

Российская академия наук (РАН)
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ГИДРОДИНАМИКИ ИМ. М.А. ЛАВРЕНТЬЕВА СИБИРСКОГО
ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИГиЛ СО РАН)

УДК 532.7+532.516.5+532.593+531.43+539.3

№ госрегистрации: 01201178125

Инв. №

УТВЕРЖДАЮ:

Директор ИГиЛ СО РАН
д-р физ.-мат. наук, проф.



А.А. Васильев

« ___ » 2012 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

Разработка и развитие инновационных методов и алгоритмов моделирования, основанных на применении решеточных методов и методов клеточных автоматов, предназначенных для численного исследования мультифизических систем

по теме:
ОБОБЩЕНИЕ И ОЦЕНКА РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЙ
(итоговый)

Шифр 2011-1.4-514-029-004

Руководитель работ,
д-р физ.-мат. наук:

А.Л. Куперштох

20.07.2012

Новосибирск 2012

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

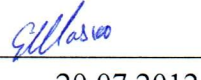
Руководитель работы,
вед. науч. сотр.  А.Л. Куперштох (введение, разделы 1-3, заключ.)
д-р физ.-мат. наук 20.07.2012

Ответственные исполнители:

Зав. лабораторией  А.П. Ершов (раздел 1)
д-р физ.-мат. наук 20.07.2012

Глав. науч. сотр.  В.В. Остапенко (раздел 1)
д-р физ.-мат. наук 20.07.2012


Глав. науч. сотр.  Л.А. Лукьянчиков (раздел 1)
д-р физ.-мат. наук 20.07.2012


Вед. науч. сотр.  Е.В. Шилько (разделы 1-3)
д-р физ.-мат. наук 20.07.2012


Ст. науч. сотр.  Д.А. Медведев (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 20.07.2012

Ст. науч. сотр.  Д.И. Карпов (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 20.07.2012


Ст. науч. сотр.  Э.Р. Прууэл (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 20.07.2012

Науч. сотр.  А.В. Димаки (разделы 1-3)
канд. физ.-мат. наук 20.07.2012

Науч. сотр.  Н.П. Сатонкина (раздел 1, нормоконтроль)
канд. физ.-мат. наук 20.07.2012

Науч. сотр.  А.О. Кашкаров (раздел 1)
20.07.2012

Студент  Т.А. Бондаренко (раздел 1)
20.07.2012

Студент  О.В. Долгушина (раздел 1)
20.07.2012

РЕФЕРАТ

Отчет о научно-исследовательской работе «Обобщение и оценка результатов исследований» по этапу № 3 государственного контракта № 07.514.11.4106 от 26 октября 2011 г. содержит: 42 страниц, 8 рисунков, 0 таблиц, 29 использованных источников.

Ключевые слова: РЕШЕТОЧНЫЕ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КЛЕТОЧНЫЕ АВТОМАТЫ, ГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССОРЫ, ГИБРИДНЫЕ GPU-КЛАСТЕРЫ, УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ, ДЕФОРМАЦИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Объектом исследования НИР являются методы и алгоритмы моделирования, основанные на применении метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов, и алгоритмы распараллеливания расчетов на современных гибридных многоядерных системах для численного исследования таких мультифизических систем, как многокомпонентная гидродинамика, тепломассоперенос, течения с фазовыми переходами жидкость-пар, происходящими согласно заданному уравнению состояния, механические деформации объектов.

Метод решеточных уравнений Больцмана и метод подвижных клеточных автоматов представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества, и основаны на дискретных моделях сплошной среды.

Целями работ, проводившихся на третьем этапе, являлись: обобщение и оценка полученных результатов, разработка рекомендации по использованию результатов проведенных НИР, разработка проекта ТЗ для проведения последующего ОКР, выполнение масштабных расчетов методом решеточных уравнений Больцмана с реализацией на гибридных GPU-кластерах.

В ходе выполнения третьего заключительного этапа Государственного контракта получены следующие результаты:

- 1) Выполнены обобщение и оценка полученных результатов.
- 2) Разработаны рекомендации по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках.

- 3) Разработан проект ТЗ для проведения последующего ОКР.
- 4) Реализованы мероприятия по достижению программных индикаторов и показателей согласно п. 8.2 ТЗ (привлечение молодежи, публикация статей, получение свидетельства о государственной регистрации РИД).
- 5) Разработан заключительный отчет о НИР. Отчет рассмотрен и утвержден на Ученом совете ИГиЛ СО РАН.
- 6) Проведен нормоконтроль Отчета о НИР на соответствие ГОСТ 7.32-2001.
- 7) Разработана отчетная документация в соответствии с требованиями технического задания и актов Заказчика.
- 8) За счет внебюджетного финансирования (собственных средств Института) были выполнены работы по развитию материальной базы рабочих мест (приобретение оргтехники, дооснащение рабочих мест исполнителей контракта, дооснащение компьютеров на рабочих местах программным обеспечением), согласно разделу 3.7 "Развитие материальной базы ..." календарного плана по этапу № 3.

Использование метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов, которые эффективно распараллеливаются на новейших высокопроизводительных графических процессорах, позволило значительно увеличить скорость расчетов, а также в несколько раз сократить электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности.

Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер графических процессоров фирмы NVIDIA и по узлам гибридных GPU-кластеров использованы технологии программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture) и MPI (Message Passing Interface).

Научные результаты работы (разработанные алгоритмы и методы моделирования, экспериментальный образец программных реализаций), полученные на втором этапе НИР, использованы на третьем этапе НИР при разработке проекта Технического задания для проведения последующего ОКР по теме «Разработка программно-аппаратного комплекса, основанного на применении метода решеточных уравнений Больцмана и методов клеточных автоматов и предназначенного для численного исследования мультифизических систем».

Практическая ценность проведенных в рамках контракта работ заключается в создании Экспериментального образца (ЭО) программы для моделирования мультифизических явлений на графических процессорах методами решеточных уравнений Больцмана (LBE) и подвижных клеточных автоматов (МСА). ЭО работает как на компьютерах с операционной системой Windows, так и с операционной системой LINUX.

На данном этапе исследований экономической эффективности результаты НИР иметь не могут. Вместе с тем, Ученый совет ИГиЛ СО РАН, на котором принимался заключительный отчет по третьему этапу работы, отметил перспективность продолжения работ и рекомендовал использовать накопленный опыт в дальнейшей научной работе.

Ожидается, что результаты контракта позволят радикально упростить численные расчеты по сравнению с существующими технологиями и уточнить проектирование сложных технических устройств, эксплуатирующих мультифизические процессы. Ожидаемый социально-экономический эффект использования ожидаемых результатов проекта:

- 1) Повышение производительности труда при проектировании технических систем.
- 2) Снижение материалоемкости инновационных разработок за счет перевода части натурных исследований сложных систем в область вычислительного эксперимента.
- 3) Усиление конкурентных позиций отечественной науки и бизнеса в результате разработки собственного программного обеспечения для параллельных вычислений на современных компьютерах/кластерах, а также развития новых методов моделирования.

Дальнейшее развитие исследований заключается:

- 1) В развитии Экспериментального образца программных реализаций алгоритмов и методов.
- 2) В использовании следующих версий графических процессоров “Kepler” и “Maxwell” вместо графических процессоров “Fermi”, существующих в настоящее время. Первые графические процессоры GTX 680 с технологией “Kepler” выпущены в конце марта 2012 г. и имеют производительность в 3 раза выше чем процессоры

“Fermi”, но обладают меньшей памятью. Ожидается, что полноценные графические процессоры “Kepler” с памятью не менее 4 Гигабайта появятся в России к концу 2012 г.

3) В полном использовании возможностей современных гибридных GPU-кластеров, имеющих огромную производительность. Отметим, что в мировом рейтинге суперкомпьютеров в первой десятке имеются несколько гибридных суперкомпьютеров, основанных на использовании GPU.

СОДЕРЖАНИЕ

РЕФЕРАТ	3
ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	8
ВВЕДЕНИЕ	9
1 Обобщение и оценка полученных результатов	13
1.1 Цикл вычислений для однокомпонентной модели LBE с фазовыми переходами	13
1.2 Параллельные вычисления на графических ускорителях	14
1.3 Параллельные вычисления на GPU-кластерах	16
1.4 Моделирование распада бинарных смесей в сильных электрических полях методом решеточных уравнений Больцмана	18
1.5 Оценка алгоритмов моделирования теплопереноса	24
1.6 Оценка метода подвижных клеточных автоматов для моделирования механических деформаций и разрушения твердых сред	27
2 Разработка рекомендаций по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках	31
3 Разработка проекта ТЗ для проведения последующего ОКР	33
3.1 Назначение программно-аппаратного комплекса...	33
3.2 Требования к программной части комплекса	33
3.3 Требования к аппаратной части комплекса	33
3.4 Требования к функциональным характеристикам комплекса	34
3.5 Дополнительные требования к комплексу	35
4 Развитие материальной базы. Покупка оргтехники и расходных материалов	36
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	38
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	40
Проект Технического задания на ОКР	43

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

Аббревиатура	Расшифровка
НИР	Научно исследовательские работы
ТЗ	Техническое задание
ОКР	Опытно-конструкторские работы
GPU	Графический процессор (Graphics Processing Unit)
РИД	Результаты интеллектуальной деятельности
ИГиЛ СО РАН	Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН
СО РАН	Сибирское отделение Российской академии наук
CUDA	Компьютерная технология распараллеливания (Compute Unified Device Architecture)
MPI	Интерфейс передачи сообщений (Message Passing Interface)
ЭО	Экспериментальный образец программных реализаций методов и алгоритмов
LBE	Решеточное уравнение Больцмана (Lattice Boltzmann Equation)
MCA	Подвижные клеточные автоматы (Movable Cellular Automata)
D3Q19	Трехмерный вариант метода LBE с 19 скоростями
MNUPS	Миллион узлов в секунду (Million Node Updates Per Second)
BGK	Метод Бхатнагара-Гросса-Крука (Bhatnagar-Gross-Krook method)
ИФПМ СО РАН	Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
ПАК	Программно-аппаратный комплекс
CD	Оптический диск (Compact Disk)

ВВЕДЕНИЕ

Настоящий отчет содержит результаты работ, связанных с разработкой теории и основ решеточных методов и методов клеточных автоматов, созданием экспериментального образца (ЭО) программных реализаций, разработкой программы и методики экспериментальных исследований ЭО, разработкой программной документации на ЭО, проведением экспериментальных исследований ЭО. Работами данного направления непосредственно руководит доктор физико-математических наук А. Л. Куперштох.

