



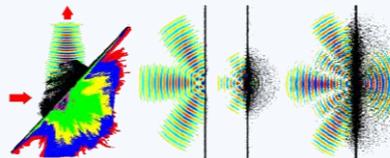
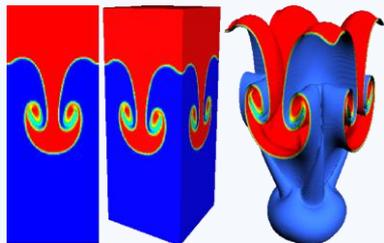
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Прикладная математика в Ядерном Центре на Урале

Пронин Ян Владимирович

Начальник отдела. Отделение прикладной математики и
теоретической физики. j.v.pronin@vniitf.ru.

Направления деятельности отделения



Взаимодействие лазерного импульса с твердотельной мишенью

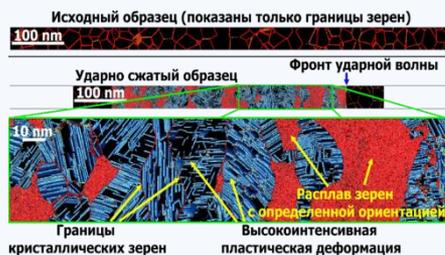
Создание вычислительных программ для расчётов сложных **многомерных гидродинамических течений** с учётом переноса нейтронов и излучения

Моделирование гидродинамических **неустойчивостей и турбулентности**

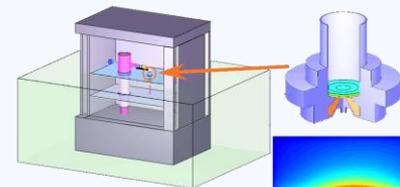
Разработка широкодиапазонных **уравнений состояния веществ** при высоких давлениях и температурах

Исследование излучательных свойств плотной **высокотемпературной плазмы**

Направления деятельности отделения



Моделирование ударно-волнового сжатия поликристаллического образца



Расчёт радиационной безопасности для медицинской установки нейтронной терапии

Расчёт переноса частиц методом **Монте-Карло**, развитие методов неаналогового моделирования

Изучение **детонации** взрывчатых веществ

Крупномасштабное **молекулярно-динамическое (МД) моделирование** динамических процессов на микро- и мезоуровнях. МД моделирование термодинамических и механических свойств материалов

Создание моделей процессов с участием **термоядерных реакций**

Направления деятельности отделения

Особенности проведения численного моделирования на современном уровне

Использование как традиционных моделей, методов, схем, так и разработка новых, обладающих улучшенными свойствами

Моделирование в 1D, 2D и 3D геометриях

Использование современных средств пре- и постпроцессинга



Повышение точности математического моделирования

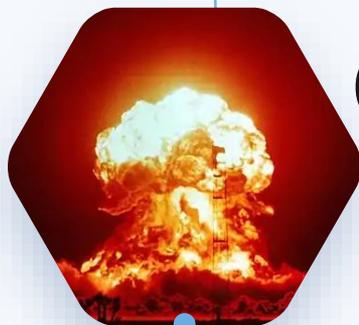
Возможность проведения больших серий численных экспериментов для определения необходимых параметров

Применение технологии массового распараллеливания для различных архитектур



Направления деятельности отделения

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО



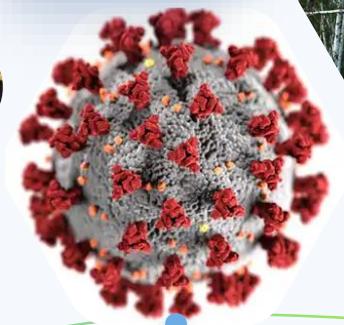
Работы по основной тематике



Расчет дозовых нагрузок на технику и персонал



Расчеты нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов



Моделирование распространения эпидемий



Расчет доз на радиационно-загрязненной территории



Оптимизация конструкций защиты от излучения



Радиационная медицина

Промышленная деятельность



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Цифровизация газотранспортной системы «Газпром» ПКВ «Волна»

ПКВ «Волна» предназначен для использования в газотранспортных обществах в целях поддержки принятия диспетчерских решений по управлению газотранспортными системами.

Центры управления магистральными газопроводами

Москва, Новый Уренгой, ...

Крупные компрессорные станции
«Северный поток», «Сила Сибири»

Газоперерабатывающие заводы
«Астраханский ГПЗ» ...



