

УДК 004.428.2, 004.021

А. Б. Терентьев, С. А. Савихин, С. А. Золотов,
А. А. Панкратов, А. О. Музыченко, А. А. Носов

Программный комплекс CUMPS как эффективное средство моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах

Аннотация. В данной работе описаны возможные методы численного моделирования сложных взаимосвязанных процессов электродинамики, гидродинамики, химии и др. на высокопроизводительных вычислительных системах при помощи разработанного программного комплекса CUMPS, который позволяет наиболее полно и эффективно использовать архитектуру современных суперкомпьютеров.

Ключевые слова и фразы: Параллельные вычисления, уравнение Больцмана, метод решёчатых уравнений Больцмана, система уравнений Максвелла, гидродинамика, тепловое излучение.

Введение

На сегодняшний день одной из критических проблем вычислительных методов естественных наук является обеспечение масштабируемости численных решений. Классические методы численного моделирования в физике, химии, биологии, геологии, астрономии и пр. основаны, как правило, на решении систем дифференциальных уравнений (в общем случае нелинейных). Этот подход имеет длинный ряд общеизвестных проблем: нерегулярность вычислительного

© А. Б. Терентьев, С. А. Савихин, С. А. Золотов, А. А. Панкратов, А. О. Музыченко, А. А. Носов, 2014

© ООО «Научно-исследовательский центр специальных вычислительных технологий», г. Нижний Новгород, 2014

© Программные системы: теория и приложения, 2014

метода, громоздкие математические выкладки, связанные с описанием граничных условий и неоднородностей среды, зачастую практическая невозможность одновременного описания различных фазовых состояний и/или разнородных физических процессов, вследствие чего все эти методы имеют существенные ограничения по эффективности вычислений на системах, содержащих большое и очень большое количество вычислительных элементов (узлов, процессоров, ядер).

1. Предлагаемый подход

В основе предлагаемого нами подхода к моделированию лежит использование локальных правил для описания глобальных процессов. Локальный подход основан на известной из нелинейной динамики возможности описания поведения системы в целом в виде набора правил поведения её частей, на локальном уровне. В силу локальности правил распараллеливание происходит на уровне математического метода, из чего следует возможность бесконфликтного распределения задач на большое число вычислителей. Начальные и граничные условия, внешние воздействия, константы и неоднородности также представляются в виде конечного набора параметров и их взаимозависимостей. Существует довольно длинный ряд источников локальных правил. Наиболее известным являются уравнение Больцмана и его производные (ЛВМ, ВТЕ) и другие кинетические методы (например, уравнение Власова для плазмы, метод Шан/Чен для многофазных жидкостей и проч.). Другим важнейшим источником является статистическая физика. К форме локальных правил также сводятся явные численные схемы решения традиционных (дифференциальных и алгебраических) уравнений. Продуктивным является и «интуитивный» подход, когда локальные правила формулируются не из строгих математических описаний, а на основе физических закономерностей.

Исходя из описанного выше, нами был разработан программный комплекс для моделирования сложных неоднородных взаимосвязанных процессов CUMPS. Данный продукт позволяет пользователю по написанному им набору локальных правил эффективным образом использовать ресурсы суперкомпьютера. Последнее достигается за счёт разработанного нами алгоритма распределения численной задачи на вычислительные устройства и управления передачей и синхронизацией данных на них.

2. Примеры решённых задач

2.1. Моделирование распространения электромагнитного поля при грозовой активности

Задача заключалась в определении динамики распределения напряженности электрического и магнитного полей, возникающих при молниевом разряде в параллелепипеде размером $300 \times 300 \times 150$ километров за 10 миллисекунд при нулевых граничных условиях в трёх слоях атмосферы с учётом изменения тензора проводимости (в частности, с учётом продольной, холловской и педерсеновской компонент). Источник тока представлялся в виде объединения трёх разномасштабных по пространству и времени действия компонент (непрерывного тока, тока возвратного удара и М-компоненты), а также учитывалось произвольное направления вектора тока.

В основе математической модели указанной задачи было решено применить численное решение системы уравнений Максвелла (закон индукции Фарадея, теорема о циркуляции магнитного поля):

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \vec{H} = \sigma \vec{E} + \vec{j} + \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{cases}$$

при помощи метода конечных разностей во временной области. При помощи указанного метода из представленных уравнений можно получить явную разностную схему для вычисления компонент электрического и магнитного полей.

Анизотропия атмосферы учитывалась за счёт изменения тензора проводимости σ :

- на высоте от 0 до 75 км (атмосфера считается изотропной) данный тензор имеет вид:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_0(\vec{r}) & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0(\vec{r}) & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0(\vec{r}) \end{pmatrix},$$

где $\sigma_0(\vec{r})$ — функция распределения проводимости в изотропной среде.

Таблица 1. Результаты тестирования

Количество устройств	Время шага, с.	Масштабируемость, %
30	47,56	100
60	25,86	91,47
90	17,42	90,03
120	13,02	89,82

- D- и E-слои атмосферы (от 75 км до 150 км)

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_p & \sigma_h \cos \theta & -\sigma_h \sin \theta \\ -\sigma_h \cos \theta & \sigma_p \cos^2 \theta + \sigma_{||} \sin^2 \theta & (\sigma_{||} - \sigma_p) \sin \theta \cos \theta \\ \sigma_h \sin \theta & (\sigma_{||} - \sigma_p) \sin \theta \cos \theta & \sigma_p \sin^2 \theta + \sigma_{||} \cos^2 \theta \end{pmatrix},$$

где $\sigma_p, \sigma_h, \sigma_{||}$ — педерсеновская, холлловская и продольная проводимость соответственно, θ — угол стационарного магнитного поля атмосферы.