1 Цель выполнения научно-исследовательских работ (НИР), решаемые задачи

Целью НИР являются разработка и развитие уникальных алгоритмов и методов численного моделирования, основанных на применении новых методов: решеточных уравнений Больцмана и подвижных клеточных автоматов для решения таких сложных мультифизических задач, как моделирование многокомпонентной и многофазной гидродинамики, тепломассопереноса, а также процессов деформации и разрушения. Эти алгоритмы и методы реализованы на новейших высокопроизводительных графических процессорах, что позволило значительно увеличить скорость и точность моделирования, а также в несколько раз сократить электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности.

2 Разработка теории математического моделирования.

2.1 Метод решеточных уравнений Больцмана

Решеточные методы представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества. Метод решеточных уравнений Больцмана LBE (Lattice Boltzmann Equation) представляет собой дискретную модель сплошной среды. При этом метод решеточных уравнений Больцмана более перспективен, чем обычные конечно-разностные методы, так как более адекватен природе вещества. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами вычислительной гидродинамики, а в некоторых областях (многофазные и многокомпонентные течения) он имеет значительные преимущества.

Обоснованием метода LBE можно считать тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена – Энскога из уравнений LBE получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть известные уравнения неразрывности и Навье – Стокса.

Компьютерное моделирование фазовых переходов методом LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз, в том числе и вновь возникающих в объеме вещества. Для описания уравнения состояния, допускающего фазовые переходы, вводятся силы, действующие на вещество в узле со стороны соседних узлов (симуляция притягивающей ветви потенциала межмолекулярного взаимодействия). Эти силы также обеспечивают поверхностное натяжение на границах раздела фаз.

При этом вместо разрыва плотности моделируется тонкий переходной слой жидкость–пар, в котором плотность изменяется плавно на размерах нескольких узлов решетки (аналогично методам сквозного счета ударных волн в газодинамике). При этом заметно упрощается логика компьютерных программ, так как жидкая и газообразная фазы описываются единообразно. Кроме того, отпадает необходимость в сложных граничных условиях на поверхностях раздела фаз.

Авторами проекта был предложен принципиально новый метод учета действия объемных сил в методе LBE. На основании этого предложена модель LBE с учетом фазовых переходов жидкость-пар согласно используемому уравнению состояния. Предложенные алгоритмы обеспечивают описание кривой сосуществования жидкость-пар с высокой точностью.

Предложенные нами алгоритм учета действия объемных сил и реализация метода LBE с фазовыми переходами опережают мировой уровень, что признано зарубежными исследователями [1-6].

2.2 Метод подвижных клеточных автоматов

Сеточные методы, применяемые для описания деформаций материалов при интенсивных динамических воздействиях, отличаются высокой скоростью расчетов и хорошей точностью при расчетах небольших деформаций. Однако возможности применения сеточных методов весьма ограничены, если необходимо моделировать процессы в материалах, сопровождающиеся большими деформациями, в результате

которых возможны образование и рост трещин, разрушение и перемешивание вещества.

Одним из современных методов численного моделирования динамических задач механики деформируемого твердого тела является разработанный в Институте физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск) метод подвижных клеточных автоматов. В частности, этот метод удобен в применении к задачам механики деформируемого твердого тела, в которых разрушение объекта сопровождается образованием большого количества границ и фрагментов.

Метод подвижных клеточных автоматов (movable cellular automata – MCA) возник как синтетический метод, объединяющий возможности метода молекулярной динамики и метода клеточных автоматов.

Объект моделирования представляется в виде ансамбля частиц (автоматов) конечного размера. Частицы могут перемещаться под действием соседей и внешних сил, как это было, например, в методе молекулярной динамики. При этом пространственное перемещение и поворот частицы в методе MCA также описываются уравнениями механики Ньютона-Эйлера.

Пара частиц (автоматов) может быть в двух состояниях – связанном и несвязанном. Связанное состояние означает, что частицы принадлежат одному фрагменту тела, несвязанное – что это части разных фрагментов тела или разные тела. Состояния связей могут переключаться, что определяется некоторой функцией перекрытия двух частиц (автоматов). Частицы (автоматы) испытывают деформации и меняют свой объем вследствие действия нормальных сил со стороны своих соседей. Изменение объема частиц приводит к тому, что помимо парных сил на частицу действуют еще и коллективные объемные силы. Между частицами возникают помимо нормальных еще и касательные к поверхности контакта частиц силы, вызванные трением. Вязкие силы между частицами рассчитываются в ньютоновском приближении. Вязкая сила пропорциональна относительным скоростям двух частиц и обратно пропорционально расстоянию между их центрами с коэффициентом пропорциональности, равным вязкости материалов. Сдвиговые деформации и деформации изгиба рассчитываются для пары частиц в линейном приближении. Деформация сдвига пропорциональна углу поворота пары частиц друг относительно друга, а деформация изгиба – суммарному углу поворота автоматов

относительно линии, соединяющий их центры в начальный момент времени (или в момент, когда частицы оказались в контакте).

Подробно теоретические основы метода МСА описаны в отчете по первому этапу настоящего контракта.

Особенный интерес к этому методу вызывается возможностью моделирования композиционных материалов, сыпучих сред. Еще одним преимуществом метода подвижных клеточных автоматов является возможность его использования совместно с численными методами механики сплошной среды.

Таким образом, метод МСА позволяет достаточно естественным образом описывать перемешивание масс, эффект проникновения, интенсивные деформации, фазовые превращения, накопление повреждений, фрагментацию и трещины, генерацию и развитие повреждений в твердых телах при интенсивных динамических нагрузках.

2.3 Параллельные вычисления на графических процессорах

Графические процессоры на видеокартах – Graphics Processing Unit (GPU) – имеют возможность параллельных вычислений на большом количестве ядер.

Алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле, за исключением переноса частиц и вычисления градиента псевдопотенциала (где учитываются соседние узлы), что позволяет распараллелить вычисления на большое количество ядер современных графических процессоров.

Алгоритм метода МСА распараллеливается таким образом, что характеристики каждого элемента клеточного автомата на каждом шаге по времени обрабатываются одним ядром графического процессора.

1 ОБОБЩЕНИЕ И ОЦЕНКА ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

1.1 Цикл вычислений для однокомпонентной модели LBE с фазовыми переходами

Для компьютерного моделирования эволюции систем с границами раздела фаз жидкость-пар используется метод LBE, который в настоящее время широко применяется для моделирования течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные [7-10]. Метод LBE представляет собой дискретную модель сплошной среды. В отличие от классических методов расчета течений жидкости путем решения уравнений Навье – Стокса метод решеточных уравнений Больцмана рассматривает течение как движение ансамбля псевдо-частиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям \mathbf{c}_k . Обоснованием метода LBE является тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена – Энскога из уравнений LBE получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть уравнения неразрывности и Навье – Стокса.

Для трехмерных расчетов использовался девятнадцатискоростной вариант метода LBE – D3Q19 [11].

Цикл вычислений для однокомпонентной модели LBE с фазовыми переходами организован следующим образом:

1) Перенос значений функций распределения в соседние узлы (используется буферный массив с последующей сменой указателей)

$$\tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t - \Delta t). \quad (1)$$

2) Вычисление плотности ρ и значений функции $\Phi(\rho)$ в каждом узле с использованием уравнения состояния

$$\rho = \sum_{k=0}^b \tilde{N}_k \quad (2)$$

$$\Phi = \sqrt{\rho\theta - P(\rho, T)}. \quad (3)$$

3) Вычисление полной силы, действующей на узел со стороны соседних узлов, используя идею псевдопотенциала $\mathbf{F} = -\nabla U$, впервые предложенную в [12]. В [7-10,13] было предложено ввести новую функцию $\Phi = \sqrt{-U}$, где $U = P(\rho, T) - \rho\theta$. Отсюда имеем выражение для силы в виде

$$\mathbf{F} = A\nabla(\Phi^2) + 2(1 - A)\Phi\nabla\Phi, \quad (4)$$

где свободный параметр A , обеспечивающий достаточно точное воспроизведение

кривой сосуществования фаз для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса, равен -0.152 .

4а) Вычисление значений скорости в узле до и после действия сил

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{k=0}^b \mathbf{c}_k \tilde{N}_k, \quad (5)$$

$$\mathbf{u} + \Delta \mathbf{u} = \mathbf{u} + \mathbf{F} \Delta t / \rho. \quad (6)$$

4б) Вычисление соответствующих равновесных функций распределения по формуле

$$N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right). \quad (7)$$

4в) Изменение функций распределения в узлах за счет оператора столкновений Ω_k и за счет действия сил $\Delta \tilde{N}_k$

$$N_k(\mathbf{x}, t) = \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(\tilde{N}_k(\mathbf{x}, t)) + \Delta \tilde{N}_k, \quad (8)$$

где оператор столкновений имеет вид

$$\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t)) / \tau, \quad (9)$$

а учет действия объемных сил выполняется по методу точной разности [9,14,15]

$$\Delta \tilde{N}_k(\mathbf{x}, t) = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}). \quad (10)$$

В последующих примерах использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса.

