

**Резюме проекта НИР, выполняемого в рамках ФЦП
«Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007 – 2013 годы»
Итоговое**

Номер контракта: № 07.514.12.4002 от «15» сентября 2011 г.

Тема: Разработка параллельного программного комплекса для решения многомерных задач физики высоких плотностей энергии на адаптивных сетках

Приоритетное направление: Стратегические компьютерные технологии и программное обеспечение

Критическая технология: Технологии распределенных вычислений и систем

Период выполнения: 15.09.2011–24.08.2012

Плановое финансирование проекта: 13.125 млн. руб.

Бюджетные средства - 10.5 млн. руб.,

Внебюджетные средства - 2.625 млн. руб.

Исполнитель: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

Ключевые слова: высокие плотности энергии, высокоскоростной удар, поглощение лазерного излучения, адаптивные сетки, многомерные задачи, численное моделирование

1. Цель исследования, разработки

1.1. Проект направлен на решение различных задач физики высоких плотностей энергии методами численного моделирования.

1.2. Целью проекта является создание экспериментального образца параллельного программного комплекса (ЭО ППК) для расчета двумерных и трехмерных процессов при интенсивных импульсных воздействиях на вещество с реальными свойствами на высокопроизводительных параллельных вычислительных комплексах с использованием пространственно-временного адаптивного разбиения счетной области на сетки.

2. Основные результаты проекта

В результате работы на первом этапе проведен аналитический обзор информационных источников; исследован объект НИР; проведены патентные исследования; разработаны возможные направления проведения исследований и возможные решения отдельных задач моделирования течений в конденсированных и газо-плазменных средах при высокой концентрации энергии; дана сравнительная оценка эффективности возможных направлений исследований. Обоснован выбор оптимального варианта направления исследований; проведен анализ эффективности существующих технологических средств и программных пакетов для решения задач физики высокоэнергетических импульсных воздействий на вещество. Исследована природа интенсивных импульсных воздействий на вещество; разработана теория процессов в конденсированных и газо-плазменных средах при высоких плотностях энергии; разработаны прототипы технических решений по реализации результатов теоретических исследований; проведено моделирование объекта исследований; реализованы прототипы технических решений.

В результате работы на втором этапе проведены численные эксперименты по испытанию составных частей (компонентов) созданного экспериментального образца параллельного программного комплекса в соответствии с программой экспериментальных исследований, а также эксперименты по исследованию ударно-волновых течений в конструкционных материалах при интенсивных импульсных нагрузках и по изучению взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с конструкционными материалами; проведены исследовательские испытания созданного экспериментального образца параллельного программного комплекса в целом в соответствии с программой исследовательских испытаний; исследованы отдельные функциональные характеристики созданного экспериментального образца параллельного программного комплекса, установленные требованиями технического задания. Также проведена доработка созданного экспериментального образца параллельного программного комплекса с учетом результатов экспериментальных исследований и корректировка технической документации по результатам исследовательских испытаний. Проведены дополнительные исследования, в том числе патентные.

На третьем, заключительном этапе выполнено обобщение результатов исследований, проведено сопоставление результатов анализа научно-информационных источников и теоретических и экспериментальных исследований, проведена оценка эффективности полученных результатов в сравнении с современным научно-техническим уровнем, проведен анализ выполнения требований ТЗ на НИР, проведена оценка полноты решения задач и достижения поставленных целей НИР. Также проведена технико-экономическая оценка рыночного потенциала полученных результатов, разработаны рекомендации и предложения по использованию результатов проведенных НИР в реальном секторе экономики, разработан проект ТЗ для проведения ОКР по теме "Разработка параллельного программного комплекса для расчета двумерных и трехмерных процессов при интенсивных импульсных воздействиях на вещество на высокопроизводительных параллельных вычислительных комплексах с использованием пространственно-временного адаптивного разбиения счетной области на сетки".

Основные характеристики созданной научной (научно-технической, инновационной) продукции:

ЭО ППК для решения задач физики высокоэнергетических импульсных воздействий на вещество обеспечивает:

- возможность использования результатов НИР при создании новых программных комплексов в смежных областях, где необходимо проведение моделирования на параллельных комплексах и осуществление графической обработки информации;
- возможность использования результатов НИР для прогноза последствий техногенных и природных катастроф различного рода;
- возможность использования результатов НИР при проектировании новых средств безопасности и защиты.

В плане требований к номенклатуре параметров, к точности их определения и точности воспроизведения внешних условий ЭО ППК обеспечивает:

- 1) задание конфигурации счетной области и объектов, начальных и граничных условий через пользовательский интерфейс;
- 2) запуск расчетов на удаленных высокопроизводительных параллельных вычислительных комплексах с использованием технологий распараллеливания;
- 3) обрабатывать данные и проводить визуализацию на удаленных высокопроизводительных комплексах в параллельном режиме без необходимости пересылки больших объемов данных.

