритмы и прикладное программное обеспечение: почти катастрофическое отставание!

Еще один аспект качественного отставания российской суперкомпьютерной отрасли обусловлен тем, что создание алгоритмов решения конкретных задач неразрывно связано с топологией интерконнекта и системным программным обеспечением. Достижение максимальной параллельной эффективности — это тонкий процесс, основанный на учете специфики решаемой задачи и специфики имеющейся суперкомпьютерной техники. Можно констатировать, что текущая ситуация определяет исключение российских ученых из важнейшего мирового тренда развития вычислительных методов для высокопроизводительных расчетов.

Эффективность алгоритма распараллеливания определяется уменьшением времени расчета при росте числа задействованных вычислительных элементов. В идеальном случае при росте вычислительного поля с 10 до 100 ядер решение задачи должно пройти в 10 раз быстрее. В действительности передача данных между узлами приводит к отклонению от идеальной масштабируемости. Параллельный алгоритм тем лучше, чем большее вычислительное поле можно эффективно использовать. Например, реальный случай может выглядеть так: при переходе с 10 на 100 ядер время расчета падает в 7 раз, при переходе с 10 на 1000 ядер — падает в 20 раз, при переходе с 10 на 2000 ядер — возрастает в 2 раза. В последнем случае распараллеливание на такое большое вычислительное поле становится неэффективным. Основная задача создателя параллельного алгоритма — повысить подобную границу потери параллельной эффективности.

По нашим субъективным наблюдениям (статистика не известна), большинство задач, решаемых на отечественных суперкомпьютерах, используют порядка 10–100 вычислительных ядер (без учета GPU ускорителей). Большее количество ядер на практике не востребовано из-за потери эффективности распараллеливания используемых кодов. Малое число задач использует порядка 1000 ядер. Задачи, которые эффективно решаются с использованием порядка 10000 ядер, в российской практике редки.

Таблица 3: Распределение вычислительных ресурсов по программе INCITE в 2010 и 2014 гг.

Система	Число ядер	Rpeak, ПФлопс	Rmax, ПФлопс	Время, млн. проц.-часов
2010				
Cray XT5 «Jaguar»	224 162	2.331	1.759	940
IBM BlueGene/P «Intrepid»	163840	0.557	0.459	646
Соотношение	1.4	4.2	3.8	1.5
2014				
Cray XK7 «Titan»	299 008/ 560 640	27.11	17.59	2250
IBM BlueGene/Q «Mira»	786 432	10.07	8.59	3530
Соотношение	0.4/0.7	2.7	2	0.64

В рамках программы INCITE традиционно распределяется 60% вычислительного вре-

мени на одной системе IBM и одной системе Cray Департамента энергетики США. Интересные данные представляет анализ распределения проектов между ними по выделенному вычислительному времени. Таб. 3 показывает суммарные квоты времени, выделенные на каждой из двух систем в 2010 и 2014 гг. для проектов INCITE. Сравнение показывает, что доля выделяемого вычислительного времени определяется числом процессорных ядер, а не вычислительной мощностью систем.

Очевидно, что в результате работ в рамках программы INCITE и аналогичных ей (ALCC и др.) будет накоплен опыт разработки программ для суперкомпьютеров экзафлопсного класса тороидальной архитектуры и созданы коды для предсказательного физико-математического моделирования во всех областях науки и техники. Естественно, аналогичное развитие имеет место и в области технологий обработки больших объемов данных (DIS). К сожалению, сегодня российские исследователи практически лишены возможности участвовать в подобных международных проектах из-за отсутствия необходимой инфраструктуры для предварительной отладки задач. Даже № 1 в России кластер «Ломоносов» может предоставить только 50 тыс. процессорных ядер! Можно констатировать, что к настоящему времени с точки зрения приложений суперкомпьютерная отрасль в России прошла этап накопления критического объема опыта [115, 116]. Во многих областях исследователи активно используют параллельные вычисления в различных областях науки и техники. Имеется ярко выраженный дефицит вычислительного времени на ресурсах коллективного доступа. Для решения большого числа задач пользователи активно привлекают как программные решения с открытым кодом, так и коммерческие продукты. Мировая практика показывает, что разработка параллельного программного обеспечения перестает быть частным делом узкого коллектива специалистов и становится предметом больших коллаборативных (зачастую международных) проектов. Примером одной из областей, демонстрирующей активный спрос на параллельные вычисления, является молекулярное и атомистическое моделирование, расчеты электронной структуры и квантовая химия [5, 103]. Значительный прогресс в достижении параллельной эффективности на системах с тороидальной архитектурой достигается с помощью распределения данных по узлам с учетом топологии интерконнекта. Таким образом удается существенно минимизировать объемы межузловых обменов данными. С помощью подобных приемов удается добиться относительно высокой параллельной эффективности даже для такого чрезвычайно требовательного к обменам класса задач, как задачи расчета электронной структуры (см., например, [117]). Различные примеры хорошо масштабируемых атомистических моделей были представлены нашим коллективом на НСКФ-2013 [118].