1.2 Параллельные вычисления на графических ускорителях

Графические процессоры на видеокартах – Graphics Processing Unit (GPU) – дают возможность выполнять параллельные вычисления на большом количестве ядер. Параллельные расчеты выполнялись на графических модулях фирмы NVIDIA с архитектурой “Fermi”, имеющих 512 потоковых процессоров (ядер). Все ядра имеют доступ к относительно быстрой общей внутренней памяти объемом 3 Гб для GTX-580 и 6 Гб для Tesla M2090. Алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле расчетной сетки, за исключением переноса частиц и сил взаимодействия между узлами, что позволяет его распараллелить на большое количество ядер с использованием технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture). При этом ускорение расчетов при использовании одного модуля

GTX-580 для трехмерного однокомпонентного варианта метода LBE с фазовыми переходами достигало 70–90 раз [10] при вычислениях с двойной точностью по сравнению с одним ядром процессора Intel Core 2 Duo с частотой 3.3 ГГц.

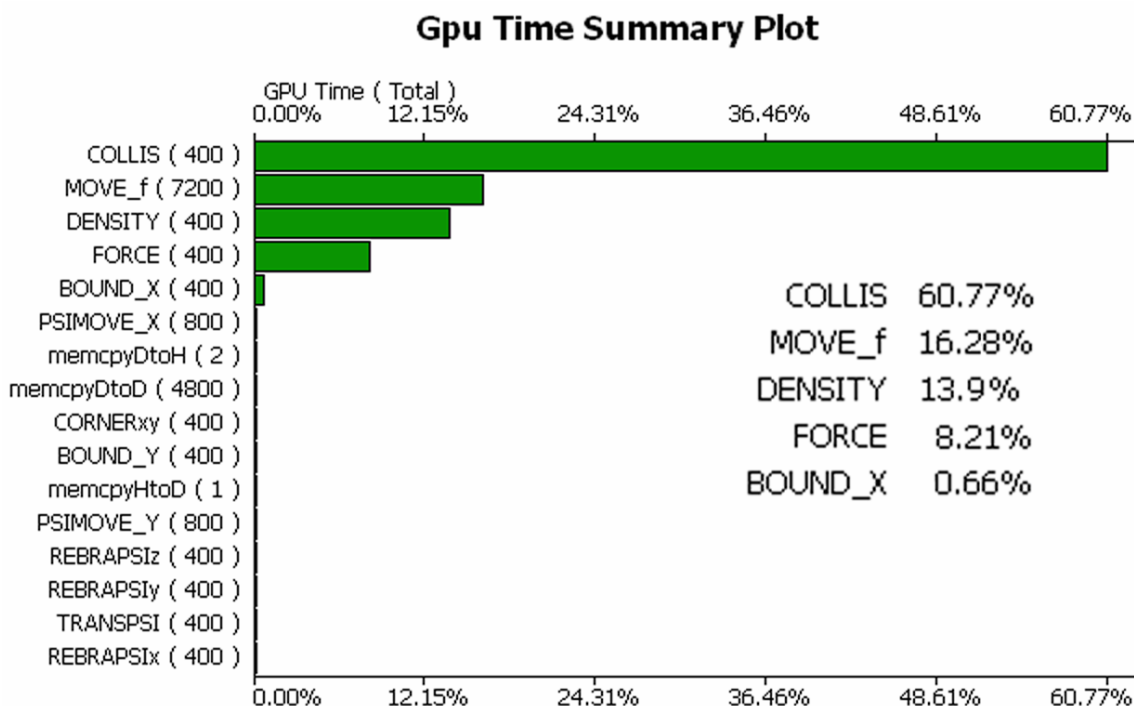


Рис. 1. Относительное время выполнения ядерных функций, усредненное за 400 шагов по времени. Расчет на GTX-580 на сетке $256 \times 256 \times 192$.

Четыре ядерные функции, соответствующие 4 этапам цикла вычислений, были названы MOVE_f, DENSITY, FORCE и COLLIS. Относительное время выполнения ядерных функций в цикле вычислений для трехмерной модели D2Q19 показано на гистограмме, выдаваемой стандартным профайлером пакета CUDA 4.0 (рис. 1). Основное время занимают: вычисления оператора столкновений, вычисление скорости и равновесных функций распределения (COLLIS), перенос значений функций распределения в соседние узлы (MOVE_f), вычисление плотности и функций $\Phi(\rho)$ в каждом узле (DENSITY), вычисление сил (FORCE) и периодические граничные условия по x (BOUND_X). Остальные затраты времени, связанные с граничными условиями и передачей данных между GPU и CPU, занимают менее 1 % времени вычислений. Использование алгоритма со сменой указателей при переносе значений функций распределения в соседние узлы через один буферный массив почти в два раза уменьшило затрачиваемое на это время по сравнению с более ранним алгоритмом [10].

1.3 Параллельные вычисления на GPU-кластерах

Для тестирования трехмерных расчетов использовалась задача о спиноподальной декомпозиции (распад первоначально однородного флюида, состояние которого находится под спиноподалью, на двухфазную систему жидкость-пар). На рис. 2б показан пример расчета спиноподальной декомпозиции в трехмерной области размерами $512 \times 512 \times 960$ (всего более 250 миллионов узлов расчетной сетки). Время расчета 30 минут. По всем трем координатам x , y и z использованы периодические граничные условия. В определенном диапазоне начальных плотностей флюида после некоторого промежутка времени происходит распад на жидкую и газовую фазы. Жидкая фаза образует проницаемую пористую среду. Со временем мелкомасштабные структуры укрупняются [10].

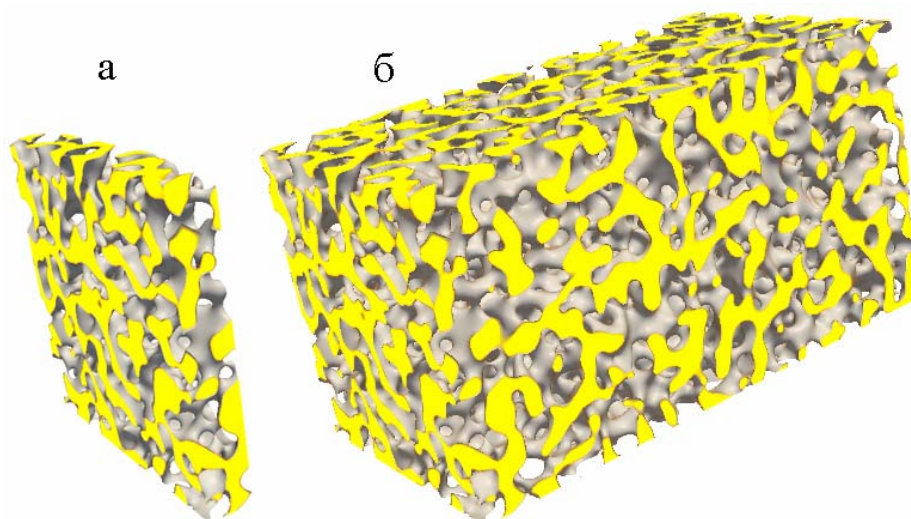


Рис. 2. Расчет спиноподальной декомпозиции на 12 GPU. Паровая фаза показана прозрачной. $\tilde{T} = 0.7$, $\tilde{\rho}_0 = 1.0$, $t = 2000$. Сетка $512 \times 512 \times 960$.

Расчеты проводились на 12 GPU (Tesla-M2090, каждый позволяет использовать до 5.3 Гб внутренней памяти с контролем четности) на кластере Новосибирского государственного исследовательского университета “SL390s-G7” с операционной системой “Linux Enterprise server 11”. На каждом GPU рассчитывалась область размером $512 \times 512 \times 80$ (рис. 2а). Граничные условия по координате z , соответствующие граням размером 512×512 , передавались между узлами кластера по протоколу MPI (Message Passing Interface).

На рис. 3 показана производительность вычислений в миллионах узлов сетки в

секунду (Million Node Updates Per Second, MNUPS) для трехмерного однокомпонентного варианта метода LBE – D3Q19 с фазовыми переходами.

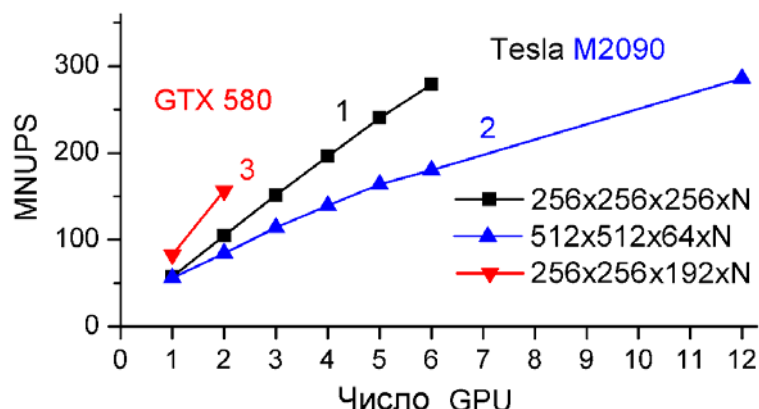


Рис. 3. Производительность расчетов для трехмерного варианта метода LBE – D3Q19.

Данные 1–2 получены нами на кластере Новосибирского государственного исследовательского университета “SL390s-G7” с использованием протокола MPI. В этих расчетах на каждом вычислительном узле использовался 1 модуль Tesla M2090. Данные 3 получены нами на станции, имеющей 2 модуля GTX 580 с 3 Гб внутренней памяти каждый. Расчеты проведены при вычислениях с двойной точностью. Видно, что производительность сильно зависит не только от типа используемых GPU, но и от способа передачи данных между GPU.