Указанная модель запускалась на сетке размером $3000 \times 3000 \times 750$ клеток на суперкомпьютере «Ломоносов». Результаты представлены в таблице 1.

2.2. Моделирование зарождения, развития и распространения лесного пожара

В данной задаче требовалось определить распределение векторного поля скоростей и температуры воздуха при лесном пожаре на местности с возвышенностью. Для этого требовалось дополнительно решить целый комплекс взаимосвязанных задач: моделирование распространения потоков воздуха с учётом влияния температуры, химических процессов, происходящих под влиянием огня, учёт теплового излучения во всех описанных выше процессах, а также влияние ветра, рельефа и состава атмосферы и лесного массива. Таким образом, исходная задача распадается на следующие подзадачи:

- задача гидродинамики: определение плотности, скорости и давления потока воздуха и его температуры;
- задача моделирования теплового излучения.

Особо стоит отметить, что два эти процесса несоизмеримы по времени: если для первого характерная скорость сопоставима со скоростью звука, то для второго — со скоростью света. Для устранения

этой несоразмерности было использовано выравнивание по временным шагам, т.е. одному шагу расчета гидродинамических характеристик соответствует некоторое число шагов расчета теплового излучения.

Расчёт потока осуществляется на основе кинетического уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{v} + \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \cdot \frac{\vec{F}}{m} = \Omega(f),$$

где f — функция распределения частиц, m — масса частиц; \vec{F} — поле сил, действующих на частицы; $\Omega(f)$ — интеграл столкновений, характеризующий скорость изменения функции распределения вследствие столкновений частиц; \vec{x} и \vec{v} — координата и скорость соответственно, t — время.

Численный метод решения данного уравнения (метод решетчатых уравнений Больцмана, Lattice Boltzmann Method) заключается в дискретизации данного уравнения по времени, направлениям скоростей и пространству. Для рассматриваемой задачи указанная дискретизация осуществлялась следующим образом: используется решетка D2Q9 — двухмерная квадратная плоская решетка с 9 направлениями скоростей; вычисляемые макроскопические физические величины: плотность, скорость, количества тепла описываются локальными правилами, т.е. законами изменения плотности рассматриваемых частиц в квадратной области достаточно малой площади по заданному направлению потока в определенный момент времени в зависимости от текущих значений распределений плотности частиц в соседних областях (число которых определено заранее) и в ней самой.

Моделирование теплового излучения осуществляется на основе уравнения переноса излучения (RTE):

$$\hat{s} \cdot \nabla I = -\beta I + \kappa_a I_b + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{4\pi} I p(\omega, \omega') d\omega',$$

где I — интенсивность излучения, s — расстояние в направлении \hat{s} , κ_a — коэффициент поглощения, $I_b = \sigma T^4/\pi$ — интенсивность излучения черного тела, β — коэффициент излучения, σ_s — коэффициент рассеяния, p — фазовая функция рассеяния. Для упрощения модели был рассмотрен случай изотропной среды, т.е. $p(\omega, \omega') = 1$. Задачу моделирования теплового излучения можно свести к численной схеме, аналогичной методу решетчатых уравнений Больцмана.

ТАБЛИЦА 2. Результаты тестирования

Количество устройств	Время шага, с.	Масштабируемость, %
30	30,1	100
60	16,67	90,29
120	8,27	86,26

Указанная модель запускалась на сетке размером 30000×10000 клеток с общим размером данных 251,46 Гбайт на суперкомпьютере «Ломоносов». Результаты представлены в таблице 2.

Об авторах:

Александр Борисович Терентьев

e-mail: ater@ivc.nnov.ru

Степан Александрович Савихин

e-mail: savikhin@ivc.nnov.ru

Сергей Александрович Золотов

e-mail: sergey@ivc.nnov.ru

Антон Александрович Панкратов

e-mail: apankrat@ivc.nnov.ru

Андрей Олегович Музыченко

e-mail: andrew@ivc.nnov.ru

Александр Александрович Носов

e-mail: anosov@ivc.nnov.ru

Образец ссылки на эту публикацию:

А. Б. Терентьев, С. А. Савихин, С. А. Золотов, А. А. Панкратов, А. О. Музыченко, А. А. Носов. *Программный комплекс CUMPS как эффективное средство моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах* // Программные системы: теория и приложения: электрон. научн. журн. 2014. Т. ??, № ?, с. ??-??.

URL:

<http://psta.psiras.ru/read/>

Aleksandr Terent'ev, Stepan Savikhin, Sergey Zolotov, Anton Pankratov, Andrey Musychenko, Aleksandr Nosov. *Software package CUMPS as an effective modeling tool for High Performance Computing.*

ABSTRACT. This paper describes possible methods for the numerical simulation of complex interrelated processes of electrodynamics, fluid dynamics, chemistry, etc. on high-performance computing systems using the developed software CUMPS, which allows to use modern HPC architecture the most complete and efficient (*in Russian*).

Key Words and Phrases: Concurrent computing, Boltzmann equation, lattice Boltzmann method, Maxwell's equations, hydrodynamic, heat radiation.