Обратившись к истории развития связей аппаратной и программной составляющих суперкомпьютерной отрасли в мире, с точки зрения физического моделирования можно выделить одну важную «развилку». В 1992 г. в одном из наиболее престижных физических журналов *Physical Review Letters* одновременно вышло две статьи, описывающие результаты расчетов на основе квантово-механических первопринципных (*ab initio*) моделей с использованием массивно-параллельных алгоритмов [119, 120]. В целях демонстрации новых возможностей в этих статьях рассчитаны свойства поверхности кристаллического кремния, имеющие прямое отношение к решению фундаментальных проблем микроэлектроники.

Для расчетов использовались две различные массивно-параллельные системы: тороидальная система Meiko Computing Surface (использовалось вычислительное поле из 64 транспьютерных узлов с процессорами Intel i860) и система типа гиперкуб Thinking Machines CM-2 (использовалось 16384 однокбитовых процессора совместно с 512 арифметическими ускорителями Weitek). Указанное аппаратное обеспечение стало доступно в 1986–1987 годах и, таким образом, на разработку программного обеспечения ушло, по-видимому, всего около 3–4 лет. Можно с уверенностью утверждать, что созданный в то время методиче-

ский задел определил сегодняшние лидирующие позиции зарубежных коллективов в области программного обеспечения для компьютерного материаловедения, вычислительной химии и других смежных областей, связанных с атомистическим моделированием. Для задач других типов (газовая динамика, квантовая хромодинамика и др.) подобный задел начал формироваться в то же время (причем и в Советском Союзе — см., например, [121]). Эпоха потрясений начала 1990-х годов помешала российским ученым принять активное участие в развитии программного обеспечения для массивно-параллельных систем в момент их появления. За прошедшее двадцатилетие отставание удалось сократить. Однако уже наступивший новый этап развития суперкомпьютерных массивно-параллельных вычислительных технологий XXI века еще не вызывал должного отклика в России и требует незамедлительных и решительных действий.

14 Заключение

14.1 Зачем нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса

Рассмотрен подход, позволяющий выяснять потребности перспективных задач физики, химии и других естественных наук в полномасштабных расчётах на суперкомпьютерах эксафлопсного класса, т.е. определить, может ли решение той или иной задачи загрузить одновременно сотни тысяч или даже миллионы вычислительных ядер в одном расчёте и нужно ли это. Подход основан на проверке масштабируемости алгоритмов при переходе к большему числу вычислительных ядер и на теоретической оценке размеров системы, требуемых для рассмотрения конкретной задачи. Развиваемый подход позволяет установить перспективу нарастания сложности задач, принадлежащих к одному научному направлению, возможность решения которых будет открываться с прогрессом развития суперкомпьютеров. Приведены примеры из области классического и квантового атомистического моделирования и вычислений методом молекулярной динамики. Отмечено, что подход имеет более широкую область применения, в частности, в механике сплошных сред при использовании новых алгоритмов численных методов расчётов на сетках. Указано и на многомасштабные подходы.