На рис. 4 показано время вычисления одного шага цикла, нормированное на число узлов расчетной сетки, размещаемых в одном GPU, для однокомпонентной модели с фазовыми переходами. Оно включает время, затрачиваемое на передачу значений функций на границах между узлами кластера с использованием протокола MPI. При расчетах на одном узле кластера граничные условия по z передавались с помощью функции CUDA – “cudaMemcpyPeer()” без использования MPI. При увеличении в 4 раза объема информации, передаваемой по MPI (256×256 для кривой 1 и 512×512 для кривой 2), время на передачу увеличивается почти во столько же раз при том же объеме вычислений ($256 \times 256 \times 256 = 512 \times 512 \times 64$).

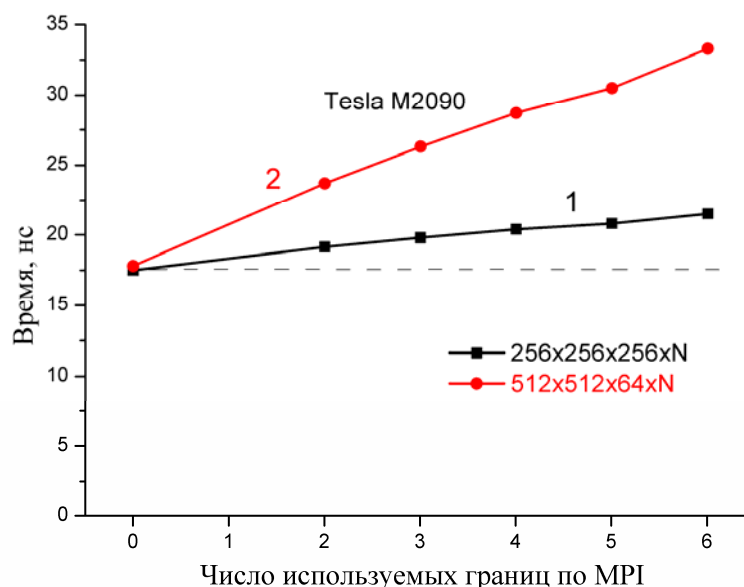


Рис. 4. Время вычислений одного шага цикла, нормированное на количество узлов расчетной сетки, размещенных в одном GPU.

Производительность программы сильно зависит от выбора размеров блоков в технологии CUDA [10], а также от использования новых возможностей графических процессоров “Fermi” (например, передача данных в рамках одного устройства посредством функции “cudaMemcpyPeer()”, использование разделяемой памяти мультипроцессоров в качестве кэш-памяти, организация обращений к глобальной памяти устройства с максимальной коалесценцией и т.п.). Заметим, что при прочих равных условиях производительность графических карт GTX 580 заметно выше, чем для Tesla M2090.

1.4 Моделирование распада бинарных смесей в сильных электрических полях методом решеточных уравнений Больцмана

В общем случае объемная сила, действующая на диэлектрическую не содержащую свободных зарядов жидкость в электрическом поле, выражается формулой Гельмгольца [16]

$$\mathbf{F} = -\frac{E^2}{8\pi} \nabla \varepsilon + \frac{1}{8\pi} \nabla \left[E^2 \rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right)_T \right]. \quad (11)$$

Первое и второе слагаемые описывают действие электрического поля на поляризационные заряды в неоднородном диэлектрике и электрострикционные силы, соответственно.

В наших работах [17,18] теоретически и в двухмерных компьютерных экспериментах было обнаружено и исследовано новое ранее неизвестное явление – неустойчивость жидких диэлектриков в экстремальных электрических полях под действием сил электрострикции и последующий анизотропный распад на двухфазную систему нитевидных паровых каналов в жидкости, параллельных локальному вектору электрического поля. Такой распад для жидких диэлектриков с нелинейной зависимостью диэлектрической проницаемости от плотности $\varepsilon(\rho)$ происходит в первоначально однородном электрическом поле $E_z = E_0$ из-за сил электрострикции

$$F_x = \frac{E_0^2 \rho}{8\pi} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \rho^2} \right)_T \frac{\partial \rho}{\partial x}, \quad F_y = \frac{E_0^2 \rho}{8\pi} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial \rho^2} \right)_T \frac{\partial \rho}{\partial y}, \quad (12)$$

направленных перпендикулярно электрическому полю в сторону увеличения плотности, что может приводить к неустойчивости.

В данной работе проведено трехмерное моделирование этого эффекта [19]. Для этого разработан трехмерный вариант метода LBE для многокомпонентных сред, находящихся в электрическом поле, с возможностью фазового перехода жидкость-пар и с учетом зависимости взаимной растворимости компонентов от давления. Расчет электрического поля выполнялся с учетом изменения диэлектрической проницаемости бинарной среды во времени и в пространстве согласно уравнению для потенциала электрического поля

$$\text{div}(\varepsilon \text{grad}\varphi) = 0. \quad (13)$$

Для расчетной области в форме параллелепипеда размерами L_x, L_y, L_z использовались периодические граничные условия по x и по y : $\varphi(0, y, z) = \varphi(L_x, y, z)$ и $\varphi(x, 0, z) = \varphi(x, L_y, z)$. Значения потенциала на других гранях расчетной области задавались в виде $\varphi(x, y, 0) = 0$ и $\varphi(x, y, L_z) = V$. При этом электрическое поле первоначально является однородным $E_z = E_0 = V / L_z$. На каждом шаге по времени уравнение (13) решалось методом простых итераций. Начальные значения потенциала брались с предыдущего шага по времени, что является хорошим приближением, так как плотность ρ а, следовательно, и ε слабо меняются за один шаг по времени.

Использовалась нелинейная зависимость диэлектрической проницаемости диэлектрика от плотности, характерная для неполярных жидких диэлектриков:

$$\varepsilon(\rho) = 1 + \frac{3\alpha\rho}{1 - \alpha\rho}. \quad (14)$$

Уравнения эволюции для функций распределения каждого из компонентов s и σ имеют вид

$$N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x}, t) + \Omega_k^{s,\sigma} + \Delta N_k^{s,\sigma} \quad (15)$$

где $\Omega_k^{s,\sigma} = (N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, \mathbf{u}^{s,\sigma}) - N_k^{s,\sigma}(\mathbf{x}, t)) / \tau$ – оператор столкновений в виде релаксации к равновесному состоянию, а

$$\Delta N_k^{s,\sigma} = N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, \mathbf{u}^{s,\sigma} + \Delta \mathbf{u}^{s,\sigma}) - N_k^{eq}(\rho^{s,\sigma}, \mathbf{u}^{s,\sigma}) \quad (16)$$

– изменения функций распределения за счет действия объемных сил, в том числе и обеспечивающих фазовые переходы [7-10].

Здесь $\rho^s = \sum_k N_k^s$ и $\rho^\sigma = \sum_k N_k^\sigma$ – плотности вещества компонентов смеси, а

$\mathbf{u}^s = \sum_k N_k^s \mathbf{c}_k / \rho^s$ и $\mathbf{u}^\sigma = \sum_k N_k^\sigma \mathbf{c}_k / \rho^\sigma$ – скорости компонентов в данном узле.

Ограниченная взаимная растворимость газа в жидкости моделировалась силами отталкивания, действующими в узле i на вещество каждого компонента со стороны вещества другого компонента, присутствующего в соседних узлах k . Суммарные силы, действующие на вещество компонентов в узле за счет этих сил отталкивания, имеют вид

$$\mathbf{F}^s(\mathbf{x}) = \psi[\rho^s(\mathbf{x})] \sum_k B_k \psi[\rho^\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)] \mathbf{e}_k, \quad (17)$$

$$\mathbf{F}^\sigma(\mathbf{x}) = \psi[\rho^\sigma(\mathbf{x})] \sum_k B_k \psi[\rho^s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)] \mathbf{e}_k. \quad (18)$$

Все коэффициенты B_k выражаются через один параметр взаимодействия компонентов $B < 0$, определяющий степень малости взаимной растворимости компонент. Здесь $\psi(\rho)$ – возрастающая функция от плотности соответствующего компонента, вид которой определяет зависимость растворимости от давления.

Для жидкого диэлектрика использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса. Для растворенного газа использовалось обычное газовое уравнение состояния $\tilde{P} = \tilde{\rho}\tilde{T}$.

Для трехмерных расчетов полной задачи (бинарная смесь с фазовым переходом и расчет потенциала электрического поля) на одном GPU типа GTX-580 удается использовать сетки размерами до $160 \times 160 \times 256$. Расчет потенциала электрического поля в соответствии с уравнением (13) при использовании итерационного метода тоже легко распараллеливается на GPU.

На рис. 5 показаны результаты трехмерного моделирования распада первоначально однородной бинарной смеси “жидкий диэлектрик – растворенный газ” на компоненты под действием сильного электрического поля. Начальное состояние флюида соответствует состоянию жидкости на кривой насыщения при данной температуре. При любом случайном локальном возмущении пониженной плотности давление в этом месте уменьшается. При этом растворимость газа в жидком диэлектрике тоже уменьшалась, и происходило выделение газа, за счет чего еще более возрастал градиент плотности. Поэтому процесс выделения газа в виде парогазовых каналов, ориентированных преимущественно вдоль электрического поля, носил взрывной характер.