ЭО ППК обладает следующими функциональными характеристиками:

- 1) описывает 2- и 3-мерные многокомпонентные гидродинамические течения в диапазоне плотностей от 10^5 до 10^{-9} г/см³ и давлений от -10 до 10^5 ГПа;
- 2) использует в расчетах уравнения состояния с учетом фазовых переходов не менее 3 (кристалл-жидкость, жидкость-газ, кристалл-газ) и метастабильных фаз не менее 3 (1 твердой, 1 жидкой, 1 газовой);
- 3) описывает кинетические процессы роста пор при нуклеации и разрушении вещества от 10^5 до 10^9 с⁻¹;
- 4) реализует алгоритм пространственно-временного адаптивного разбиения счетной области на сетки с вложенной структурой и заданной дискретизацией пространства в зонах больших градиентов физических величин (плотности, давления, температуры) в конденсированной и газовой фазах;
- 5) создает файлы визуализации в формате BMP и анимационные фильмы в формате MPEG.

ЭО ППК выполняется на многопроцессорных ЭВМ с пиковой производительностью не менее 100 Тфлопс.

В плане требований по стандартизации, унификации, совместимости и взаимозаменяемости ЭО ППК поддерживает следующие основные стандарты:

- 1) использовать версию GNU make 3.77 или выше;
- 2) использовать версию Perl 5;
- 3) поддерживать формат параллельного ввода-вывода HDF5 версии 1.6 или выше;
- 4) поддерживать стандарты программирования на языках FORTRAN 77 и C++ ISO/IEC 14882:1998;

5) для компиляции и запуска программного комплекса должна присутствовать реализация стандарта интерфейса обмена данными MPI 1.1 или выше.

ЭО ППК функционирует на персональных компьютерах, кластерных системах и компьютерах с архитектурой симметричного мультипроцессирования, работающих под управлением операционной системы Linux.

Оценка элементов новизны научных (конструкторских, технологических) решений:

Новизна научных решений при создании ЭО ППК обеспечена новыми созданными моделями термодинамических свойств (широкодиапазонных многофазных уравнений состояния) материалов и взаимодействия лазерного излучения с веществом.

Сопоставление с результатами аналогичных работ, определяющими мировой уровень:

Используемые в расчете уравнения состояния не имеют мировых аналогов по точности описания всей совокупности имеющихся экспериментальных данных в диапазоне параметров от разреженного до сильно сжатого конденсированного состояния. Благодаря использованию в расчетах полуэмпирических табличных уравнений состояния получены пространственные распределения фазовых состояний, включающие в себя помимо твердого состояния области плавления, жидкого состояния, газообразного, а так же смеси жидкость–пар. Кроме того, в уравнениях состояния реализованы метастабильные фазы: твердая, жидкая, газообразная и область плавления. Использование информации о фазовом состоянии в области отрицательных давлений позволяет использовать различные модели разрушения для жидкого и твердого состояния, что дает преимущество данному подходу по сравнению с известными аналогами.

Применение адаптивных измельчаемых перестраиваемых пространственно-временных сеток ранее не применялось в российских разработках программных комплексов. Адаптация библиотеки Chombo к использованию в ЭО ППК позволила значительно ускорить решение многомерных задач физики высоких плотностей энергии. Использование многоуровневых сеток позволило добиться требуемого уровня дискретизации решения, ранее недостижимого в задачах такого класса на аналогичных по производительности компьютерах.

Таким образом, ЭО ППК по ряду параметров превосходит существующие в России и мире аналогичные средства параллельного моделирования физических задач.

3. Охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности (РИД), полученные в рамках исследования, разработки

Охраняемых результатов интеллектуальной деятельности не создано.

4. Назначение и область применения результатов проекта

Созданный экспериментальный образец программного комплекса для проведения расчетов процессов, протекающих в веществе при интенсивном импульсном воздействии источниками различной природы, будет пригоден для применения в различных отраслях народного хозяйства, прежде всего, в энергетике.

Результаты НИР могут быть использованы для проведения ОКР, направленных на создание новых программных комплексов с последующей установкой в научных институтах. Таким образом, результаты НИР могут быть использованы как для повышения качества работы научных организаций, так и подготовки специалистов в области компьютерного моделирования.

5. Эффекты от внедрения результатов проекта

Проект имеет высокий социально-экономический потенциал, поскольку позволит повысить качество работы научных организаций и осуществить подготовку молодых научных кадров к работе по перспективным направлениям физики на самом современном уровне.

6. Формы и объемы коммерциализации результатов проекта

Проект обладает потенциалом для последующей коммерциализации, поскольку создает предпосылки для использования получаемых результатов в научных учреждениях при проведении численного моделирования актуальных задач физики высоких плотностей

энергии, и при подготовке научных кадров, готовых овладеть современными технологиями проведения параллельных вычислений.

Руководитель работ
Директор ОИВТ РАН, академик
М.П.

В. Е. Фортов

Ответственный исполнитель,
Зав. отделом ОИВТ РАН

К. В. Хищенко