14.2 Какие нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса

Подчёркнуто, что успех применения суперкомпьютеров равной производительности к решению одной и той же научной задачи может сильно зависеть от архитектуры суперкомпьютера. Сопоставлены результаты расчётов на суперкомпьютерах двух топологий: толстое дерево и тор. Рассмотрены три класса задач: классическая молекулярная динамика, численные методы механики сплошных сред и квантовое атомистическое моделирование.

Показано, что использование суперкомпьютеров тороидальной топологии оказывается предпочтительным для всех трёх классов задач. При этом речь может идти о выигрыше в производительности в десять и более раз, а в некоторых случаях задача, решаемая на тороидальной системе, оказывается не решаемой на системе толстое дерево. Заметим, что суперкомпьютер «Млечный Путь» (№1 в Top500) может провалиться вниз для конкретной научной задачи ввиду своей сомнительной архитектуры.

Вместе с тем ограничивать разработчиков только тороидальными системами не следует. Алексей Лацис [123] совершенно справедливо заметил, что будущее за новыми техническими решениями. Примером из недавнего прошлого стали графические ускорители.

14.3 Взаимодействие разработчиков и пользователей суперкомпьютеров

В новой редакции Top500 [124] от 19 ноября 2013 в верхней десятке стало на 1 тороидальную систему больше. Было 6, стало 7. Это связано с тем, что суперкомпьютеры в США создаются под определённые классы задач с учётом мнения пользователей. Два примера из практики IBM многих десятилетий.

При разработке архитектуры суперкомпьютеров IBM BlueGene/L задачи молекулярного моделирования рассматривались в качестве главного приоритета [1].

Благодарности. Авторы признательны. Работа частично поддержана грантами программ фундаментальных исследований Президиума РАН № 43 (координатор ак. Бетелин В.Б.), РФФИ 13-01-12070-офи_м. Отдельные авторы частично поддержаны грантами РФФИ 13-08-01428-а (Куксин А.Ю., Смирнов Г.С., Стегайлов В.В.), 14-08-31550-мол_а (Смирнов Г.С., Орехов Н.Д.), 14-08-31587-мол_а (Писарев В.В.), 14-08-31694-мол_а (Сайтов И.М.), стипендией Президента РФ для молодых учёных (Писарев В.В.). Расчеты выполнены в МСЦ РАН, на кластерах МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ, К-100 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, «Ломоносов» МГУ им. М. В. Ломоносова. Использовались пакеты LAMMPS, VASP, CPMD, CP2K и собственные разработки.

Список литературы

- [1] <http://www.researchibm.com/journal/rd49-23.html>
- [2] <http://www.doeleadershipcomputing.org/>
- [3] Стегайлов В В, Норман Г Э *Прогр. сист.: теор. и прил.* **5** 111 (2014)
- [4] Норман Г Э, Стегайлов В В *Мат. модел.* **24** 3 (2012)
- [5] Янилкин А В и др. *Выч. методы и прогр.* **11** 111 (2010)
- [6] Insepov Z A, Karatajev E M, Norman G E *Zeitschrift für Phys. D Atoms Mol. Clust.* **20** 449 (1991)
- [7] Savolainen J M, Christensen M S, Balling P *Phys. Rev. B* **84** 193410 (2011)
- [8] Ионин А А и др. *Письма в ЖЭТФ* **94** 289 (2011)
- [9] Ishino M et al. *Appl. Phys. A* **110** 179 (2012)
- [10] Ашитков С И и др. *Письма в ЖЭТФ* **95** 195 (2012)
- [11] Емельянов В И и др. *Письма в ЖЭТФ* **99** 601 (2014)
- [12] Povarnitsyn M E *Phys. Rev. B* **75** 235414 (2007)
- [13] Inogamov N A et al. *Appl. Surf. Sci.* **255** 9712 (2009)
- [14] Стариков С В и др. *Письма в ЖЭТФ* **93** 719 (2011)
- [15] Mazhukin A V, Mazhukin V I, Demin M M *Appl. Surf. Sci.* **257** 5443 (2011)
- [16] Норман Г Э, Стариков С В, Стегайлов В В *ЖЭТФ* **141** 910 (2012)
- [17] Norman G et al. *J. Appl. Phys.* **112** 013104 (2012)
- [18] Povarnitsyn M E et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** 3108 (2013)