Промышленная деятельность

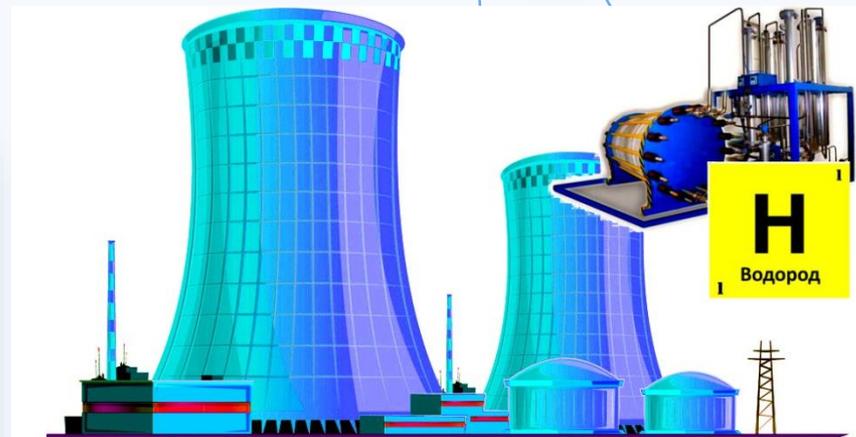


РФЯЦ-ВНИИТО
РОСАТОМ

Водородная энергетика

Один из подходов промышленного производства водорода это процесс паровой и парокислородной переработки природного газа за счет избыточного тепла ядерного реактора.

Все технологические процессы протекают при повышенном давлении и повышенной температуре.



Программные комплексы для обоснования безопасности водородных объектов



РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Проекты

Системное обеспечение функционирования и безопасности водородной энергетики

Обоснование характеристик пассивных каталитических рекомбинаторов водорода

Цель

Разработка системы кодов для оценки последствий крупномасштабных аварий при производстве и обращении с водородосодержащими смесями в обоснование водородной взрывобезопасности, в том числе на объектах использования атомной энергии.

Заказчики



АО «ВНИИАЭС»



АО «Концерн Росэнергоатом»

Актуальность

- Безопасность – критический фактор конкурентоспособности ВЭ
- Пробелы в понимании опасных явлений
- Дефициты в технологиях защиты
- Необходимость уточнения норм

Взрывоопасные вещества

- H_2
- CH_4
- CO
- O_2

Типы взаимодействий

- взрывные,
- термические,
- токсичные

Программные комплексы для обоснования безопасности водородных объектов



РФЯЦ-ВНИИФ
РОСАТОМ

Комплекс программ ФОКУС

Назначение

Моделирование горения и детонации

Моделируемые процессы

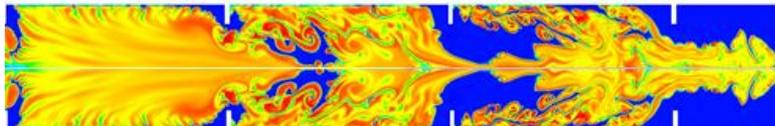
- многокомпонентная газовая динамика с ударными волнами,
- теплопроводность,
- излучение,
- химические реакции, вязкость,
- молекулярная и турбулентная диффузия,
- Учёт моделей турбулентности k-ε и LES

Особенности программы

- эйлерова расчётная сетка,
- динамическая адаптация сетки,
- схема Годунова повышенного порядка точности,
- сложная геометрия,
- эффективное использование параллельного вычислительного комплекса

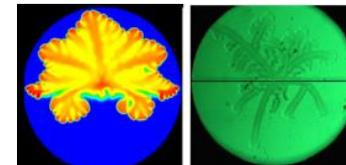
Потребности

- Генераторы сеток
- Применение искусственного интеллекта для выбора параметров разностных схем
- MPI-декомпозиция для балансировки нагрузки
- Реализация под гибридную архитектуру
- Развитие моделей турбулентности