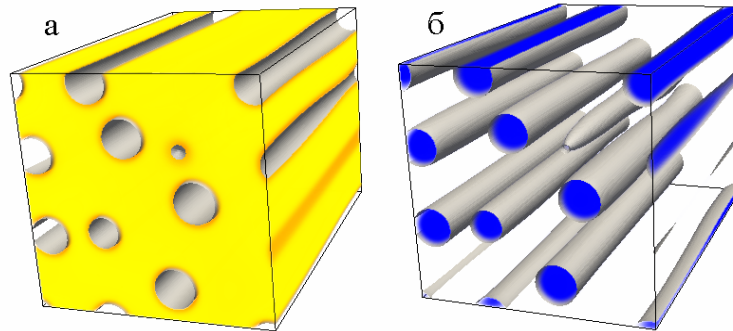


Рис. 5. Распад бинарной смеси в трехмерном электрическом поле. (а) – жидкий диэлектрик, (б) – газополости. $\tilde{T} = 0.9$, $\tilde{\rho}_0 = 1.66$, $\tilde{A} = E_0^2 / (8\pi P_{кр}) = 30$, $q = 0.02$, $t = 6000$. Сетка $160 \times 160 \times 256$.

Парогазовые каналы расширяются как за счет диффузии растворенного газа из жидкости и испарения жидкого вещества внутрь каналов, так и за счет коалесценции каналов друг с другом.

Из экспериментальных работ по пробою жидких диэлектриков известно, что чем больше электрическое поле, тем больше каналов стримеров образуются в том же объеме диэлектрика. Этот эффект хорошо моделируется и в наших расчетах (рис. 6). На первой стадии парогазовые каналы имеют форму, близкую к цилиндрической. Иногда наблюдается разветвление каналов.

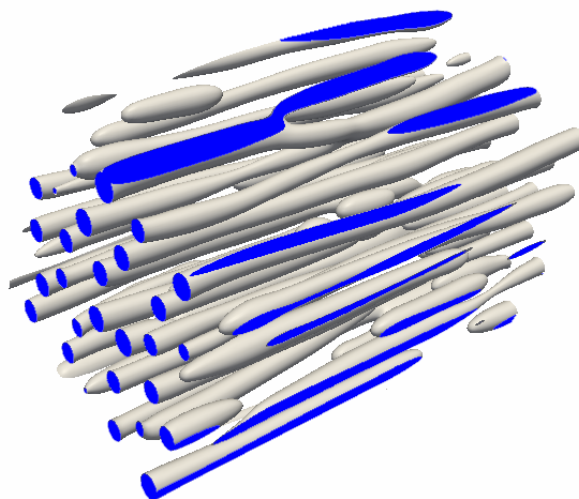


Рис. 6. Распад бинарной смеси в трехмерном электрическом поле. Показаны образовавшиеся парогазовые полости. $\tilde{T} = 0.9$, $\tilde{\rho}_0 = 1.66$, $\tilde{A} = 60$, $q = 0.02$, $t = 1800$. Сетка $192 \times 192 \times 352$.

На рис. 7 показана зависимость безразмерной величины квадрата критической напряженности электрического поля, которая необходима для анизотропного распада бинарной системы жидкий диэлектрик – растворенный газ на компоненты, от начальной концентрации растворенного газа q при разных температурах. Начальные состояния бинарной смеси при каждой температуре соответствуют состояниям жидкости на кривой насыщения: $\tilde{\rho}_0 = 2.14$ при $\tilde{T} = 0.7$, $\tilde{\rho}_0 = 1.93$ при $\tilde{T} = 0.8$, $\tilde{\rho}_0 = 1.66$ при $\tilde{T} = 0.9$. Критическая напряженность однородного электрического поля значительно уменьшается при увеличении начальной концентрации растворенного газа примерно линейно для модели $\psi(\rho) = \rho$. Кроме того, чем ближе состояние смеси к критической точке, тем меньше электрическое поле, необходимое для разделения бинарной смеси на компоненты.

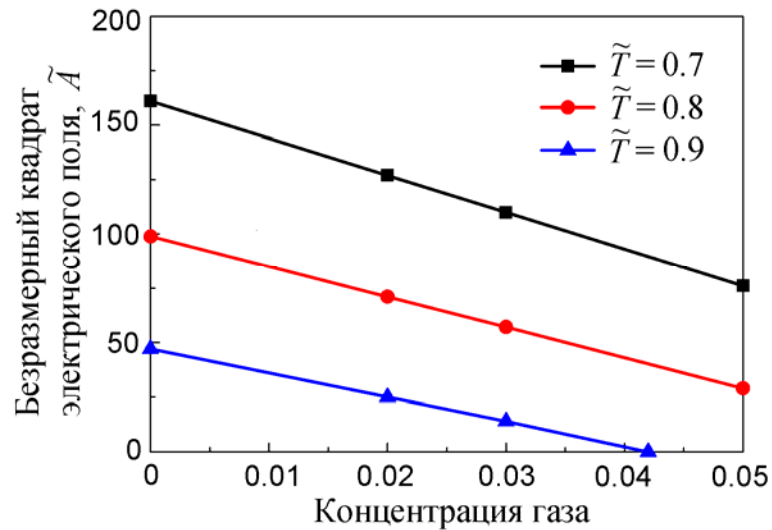


Рис. 7. Зависимость безразмерной величины квадрата критического электрического поля от начальной концентрации растворенного газа q . Параметр взаимодействия компонентов $B = -0.02$.

Таким образом, при учете влияния растворенных газов значения электрических полей, при которых возможен механизм развития и роста каналов стримеров в жидких диэлектриках путем анизотропного распада, значительно уменьшаются по сравнению с гомогенными диэлектриками.

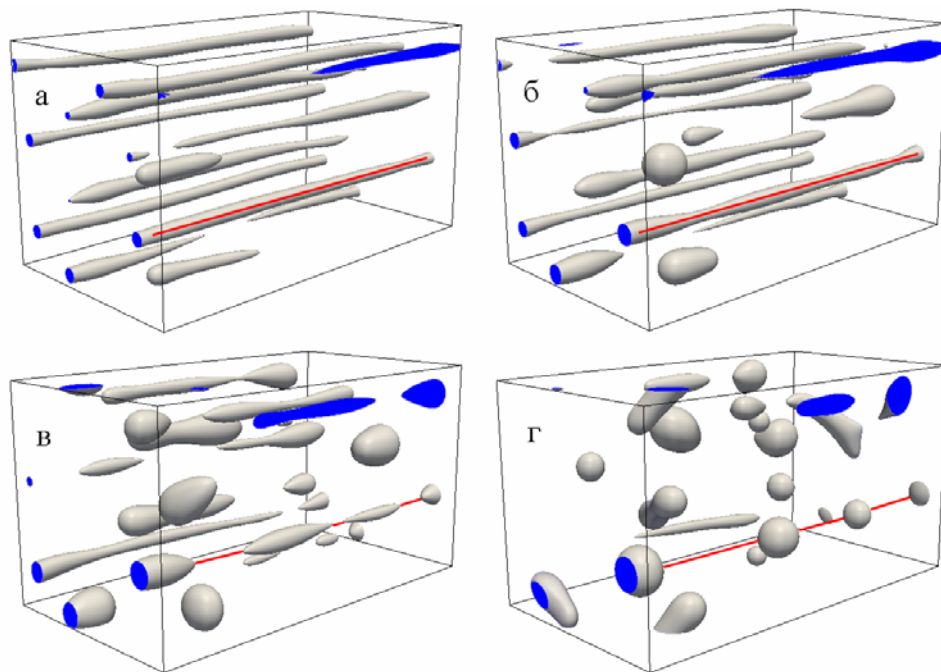


Рис.8 Распад парогазовых каналов после выключения поля. Показаны парогазовые полости. $\tilde{T} = 0.9$, $\tilde{\rho}_0 = 1.66$, $\tilde{A} = 30$, $q = 0.02$, Сетка $192 \times 192 \times 352$. $t = 5600$ (а); 6600 (б); 7600 (в); 9000 (г).

После выключения электрического поля эти каналы распадаются на систему парогазовых пузырьков (рис. 8).

Использование гибридных GPU-кластеров позволило выйти на принципиально новый уровень моделирования мультифизических задач. Показано, что критическая напряженность однородного электрического поля значительно уменьшается при увеличении концентрации растворенного газа. Это указывает на то, что в наносекундном диапазоне пробоя реальных жидких диэлектриков возможен механизм зарождения, роста и ветвления каналов стримеров путем анизотропного (электрострикционного) распада жидкого диэлектрика.

1.5 Оценка алгоритмов моделирования теплопереноса в подвижной среде

Для правильного моделирования течений с переменной температурой необходимо корректно описать перенос внутренней энергии за счет конвекции и диффузии.

В процессе создания программного продукта были протестированы все описанные ниже численные схемы. По результатам тестирования для расчета тепломассопереноса была выбрана и реализована схема, использующая дополнительные функции распределения решеточного уравнения Больцмана (раздел 1.5.1), поскольку только она обеспечивает полную изотропность при переносе. Кроме того, одновременно вычисляются конвективный перенос и диффузия, что уменьшает число необходимых расчетов.

Также представляется перспективной дальнейшая доработка схемы «Кабаре» (п. 1.5.3), чтобы устранить имеющуюся неизотропность. В этом случае эффекты паразитной диффузии энергии будут меньше.

Уравнение для переноса тепла выглядит следующим образом

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e\mathbf{U}) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \frac{P}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\eta}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \right)^2. \quad (19)$$

Здесь \mathbf{U} – скорость течения, e – внутренняя энергия вещества, которая связана с его температурой. В простейшем случае $e = \rho C T$, где ρ – плотность вещества, а C – его теплоемкость. Первое слагаемое в правой части соответствует теплопроводности (коэффициент теплопроводности κ), второе – работе сил давления и третье – нагреванию за счет вязкого трения (коэффициент вязкости η).

Нагревание за счет трения обычно мало, и им можно пренебречь. В случае небольших изменений плотности (в однофазных течениях) возможно также пренебречь работой сил давления.