- [19] Inogamov N A et al. *Contrib. to Plasma. Phys.* **53** 796 (2013)
- [20] Norman G E et al. *Contrib. to Plasma. Phys.* **53** 129 (2013)
- [21] Vincenc Obona J et al. *Appl. Surf. Sci.* (2014), to be published
- [22] Starikov S V et al. *Appl. Phys. B: Lasers and Optics* (2014), to be published
- [23] Ivanov D S et al. *Appl. Phys. A* **111** 675 (2013)
- [24] Wu C, Zhigilei L V *Appl. Phys. A* **114** 11 (2014)
- [25] Insepov Z et al. *J. Nucl. Mat.* **425** 41 (2012)
- [26] Veshchunov M S et al., in *TMS2013 Supplemental Proceedings* (USA:John Wiley & Sons Inc, 2013) p.655
- [27] Starikov S V et al. *Phys. Rev. B* **84** 104109 (2011)
- [28] Smirnova D E, Starikov S V, Stegailov V V *J. Phys. Condens. Matter* **24** 015702 (2012)
- [29] Smirnova D E et al. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **21** 035011 (2013)
- [30] Куксин А Ю, Смирнова Д Е *ФТТ* **56** (2014), в печати
- [31] Старикиов С В *TBT* (2014), в печати
- [32] Matzke H *J. Chem. Soc.* **83** 1121 (1987)
- [33] Ray I L F et al. *JNM* **245** 115 (2014)
- [34] Baranov V G et al. *JNM* **444** 129 (2014)
- [35] Zacharie I et al. *JNM* **225** 85 (1998)
- [36] Kuksin A Yu et al. *Phys. Rev. B* **82** 174101 (2010)
- [37] Wang Z-J, Valeriani C, Frenkel D *J. Phys. Chem. B* **113** 3776 (2009)
- [38] Schmelzer J W P *J. Non Cryst. Solids.* **354** 269 (2008)
- [39] Streitz F, Glosli J, Patel M *Phys. Rev. Lett.* **96** 225701 (2006)
- [40] Sinha S et al. *J. Chem. Phys.* **132** 064304 (2010)
- [41] Diemand J et al *J. Chem. Phys.* **139** 74309 (2013)
- [42] Норман Г Э, Стегайлов В В *ДАН* **386** 328 (2002)
- [43] Kuksin A Yu et al. *Mol. Simul.* **31** 1005 (2005)
- [44] Bazhirov T T, Norman G E, Stegailov V V *Russ. J. Phys. Chem.* **80** S90 (2006)
- [45] Белашенко Д К *ЖФХ* **80** 2207 (2006)
- [46] Белашенко Д К, Островский О И *ЖФХ* **82** 443 (2008)
- [47] Trudu F, Donadio D, Parrinello M *Phys. Rev. Lett.* **97** 105701 (2006)
- [48] Grady D E *J. Mech. Phys. Solids* **36** 353 (1988)