Струйное течение при наличии перегородок

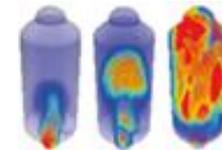
Горение в зазоре



расчёт

эксперимент

Горение в реальной установке



Дефлаграция

шаровое пламя



расчёт

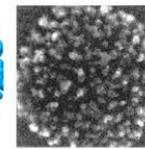


эксперимент

ячеистое пламя



расчёт



эксперимент

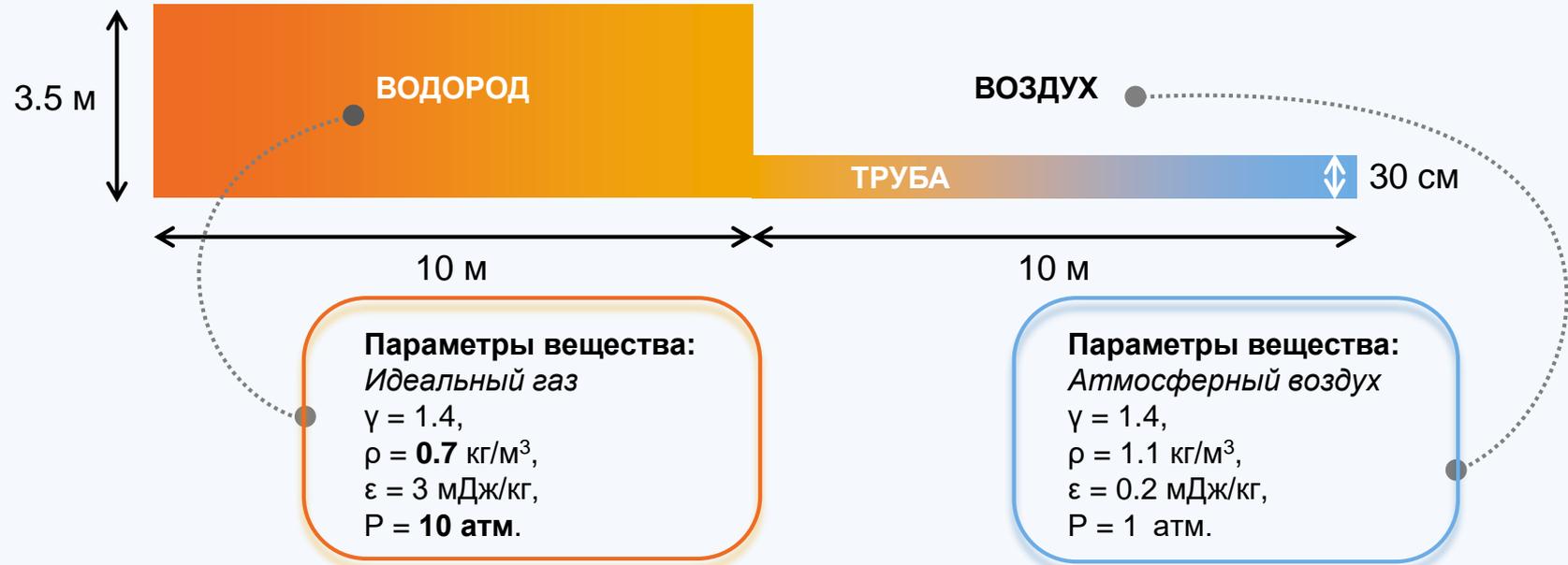
Математическое моделирование



Пример прикладного численного моделирования



Попробуем описать процесс численного моделирования на примере задачи о взрыве воздушно-водородной смеси при гильотинном разрыве трубопровода.



Физические процессы



В задаче учитываются следующие физические процессы:

Истечение водорода из трубы в атмосферу



«Всплытие» водорода по действием силы тяжести



Горение воздушно-водородной смеси



Перенос тепла излучением и на молекулярном уровне



Дискретизация задачи



Для того, чтобы проводить численное моделирование, нужно каким-то образом хранить в памяти компьютера геометрию системы – распределение веществ и их свойств. Для этого осуществляется переход к **дискретному аналогу сплошной среды**.



ПОДХОДЫ

Сеточные методы.