При численном решении уравнения (19) в случае переменной плотности необходимо минимизировать паразитную диффузию внутренней энергии, поскольку она приводит к возникновению нефизической разности температур в соседних областях разной плотности. При небольших изменениях плотности этот эффект также выражен слабо.

Далее описаны численные схемы для решения уравнения (19), проанализированные в ходе выполнения работ по Госконтракту. Более подробное описание схем приведено в отчете по первому этапу настоящего Госконтракта.

1.5.1 Схема, использующая дополнительные функции распределения решеточного уравнения Больцмана

В рамках решеточного уравнения Больцмана возможно моделировать перенос “пассивной” примеси с помощью введения дополнительного набора функций распределения f_k так, что плотность внутренней энергии в данном узле равна

$e(\mathbf{x}, t) = \sum_k f_k(\mathbf{x}, t)$. Уравнение эволюции для f_k имеет вид

$$f_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = f_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k, \quad (20)$$

где Ω_k – оператор столкновений, который часто записывается в BGK-виде

$$\Omega_k = \frac{f_k^{eq}(e, \mathbf{U}) - f_k}{\tau_c}. \quad (21)$$

Равновесные функции распределения f_k^{eq} зависят от плотности внутренней энергии e и скорости основного течения \mathbf{U} . В случае действия объемных сил (например, в многофазных течениях) эта скорость определяется как

$$\rho \mathbf{U} = \sum_k N_k \mathbf{c}_k + \mathbf{F} \Delta t / 2. \quad (22)$$

Здесь N_k – основные функции распределения метода LBE, \mathbf{F} – полная сила, действующая на вещество в узле. Время релаксации τ_c задает коэффициент

диффузии $D = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t} \left(\tau_c - \frac{1}{2} \right)$. Достоинством схемы является сохранение изотропии, поскольку коэффициент не зависит от скорости течения. Основной недостаток – невозможность сделать коэффициент диффузии очень малым из-за возникновения в таких случаях численных осцилляций в областях резких градиентов температуры или плотности. Также к недостаткам схемы можно отнести достаточно большое количество оперативной памяти, необходимое для хранения функций распределения.

Возможно также разделить полный шаг переноса на подшаги, описывающие конвективный перенос и диффузию (расщепление по физическим процессам). На каждом из подшагов решается соответствующее уравнение при помощи явной численной схемы. Использование неявных схем нецелесообразно, поскольку они слабо приспособлены для массивного распараллеливания на графических вычислительных устройствах. Кроме того, в моделируемых процессах коэффициент диффузии обычно достаточно мал, поэтому проблемы устойчивости не возникают.

Для подшага конвективного переноса возможно использовать различные разностные схемы, описанные ниже.

1.5.2 Схема Лакса–Вендроффа

Схема является двухшаговой. Вначале вычисляются значения концентраций и скоростей на промежуточном временном слое $n + 1/2$. Эти значения затем используются для вычисления потоков при переносе переменных на слой $n + 1$. Схема имеет второй порядок точности по пространству, следовательно, схемная диффузия отсутствует. Существует, однако, дисперсия, которая приводит к искажению формы движущегося профиля концентрации, а также к появлению численных осцилляций в областях больших градиентов.

1.5.3 Схема «Кабаре»

Для расчета используются два набора переменных: потоковые и консервативные. Вначале консервативные переменные переносятся на промежуточный временной слой $n + 1/2$. Далее потоковые переменные переносятся

с помощью интерполяции. Завершающий шаг схемы состоит в коррекции потоковых переменных.

Однако, в рамках работы по контракту была обнаружена немонотонность двухслойной по времени схемы «Кабаре», которая применялась ранее в работах [20,21] при моделировании сложных газодинамических и гидравлических течений. Вместе с тем, возникающие на начальной стадии схемные осцилляции подавлялись за несколько временных шагов, и исходная монотонность разностного решения восстанавливалась. Наблюдающаяся немонотонность в значительной мере связана с тем, что схема «Кабаре», в силу применяемой коррекции потоков, имеет лишь первый порядок сходимости в областях локальных экстремумов и поэтому их сильно подавляет, что следует отнести к ее недостаткам, которые требуют исправления.

Предложена модификация двухслойного по времени варианта схемы «Кабаре», основанная на двойной коррекции потоковых переменных [22], которая в случае переменного шага по времени гарантирует монотонность этой схемы при любых числах Куранта, при которых она является устойчивой. Тем самым новая монотонная модификация схемы «Кабаре», безусловно, является предпочтительней, тем более, что она сохраняет все достоинства исходной схемы, в частности компактность шаблона и диффузионно-дисперсионные свойства на гладких решениях.

Недостатком схем этого класса является искажение формы в пространстве при переносе профиля концентрации (заметная неизотропность разностной схемы).

1.6 Оценка метода подвижных клеточных автоматов для моделирования механических деформаций и разрушения твердых сред

Применение сеточных методов ограничено моделированием процессов в материалах, сопровождающихся малыми деформациями. Для описания образования и роста трещин, разрушения и перемешивания вещества использован метод подвижных клеточных автоматов, разработанный в ИФПМ СО РАН (г. Томск). Теоретические основы метода подробно описаны в отчете по первому этапу настоящего Госконтракта.

Клеточные автоматы описывают поступательные движение круглых частиц радиуса R и вращательные движения этих частиц с моментом инерции J .

Пара автоматов может находиться в двух состояниях.

- 1) В связанном состоянии между частицами действуют парные и объемные силы.
- 2) Несвязанное состояние соседних автоматов означает разрыв сплошности среды в этом месте.

Парные силы описывают упругие деформации, например, согласно закону Гука. Объемная сила необходима для учета поперечных деформаций при продольных растяжениях/сжатиях. К парным силам относятся также касательные к поверхности частиц вязкие силы и силы, возникающие в результате деформации сдвига. Вязкие силы пропорциональны разности скоростей поверхностей автоматов, контактирующих между собой. Сдвиговые деформации и деформации изгиба рассчитываются для пары частиц в линейном приближении и определяются углами поворота автоматов относительно линии, соединяющей их центры в начальный момент времени (или в момент, когда частицы оказались в контакте).

Анализ метода МСА и его сравнение с классическими методами механики деформируемого твердого тела позволил выделить следующие его преимущества:

- 1) МСА позволяет эффективно моделировать не только малые деформации твердых тел, а также и большие деформации, которые могут сопровождаться разрушением материала.

- 2) МСА позволяет моделировать также процесс образования трещин, и процесс их «залечивания», что делает данный метод уникальным.

- 3) Метод достаточно легко масштабируется на конструкции разных размеров, что делает его весьма перспективным в применении к инженерным расчетам.

- 4) Расчеты по методу МСА возможно сопрягать с расчетами конечно-разностными методами механики сплошной среды, в том числе с методом ЛВЕ. Эта гибкость метода может быть использована при моделировании гидродинамических течений в хрупких средах.

- 5) Метод легко реализуется на вычислительных машинах. По простоте реализации он сопоставим с методами молекулярной динамики.

Метод подвижных клеточных автоматов был распараллелен для расчетов на GPU. Для этих целей разработан и реализован оригинальный алгоритм расчета связанных состояний между парами частиц (автоматов) на GPU. Реализован также оригинальный алгоритм параллельного расчета сил, вызванных деформациями

сдвига и изгиба. Выполнены расчеты нескольких тестовых задач, описанных в отчете по второму этапу настоящего контракта. Проведено успешное тестирование модуля расчета деформаций по методу МСА. Параллельный алгоритм позволил достигнуть роста производительности вычислений в 30-40 раз по сравнению с расчетами на современных центральных процессор (CPU).

Таким образом, показана перспективность использования параллельного алгоритма МСА, реализованного на GPU, для моделирования механических деформаций и разрушения твердых сред.

Выводы по главе 1

Выполнены обобщение и оценка полученных результатов. Разработана теория математического моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики, тепломассопереноса, фазовых переходов жидкость-пар и механических деформаций на основе методов решеточного уравнения Больцмана и подвижных клеточных автоматов. Исследованы изотропность, точность аппроксимации и устойчивость различных схем, выработаны рекомендации по их использованию для решения поставленных задач. Показано, что рассмотренные методы допускают эффективное распараллеливание на вычислительные ядра GPU. Реализовано распараллеливание алгоритмов на нескольких GPU, а также на гибридных GPU-кластерах.

Впервые GPU были использованы для моделирования методом LBE в работе [23]. Однако до настоящего времени параллельные вычисления на одной или нескольких видеокартах применялись только для простых вариантов метода LBE без фазовых переходов [24-28].

Предложенные нами алгоритм учета действия объемных сил и реализация метода LBE с фазовыми переходами опережают мировой уровень, что признано зарубежными исследователями [1-6].

Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер современных графических процессоров использовалась технология программирования CUDA [29]. На сегодняшний день продажи графических процессоров, поддерживающих CUDA, достигли 128 миллионов. Технология используется для создания программного обеспечения в различных областях: обработка видео, астрофизика, вычислительная биология и химия, моделирование динамики жидкостей,

электромагнитных взаимодействий, восстановление изображений, полученных путем компьютерной томографии, сейсмический анализ, трассировку луча и многих других. Одним из самых перспективных направлений развития инженерных физических расчетов является использование кластеров на базе GPU (http://www.nvidia.ru/object/io_1241767854048.html).