- [49] Куксин А Ю, Янилкин А В *ДАН* **413** 615 (2007)
- [50] Kuksin A Yu et al., in *Physics of Extreme States of Matter—2011* (Eds V E Fortov et al.)(Chernogolovka, 2011) p. 57
- [51] Rossinelli D et al., in *Proceedings of SC13* (New York: ACM, 2013) p. 3:1
- [52] Писарев В В *ТБТ* **50** 769 (2012)
- [53] Gillis P P, Gilman J J *J. Appl. Phys.* **36** 3370 (1965)
- [54] Jones O E, Mote J D *J. Appl. Phys.* **40** 4920 (1969)
- [55] Johnson, J.N., Jones, O.E., Michaels, T.E., 1970. *J. Appl. Phys.* 41 (6), 2330–2339.
- [56] Hiratani, M., Nadgonry, E.M., 2001. *Acta mater.* 49, 4337–4346.
- [57] Winey, J.M., Gupta, Y.M., 2006. *J. Appl. Phys.* 99, 023510.
- [58] Groh, S., Marin, E.B., Horstemeyer, M.F., Zbib, H.M., 2009. *Int. J. Plasticity* 25, 1456–1473.
- [59] Ding J L, Asay J R , Ao, T., 2010. *J. Appl. Phys.* 107, 083508.
- [60] Austin, R.A., McDowell, D.L., 2011. *Int. J. Plast.* 27(1), 1-24.
- [61] Barton, N.R., Bernier, J.V, Becker, R., Arsenlis, A., Cavallo, R., Marian, J., Rhee, M., Park, H.-S., Remington, B.A., Olson, R.T., 2011. *J. Appl. Phys.* 109(7), 073501.
- [62] Hansen, B.L., Beyerlein, I.J., Bronkhorst, C.A., Cerreta, E.K., Dennis-Koller, D., 2013. *Int. J. Plast.* 44 , 129-146.
- [63] Yanilkin A.V., Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A.E. *International Journal of Plasticity*. 2014. V. 55. P. 94–107.
- [64] Tschopp M A, Spearot D E, McDowell D L *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 15 (2007) 693–709.
- [65] Норман Г.Э., Янилкин А.В. *ФТТ* 2011, Т. 53, Вып. 8, С.1536-1541.
- [66] Zhu T, Li J, Samanta A, Leach A, Gall K. *PRL* 100, 025502 (2008).
- [67] Osetsky, Yu. N., Bacon, D. J., 2003. *Model. Simul. Mater. Sci.Eng.* 11, 427-446.
- [68] Mordehai, D., Ashkenazy, Y., Kelson, I., Makov, G., 2003. *Phys. Rev. B* 67, 024112.
- [69] Olmsted, D.L., Hector, L.G., Curtin, W.A., Clifton, R.J., 2005. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 13, 371–388.
- [70] Siegel R.W., Fougere G.E. *Nanostruct. Mater.* 6, 205 (1995).
- [71] Jakobsen, K.W. and Schiotz, J. *Science* 301, 1357 (2003).
- [72] Куксин, А.Ю. and Стегайлов, В.В. and Янилкин, А.В. // *ФТТ*, 2008, том 50, вып. 11 С. 1984-1990.
- [73] Monnet G. // *Acta Materialia* 55 (2007) 5081–5088.

- [74] Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. // ДАН. 2008. Т. 420. № 4. С. 467-471.
- [75] Bacon D. J., Osetsky Yu. N. // Mathematics and Mechanics of Solids 2009; 14; 270.
- [76] Куксин А.Ю., Янилкин А.В. // ФТТ 2013, Т.5, с. 931-939.
- [77] Hikata, A., Johnson, R.A., Elbaum, C., 1970. Phys. Rev. B 2, 4856.
- [78] Gorman J A, Wood D S, Vreeland T Jr 1969. Phys. Rev. B 40, 833.
- [79] Красников В.С., Куксин А.Ю., Майер А.Е., Янилкин А.В. // ФТТ. 2010. Т. 52. № 7. С. 1295-1304.
- [80] Krasnikov V S, Mayer A E, Yalovets A P, 2011. Int. J. Plast. 27, 1294.
- [81] Kanel, G.I., Razorenov, S.V., Baumung, K., Singer, J., 2001. J. Appl. Phys. 90 (1), 136–143.
- [82] Razorenov, S.V., Kanel, G.I., Fortov, V.E., 2003. Physics of Metals and Metallography 95 (1), 86-91.
- [83] Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. // ФТТ. 2008. Т.50. Вып. 11.С.1984-1990.
- [84] Singh, C.V., Warner, D.H., 2010. // Acta Materialia 58, 5797-5805.
- [85] Cao B., Bringa E.M., Meyers M.A. Met. Mater. Trans. A 38A, 2683 (2007).
- [86] Жилиев П.А., Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. // ФТТ, 2010, том 52, вып. 8. С. 1508-1512.
- [87] Gray, G.T. and Huang, J.C. 1991. Mater. Sci. Eng. A – Struct. 145, 21–35.
- [88] Holian, B.L. and Lomdahl, P.S. 1998. Science 280, 2085–2088.
- [89] Zhakhovsky V. V., Budzevich M. M., Inogamov N. A., Oleynik I. I., White C. T. // PRL 107, 135502 (2011).
- [90] Ravelo R., Germann T. C., Guerrero O., An Q., Holian B. L. // Phys. Rev. B 88, 134101 (2013).
- [91] Fensin S J, Valone S M, Cerreta E K, Escobedo-Diaz J P, Gray III G T, Kang K, Wang J. // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21 (2013) 015011.
- [92] Gunkelmann N. et al. *Phys. Rev. B* **89** 140102(R) (2014)
- [93] Smirnov G S, Stegailov V V *J. Chem. Phys.* **136** 044523 (2012)
- [94] Smirnov G S, Stegailov V V *J. Phys. Chem. Lett.* **4** 3560 (2013)
- [95] English N *Energies* **6** 3072 (2013)
- [96] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A *J. Chem. Phys.* **112** 6472 (2000)
- [97] Mayo S L, Olafson B D, Goddard W A *J. Phys. Chem.* **94** 8897 (1990)
- [98] Grinberg L, Insley J A, Fedosov D, Morozov V, Papka M E, Karniadakis G E *Comp. Science Eng.* **14** 58 (2012)
- [99] Хохлов Н И, Петров И Б, НСКФ (2013)