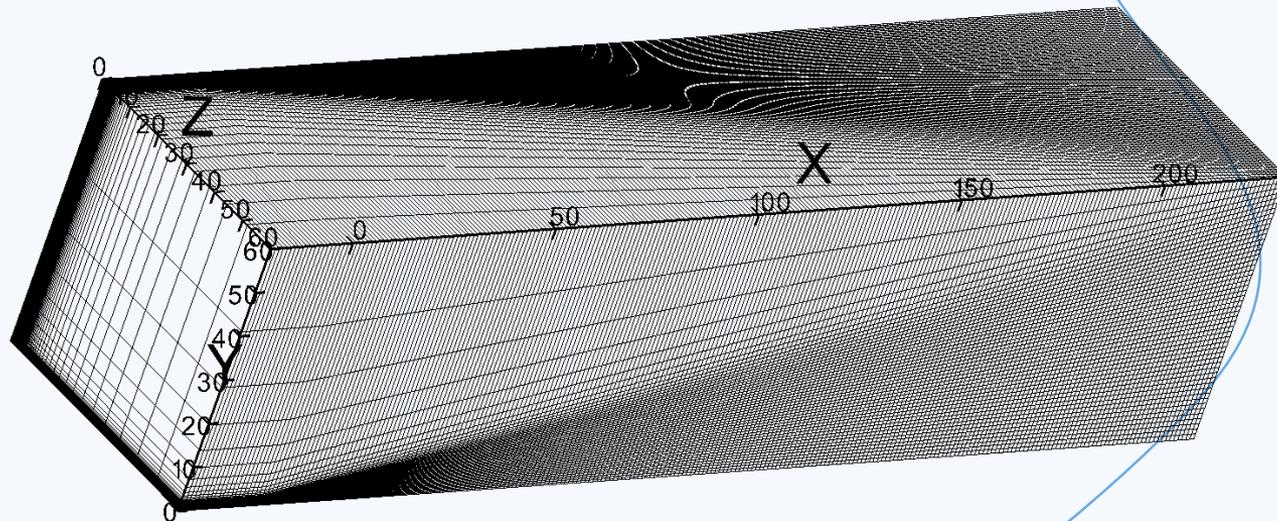
Регулярная, нерегулярная (неструктурированная) пространственная сетка.

Задаются и рассчитываются значения ТДВ, скоростей и т.д.

Бессеточные методы.

Множество взаимодействующих по определенному закону частиц.

Сетка в задаче о вытекании водорода из трубы



В районе бака и трубы сетка более подробная



Математическая модель. Система уравнений газовой динамики.

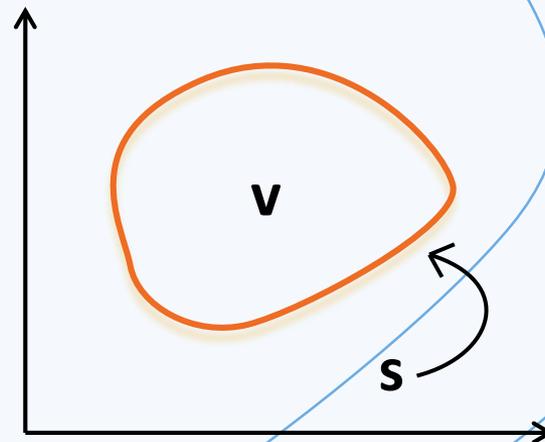
Интегральные законы сохранения **массы, импульса, и полной энергии** для некоторого объема V , ограниченного поверхностью S , движущейся со скоростью \vec{w} . При $\vec{w} = \vec{u}$ система описывает законы сохранения для лагранжевой частицы, а при $\vec{w} = 0$ – для фиксированного объема пространства.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dv - \int_S \rho \cdot (\vec{w} - \vec{u}) \cdot \vec{n} ds = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \cdot \vec{u} dv - \int_S \rho \cdot \vec{w} \cdot (\vec{w} - \vec{u}) \cdot \vec{n} ds + \int_S p \cdot \vec{n} ds = 0$$

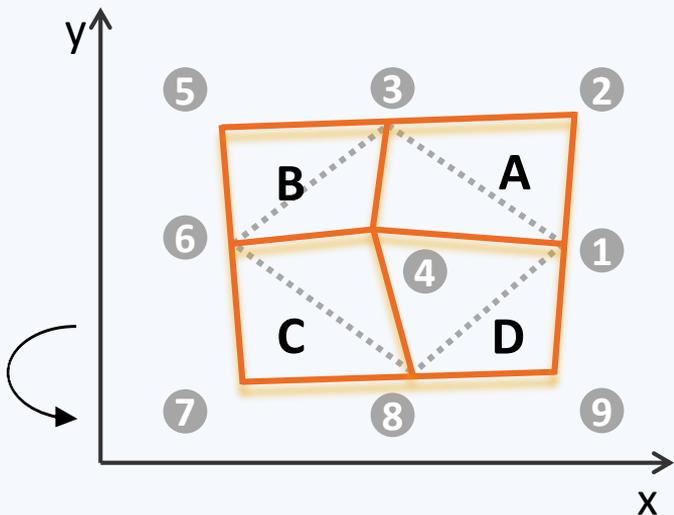
$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \cdot E_u dv - \int_S \rho \cdot E_u \cdot (\vec{w} - \vec{u}) \cdot \vec{n} ds + \int_S p \cdot \vec{u} \cdot \vec{n} ds = 0$$

$$p = f(\rho, \varepsilon)$$



Здесь t – время, ρ – плотность, \vec{w} – вектор скорости, \vec{n} – вектор нормали к поверхности S , p – давление.