Таким образом, в результате выполнения третьего этапа Государственного контракта проведены следующие работы:

- 1) Проведена оценка алгоритма параллельных вычислений на GPU для однокомпонентной модели LBE с фазовыми переходами жидкость-пар.
- 2) Проведена оценка параллельных вычислений на GPU-кластерах.
- 3) Показана возможность использования алгоритмов LBE для моделирования гидродинамики многокомпонентной среды типа жидкий диэлектрик – растворенный газ. Выполнено моделирование распада бинарных смесей в сильных электрических полях методом решеточных уравнений Больцмана.
- 4) Проведена сравнительная оценка алгоритмов моделирования теплопереноса.
- 5) Проведена оценка метода подвижных клеточных автоматов для моделирования механических деформаций и разрушения твердых сред, реализован параллельный алгоритм расчетов по методу MCA для GPU.

2 РАЗРАБОТКА РЕКОМЕНДАЦИЙ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОВЕДЕННЫХ НИР В РЕАЛЬНОМ СЕКТОРЕ ЭКОНОМИКИ, А ТАКЖЕ В ДАЛЬНЕЙШИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ И РАЗРАБОТКАХ

Разработанное программное обеспечение для сложных инженерных мультифизических расчетов при исследовании сложных физических систем может применяться в энергетике, машиностроении, авиастроении, при моделировании многокомпонентной термо- и гидродинамики (в том числе в присутствии электрического поля), при решении прочностных и деформационных проблем. Результаты проекта могут быть использованы для проведения опытно-конструкторских работ, направленных на создание инновационной технологии и программного обеспечения для осуществления сложных инженерных мультифизических расчетов.

Результаты проекта могут использоваться в реальном секторе экономики для:

1. Повышения производительности труда при проектировании технических систем.
2. Снижения материалоемкости инновационных разработок за счет перевода части натуральных исследований сложных систем в область вычислительного эксперимента.
3. Усиления конкурентных позиций отечественной науки и бизнеса в результате разработки собственного программного обеспечения для параллельных вычислений на современных компьютерах/кластерах, а также развития новых методов моделирования.

Результаты проведенных НИР могут использоваться при дальнейших исследованиях и развитии методов LBE и MSA для моделирования мультифизических явлений. Преимущества этих методов вытекают из их адекватности природе вещества. Важным преимуществом следует признать и удобство реализации вычислений с помощью этих методов на компьютерах с параллельной архитектурой (GPU).

Результаты проекта могут быть использованы при дальнейших разработках программных комплексов, выполняющих вычисления на графических процессорах (GPU). Реализованные алгоритмы распараллеливания расчетов обеспечивают

радикальное увеличение скорости моделирования, а также в несколько раз сокращают электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности (менее 1 Ватта на Гигафлоп).

На сегодняшний день продажи графических процессоров, поддерживающих CUDA, достигли 128 миллионов. Технология используется для создания программного обеспечения в различных областях: обработка видео, астрофизика, вычислительная биология и химия, моделирование динамики жидкостей, электромагнитных взаимодействий, восстановление изображений, полученных путем компьютерной томографии, сейсмический анализ, трассировку луча и многих других. Одним из самых перспективных направлений развития инженерных физических расчетов является использование кластеров на базе GPU (http://www.nvidia.ru/object/io_1241767854048.html).

Выводы по главе 2

Таким образом, методы моделирования мультифизических задач, реализованные в настоящем контракте, могут быть использованы при проведении ОКР, а также в научных исследованиях. Реализованные алгоритмы распараллеливания расчетов на GPU обеспечивают радикальное увеличение скорости и точности моделирования, а также в несколько раз сокращают электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности (менее 1 Ватта на Гигафлопс).

3 РАЗРАБОТКА ПРОЕКТА ТЗ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПОСЛЕДУЮЩЕГО ОКР

3.1 Назначение программно-аппаратного комплекса

Разрабатываемый программно-аппаратный комплекс (ПАК), включающий в себя модули газодинамических расчетов, расчета фазовых переходов методами решеточного уравнения Больцмана (LBE), расчета тепломассопереноса, расчета деформаций и хрупких разрушений методом подвижных клеточных автоматов (МСА), а также станцию для массивных параллельных вычислений с несколькими графическими вычислительными устройствами, предназначен для инженерных расчетов мультифизических систем с заданной геометрией.

3.2 Требования к программной части комплекса

Программная часть ПАК должна состоять из библиотеки модулей для моделирования мультифизических процессов в составе:

- 1) Модуль для расчета изотермических однокомпонентных течений без фазовых переходов методом LBE с возможностью действия внешних сил.
- 2) Модуль для расчета многокомпонентных течений методом LBE.
- 3) Модуль расчета течений с теплопереносом.
- 4) Модуль расчета методом LBE течений с фазовыми переходами с возможностью действия внешних сил.
- 5) Модуль расчета деформаций твердого тела методом подвижных клеточных автоматов.

Пользовательский интерфейс должен включать:

- 1) Модуль задания геометрии, граничных условий и параметров расчетной задачи.
- 2) Интерфейсную часть для управления работой модулей программного комплекса и визуализации результатов расчетов.

Программная часть ПАК может поставляться отдельно и должна работать в операционных системах Windows XP, Windows 7 или LINUX-подобной. Расчетные модули ПАК должны также функционировать на гибридных GPU-кластерах.

3.3 Требования к аппаратной части комплекса

В случае, если комплекс поставляется с аппаратной частью разрабатываемого ПАК, рабочая станция (компьютер) должна включать в себя:

- 1) Материнскую плату с одновременной поддержкой в режиме x16 (шина PCI-E x16) двух или трех графических карт, поддерживающих технологию CUDA. Необходимо,

чтобы расстояние между разъемами PCI-E x16 было достаточным для монтажа видеокарт. Это расстояние выбирается из расчета, чтобы после установки видеокарт зазор между ними обеспечивал достаточное охлаждение видеокарт (рекомендуется зазор не менее 15 мм).

- 2) Современный центральный процессор (тактовая частота не менее 2.6 ГГц, кэш 3-го уровня не менее 4096 кб).
- 3) Оперативную память не менее 6 ГБ или не менее суммарного объема памяти всех установленных видеокарт.
- 4) 2 или 3 видеокарты с поддержкой технологии CUDA с памятью не менее 2 ГБ на одну видеокарту.
- 5) Блок питания для обеспечения мощностью видеокарт и остальных устройств компьютера (рекомендуется 1,2 кВт и более).
- 6) 1 или 2 жестких диска с общей емкостью не менее 2 ТБ, тип интерфейса SATA-3.
- 7) Корпус станции, который необходимо оснастить дополнительными вентиляторами для дополнительного охлаждения пространства внутри корпуса.
- 8) Устройства ввода/вывода информации.

Рабочая станция должна оснащаться программным обеспечением, в состав которого входят: операционная система (Windows XP, Windows 7 или LINUX-подобная), драйверы для поддержки видеокарт, технологии CUDA и пакет NVIDIA GPU Computing SDK, содержащий набор тестовых программ для проверки работоспособности видеокарт.

В случае, если комплекс поставляется для расчетов на гибридном GPU-кластере, последний должен удовлетворять требованию наличия 2 или более видеокарт на каждом расчетном узле с поддержкой технологии CUDA с памятью не менее 2 ГБ на одну видеокарту. Рекомендуется наличие поддержки MPI протокола обмена данными между узлами кластера.

3.4 Требования к функциональным характеристикам комплекса

Для эффективной эксплуатации комплекса при проведении инженерных расчетов в проекте ТЗ разработаны требования к функциональным характеристикам ПАК:

- 1) к производительности;

- 2) к надёжности;
- 3) составу и параметрам технических средств;
- 4) к организации входных и выходных данных;
- 5) информационной и программной совместимости.

3.5 Дополнительные требования к комплексу

В проекте ТЗ разработаны дополнительные требования к ПАК:

- 1) к разработчикам ПАК;
- 2) к разрабатываемой документации;
- 3) к упаковке и маркировке;
- 4) к транспортировке и хранению;
- 5) к стандартизации и унификации;
- 6) к испытаниям;
- 7) к технико-экономическим показателям.

Выводы по главе 3

Разработан проект Технического задания для проведения последующего ОКР по теме «Разработка программно-аппаратного комплекса, основанного на применении метода решеточных уравнений Больцмана и методов клеточных автоматов и предназначенного для численного исследования мультифизических систем».

4 РАЗВИТИЕ МАТЕРИАЛЬНОЙ БАЗЫ. ПОКУПКА ОРГТЕХНИКИ И РАСХОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ.

Дирекция ИГиЛ СО РАН приказом № 23 от 14.06.2012 г. выделила собственные средства в размере 200000 (Двести тысяч) руб. для выполнения работ по этапу № 3 раздел 3.7 "Развитие материальной базы ..." календарного плана.

1 За счет собственных средств ИГиЛ СО РАН были приобретены оргтехника и расходные материалы на сумму 115023 руб. (товарные накладные прилагаются – 8 шт.):

- 1) Переpletная машина GMP-Master с расходными материалами.
- 2) Радиотелефоны Panasonic (3 шт.).
- 3) Приводы DVD-RW (2 шт.).
- 4) Сетевое хранилище D-link DNS 325.
- 5) Источник бесперебойного питания Smart-UPS.
- 6) Жесткие диски Seagate Barracuda емкостью 2 Тб (2 шт.).
- 7) Adobe Acrobat Professional 10 Windows Russian.
- 8) Картриджи к цветным принтерам CLX-2160 и HP CM1410 (4 комплекта).
- 9) Картриджи к ч./б. принтерам (3 шт.).
- 10) Бумага для принтеров (10 коробок).

2 Были проведены следующие работы:

1) Установлен жесткий диск Seagate Barracuda SATA-3 емкостью 2 Тб на один из компьютеров исполнителей проекта (комната 230). Диск отформатирован и размечен.

2) Установлены два DVD-RW привода NEC SATA на компьютерах исполнителей контракта в комнатах 214 и 231.