- [100] Lee M, Malaya N, Moser R 2013. *Proc. Int. Conf. High Perf. Comp., Networking, Storage and Analysis*. Article 61 , 11 pages. (2013)
- [101] Bhatel  A Kal  L V Kumar S, in *Proceedings of the 23rd International Conference on Supercomputing* (New York: ACM, 2009) p. 110
- [102] Чуданов В В и др., НСКФ, 2013
- [103] Жили ев П А, Стегайлов В В *Выч. методы и прогр.* **13** 37 (2012)
- [104] Bethune I et al. *PRACE White Paper* (2011)
- [105] Ayala O Wang L-P *Parallel Computing* **39** 58 (2013)
- [106] Hoe ler T Snir M *Proceedings of the International Conference on Supercomputing* (New York: ACM, 2011) p. 75
- [107] <http://www.cs.cornell.edu/Reports/2008/TR-2008-13.pdf>
- [108] Faraj A. et al. 17th IEEE Symposium on High Performance Interconnects. 2009. P. 63–72.
- [109] Chen D et al. // *Proc. Int. Conf. for High Perf. Computing, Networking, Storage and Analysis (SC)*, 2011.
- [110] Адамович И А и др. *Прогр. сист.: теория и прилож.* **1** 107 (2010)
- [111] Елизаров Г С и др. *Выч. методы программ.* **13** 103 (2012)
- [112] Корж А А и др. // *Вест. ЮУрГУ — серия «Мат. модел. и программирование»*. 2010. Т. 211. № 35. С. 41–53.
- [113] Слуцкий А И и др. // *Успехи совр. радиоэлектроники*. 2012. №1.
- [114] Басалов В. Г., Вялухин В. М. // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов*. 2012. № 3. С. 64–70.
- [115] Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности / Под ред.: академика В. А. Садовни его, академика Г. И. Савина, чл.-корр. РАН Вл. В. Воеводина. — М.: Издательство МГУ, 2012. С. 42–49.
- [116] Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin V., Opanasenko V. // In *Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale*; Vetter J. S. Ed., CRC Press: Boca Raton, FL, 2013. P. 283–307.
- [117] Hutter J., Curioni A. // *Chemical Physics* 2005. V. 6. P. 1788–1793.
- [118] Куксин А Ю и др., НСКФ, 2013
- [119]  tich I., Payne M. C., King-Smith R. D., Lin J.-S. *Phys. Rev. Lett.* **68** 1351 (1992)
- [120] Brommer K D, Needels M, Larson B E, Joannopoulos J D *Phys. Rev. Lett.* **68** 1355 (1992)
- [121] Дуйсекулов А Е, Елизарова Т Г *Мат. модел.* **2** 139 (1990)
- [122] Plimpton S J. *Comput. Phys.* **117** 1 1 (1995)
- [123] Андреев С С и др., НСКФ, 2013
- [124] <http://top500.org/lists/2013/11/>