Разностное уравнение движения

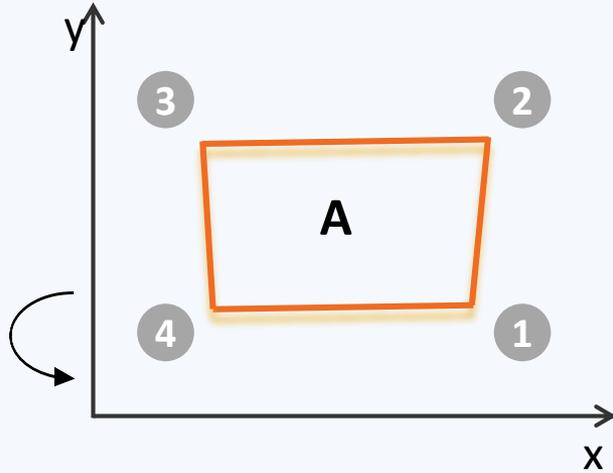


Уравнение движения:

$$\frac{\vec{u}_4^{n+1} - \vec{u}_4}{\tau} = \frac{1}{M_4} GRAD_4(p) + \vec{g}$$

$$GRAD_4 p = \frac{1}{2} \left[p^A \begin{bmatrix} y_3 - y_1 \\ x_1 - x_3 \end{bmatrix} + p^B \begin{bmatrix} y_6 - y_3 \\ x_3 - x_6 \end{bmatrix} + p^C \begin{bmatrix} y_8 - y_6 \\ x_6 - x_8 \end{bmatrix} + p^D \begin{bmatrix} y_1 - y_8 \\ x_8 - x_1 \end{bmatrix} \right]$$

Разностное уравнение энергии



Уравнение энергии:

$$\frac{\varepsilon_A^{n+1} - \varepsilon_A^n}{\tau} = \frac{1}{M_A} p \cdot \text{DIV}_A(\vec{u}) + Q$$

$$\begin{aligned} \text{DIV}_A(\vec{u}) = & \frac{1}{2} \left[(u_2 + u_3)(y_3 - y_2) + (v_2 + v_3)(x_2 - x_3) \right] + \frac{1}{2} \left[(u_3 + u_4)(y_4 - y_3) + (v_4 + v_3)(x_4 - x_3) \right] \\ & + \frac{1}{2} \left[(u_1 + u_4)(y_1 - y_4) + (v_1 + v_4)(x_4 - x_1) \right] + \frac{1}{2} \left[(u_1 + u_2)(y_2 - y_1) + (v_1 + v_2)(x_1 - x_2) \right] + \end{aligned}$$

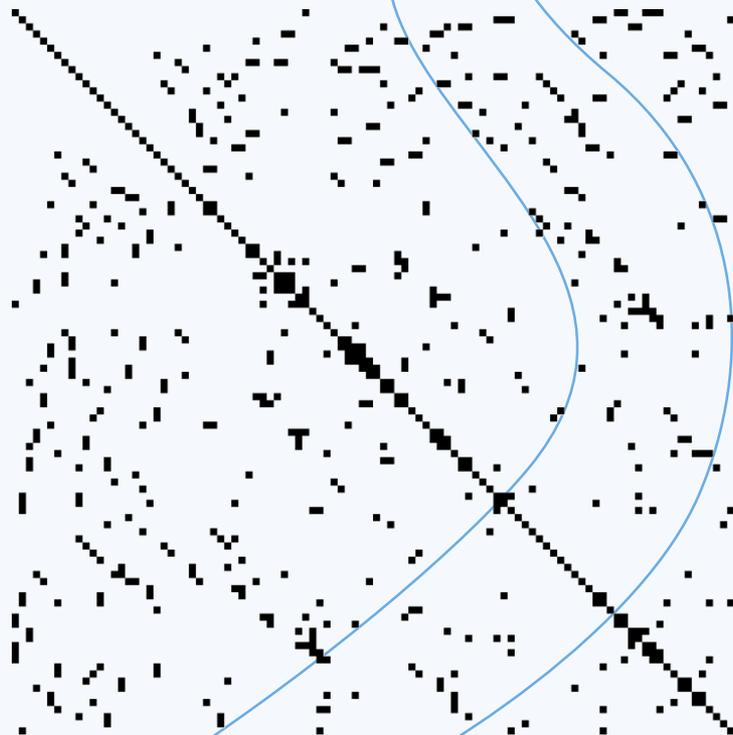


Все сводится к решению СЛАУ!