3) В комнате 230 установлено и подключено к локальной сети Сетевое дисковое хранилище D-link DNS 325 с 2 отсеками для жестких дисков, куда установлен один из приобретенных жестких дисков Seagate Barracuda SATA-3 емкостью 2 Тб. Установлено прилагаемое к Сетевому дисковому хранилищу программное обеспечение. Выполнено тестирование Сетевого дискового хранилища.

4) На компьютер исполнителей, находящийся в комнате 231, установлено специально купленное лицензионное программное обеспечение Adobe Acrobat Professional 10 Windows Russian Retail.

5) Выполнено подключение Бесперебойного источника питания к Сетевому дисковому хранилищу. Установлено прилагаемое программное обеспечение.

6) Установлена Переpletная машина GMP-Master.

7) Выполнены подключение и настройка 3-х радиотелефонов Panasonic в комнатах 214, 230, 231.

Выводы по главе 4

За счет собственных средств ИГиЛ СО РАН были приобретены оргтехника и расходные материалы на сумму 115023 руб., в соответствии с разделом 3.7 "Развитие материальной базы ..." этапа № 3 календарного плана государственного контракта от 26 октября 2011 г. № 07.514.11.4106.

Работы по установке и подключению купленной оргтехники и оборудования, а также по дооснащению рабочих мест в комнатах 214, 230 и 231 удовлетворяют требованиям п. 3.7 Календарного плана.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод решеточных уравнений Больцмана и метод подвижных клеточных автоматов представляют собой новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества, и основаны на дискретных моделях сплошной среды.

Выбраны алгоритмы, допускающие распараллеливание на новейших высокопроизводительных графических процессорах, что позволило значительно увеличить скорость расчетов, а также в несколько раз сократить электрическую мощность, потребляемую вычислительными системами на единицу производительности. Для распараллеливания алгоритма на большое количество ядер графических процессоров фирмы NVIDIA использована технология программирования CUDA. Для распараллеливания по узлам гибридного GPU-кластера использована технология MPI (Message Passing Interface). В результате выполнения контракта создана программная реализация метода решеточных уравнений Больцмана и метода подвижных клеточных автоматов. Создан ЭО программных реализаций этих методов и алгоритмов и полный комплект документации на ЭО.

На третьем этапе Государственного контракта выполнены обобщение и оценка полученных результатов и разработан проект Технического задания для проведения последующего ОКР по теме «Разработка программно-аппаратного комплекса, основанного на применении метода решеточных уравнений Больцмана и методов клеточных автоматов и предназначенного для численного исследования мультифизических систем».

Таким образом, в результате выполнения третьего этапа Государственного контракта проведены следующие работы:

- 1) Выполнены обобщение и оценка полученных результатов.
- 2) Разработаны рекомендации по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, а также в дальнейших исследованиях и разработках.
- 3) Разработан проект ТЗ для проведения последующего ОКР.
- 4) Реализованы мероприятия по достижению программных индикаторов и показателей (п. 8.2 ТЗ).

- 5) Разработан заключительный отчет о НИР. Отчет рассмотрен и утвержден на Ученом совете ИГиЛ СО РАН.
- 6) Проведен нормоконтроль Отчета о НИР на соответствие ГОСТ 7.32-2001.
- 7) Разработана отчетная документация в соответствии с требованиями технического задания и актов Заказчика.
- 8) За счет внебюджетного финансирования (собственных средств Института) были выполнены работы по развитию материальной базы рабочих мест (приобретение оргтехники, дооснащение рабочих мест исполнителей контракта, дооснащение компьютеров на рабочих местах программным обеспечением), согласно разделу 3.7 "Развитие материальной базы ..." календарного плана по этапу № 3.

Практическая ценность проведенных работ заключается в создании Экспериментального образца программы для моделирования мультифизических явлений на графических процессорах методами LBE и MCA, в выполнении патентных исследований, а также в разработке ТЗ на проведение ОКР. ЭО работает на нескольких GPU как на компьютерах с операционной системой Windows, так и с операционной системой LINUX.

Научные результаты работы (разработанные алгоритмы и методы моделирования, экспериментальный образец программных реализаций), полученные на втором этапе НИР, использованы на третьем этапе НИР при разработке проекта Технического задания на ОКР по теме «Разработка программно-аппаратного комплекса, основанного на применении метода решеточных уравнений Больцмана и методов клеточных автоматов и предназначенного для численного исследования мультифизических систем». Внедрение результатов в инженерную практику возможно только после окончания НИР и ОКР.

На данном этапе исследований экономической эффективности результаты НИР иметь не могут. Вместе с тем, Ученый совет ИГиЛ СО РАН, на котором принимался заключительный отчет по третьему этапу работы, отметил перспективность продолжения работ и рекомендовал использовать накопленный опыт в дальнейшей научной работе.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Joshi A. S., Sun Y. Multiphase lattice Boltzmann method for particle suspension // *Phys. Rev. E*. 2009. Vol. 79, N 6. P. 066703.
- 2 Jain P. K., Tentner A., Rizwan-uddin. A lattice Boltzmann framework to simulate boiling water reactor core hydrodynamics // *Computers and Mathematics with Applications*. 2009. Vol. 58, N 5. P. 975–986.
- 3 Van Thang P., Chopard B., Lefevre L., Ondo D. A., Mendes E. Study of the 1D lattice Boltzmann shallow water equation and its coupling to build a canal network // *J. Computational Physics*. 2010. Vol. 229, N 5. P. 7373–7400.
- 4 Joshi A. S., Sun Y. Wetting dynamics and particle deposition for an evaporating colloidal drop: A lattice Boltzmann study // *Phys. Rev. E*. 2010. Vol. 82, N 4. P. 041401.
- 5 Markus A., Hazi G. Simulation of evaporation by an extension of the pseudopotential lattice Boltzmann method: A quantitative analysis // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 83, N 4. P. 046705.
- 6 Sbragaglia M., Shan X. Consistent pseudopotential interactions in lattice Boltzmann models // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 84, N 3. P. 036703.
- 7 Куперштох А. Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*. 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.
- 8 Kupershtokh A. L., Medvedev D. A., Karpov D. I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*. 2009. Vol. 58, N 5. P. 965–974.
- 9 Kupershtokh A. L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications*, 2010. Vol. 59, N 7. P. 2236–2245.
- 10 Куперштох А. Л. Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. С. 130–138.
- 11 Qian Y. H., Orzag S. A. Lattice BGK models for the Navier – Stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes // *Europhys. Lett*. 1993. Vol. 21. P. 255–259.

- 12 Qian Y. H., Chen S. Finite size effect in lattice-BGK models // *International Journal of Modern Physics C*. 1997. V. 8, N 4. P. 763–771.
- 13 Kupershtokh A. L., Karpov D. I., Medvedev D. A., Stamatelatos C., Charalambakos V. P., Pyrgioti E. C., Agoris D. P. Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics // *IET Sci. Meas. Technol.*, 2007, Vol. 1, N 6. pp. 303–311.
- 14 Kupershtokh A. L. New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation // *Proc. of the 5th International EHD Workshop, Poitiers, France, 2004*, pp. 241–246.
- 15 Куперштох А. Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // *Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”*. 2004. Т. 4, № 2. С. 75–96.
- 16 Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Электродинамика сплошных сред*. – М.: Гос. изд-во физ.-мат. литературы. 1959. – 532 с.
- 17 Kupershtokh A. L., Medvedev D. A. Anisotropic instability of a dielectric liquid in a strong uniform electric field: Decay into a two-phase system of vapor filaments in a liquid // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 74, N 2. P. 021505.
- 18 Карпов Д. И., Куперштох А. Л. Анизотропный спиноподобный распад полярного диэлектрика в сильном электрическом поле: метод молекулярной динамики // *Письма в ЖТФ*. 2009. Т. 35. Вып. 10. С. 87–94.
- 19 Куперштох А. Л. Трехмерное моделирование методом LBE на гибридных GPU-кластерах распада бинарной смеси жидкого диэлектрика с растворенным газом на систему парогазовых каналов // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. С. 384–390.
- 20 Karabasov S. A., Goloviznin V. M. New efficient high-resolution method for nonlinear problems in aeroacoustics // *AIAA J.* 2007. Vol. 45, N 12. P. 2861–2871.
- 21 Karabasov S. A., Berloff P. S., Goloviznin V. M. Cabaret in the ocean gyres // *Ocean Modelling*. 2009. Vol. 30, N 2. P. 155–168.
- 22 Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О монотонности двухслойной по времени схемы КАБАРЕ // *Математическое моделирование*. 2012. № 9. (Принята в печать).
- 23 Li W., Wei X., Kaufman A. Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // *Visual Computer*. 2003. 19. 444–456.

- 24 Tölke J., Krafczyk M. TeraFLOP computing on a desktop PC with GPU for 3D CFD // *International Journal of Computational Fluid Dynamics*. 2008. 22, N 7. 443–456.
- 25 Janßen C., Krafczyk M. Free surface flow simulations on GPGPU using the LBM // *Computers and Mathematics with Applications*. 2011. 61, N 12. 3549–3563.
- 26 Грачев Н. Е., Дмитриев А. В., Сенин Д. С. Моделирование динамики газа при помощи решеточного метода Больцмана // *Вычислительные методы и программирование*. 2011. Т. 12. 227–231.
- 27 Бикулов Д. А., Сенин Д. С., Демин Д. С., Дмитриев А. В., Грачев Н. Е. Реализация метода решеточных уравнений Больцмана для расчетов на GPU-кластере // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. С. 13–19.
- 28 Obrecht C., Kuznik F., Tourancheau B., Roux J.-J. Multi-GPU implementation of the lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*. 2012. In press., doi: 10.1016/j.camwa. 2011.02.020.
- 29 NVIDIA CUDA C. Programming Guide. Version 4.0. 2011.