$$Ax = b$$

$$A = \begin{bmatrix} B_0 & C_0 & & & \\ A_1 & B_1 & C_1 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & A_n & B_n & \end{bmatrix}$$

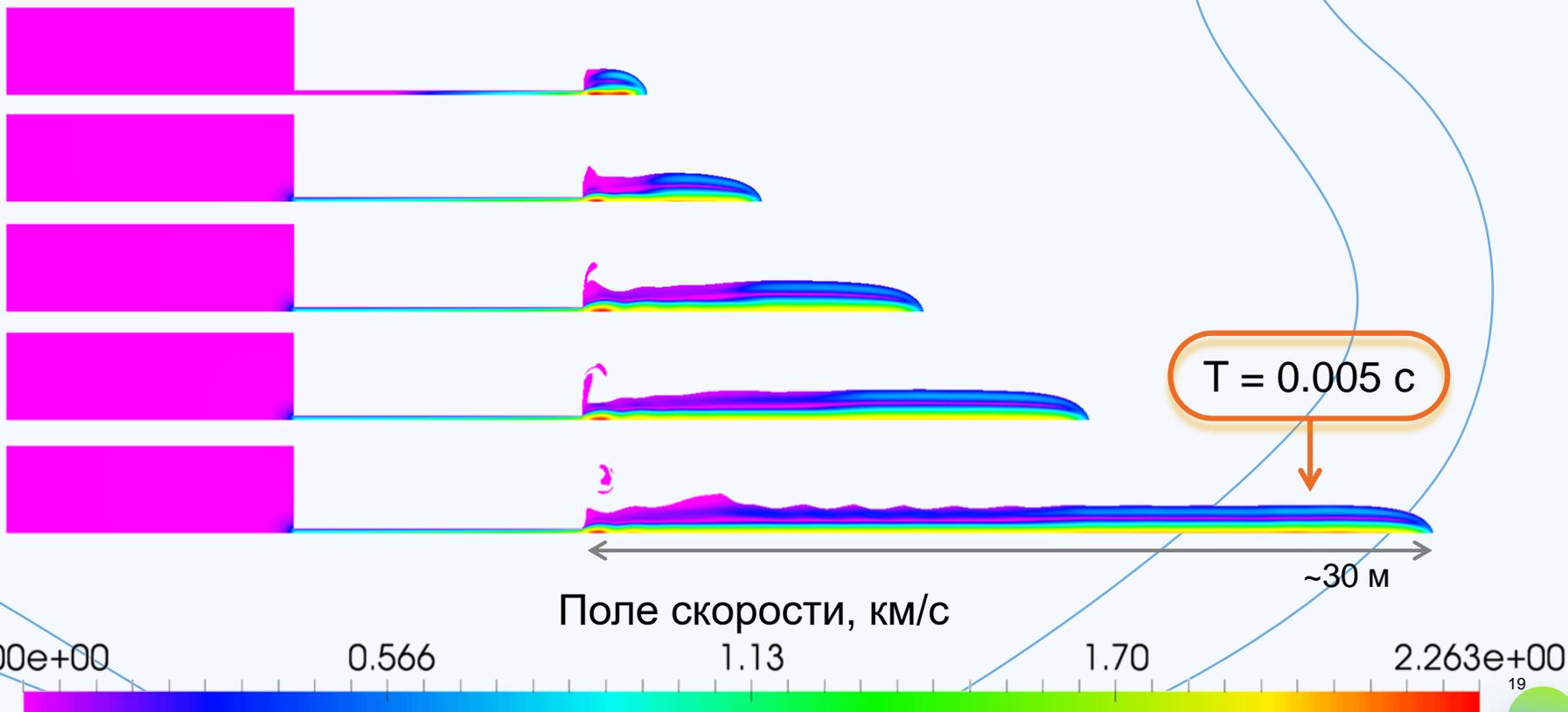
для 3D уравнений Эйлера каждый элемент
A, B, C - блоки 5×5



Результат. Вытекание водорода из трубы



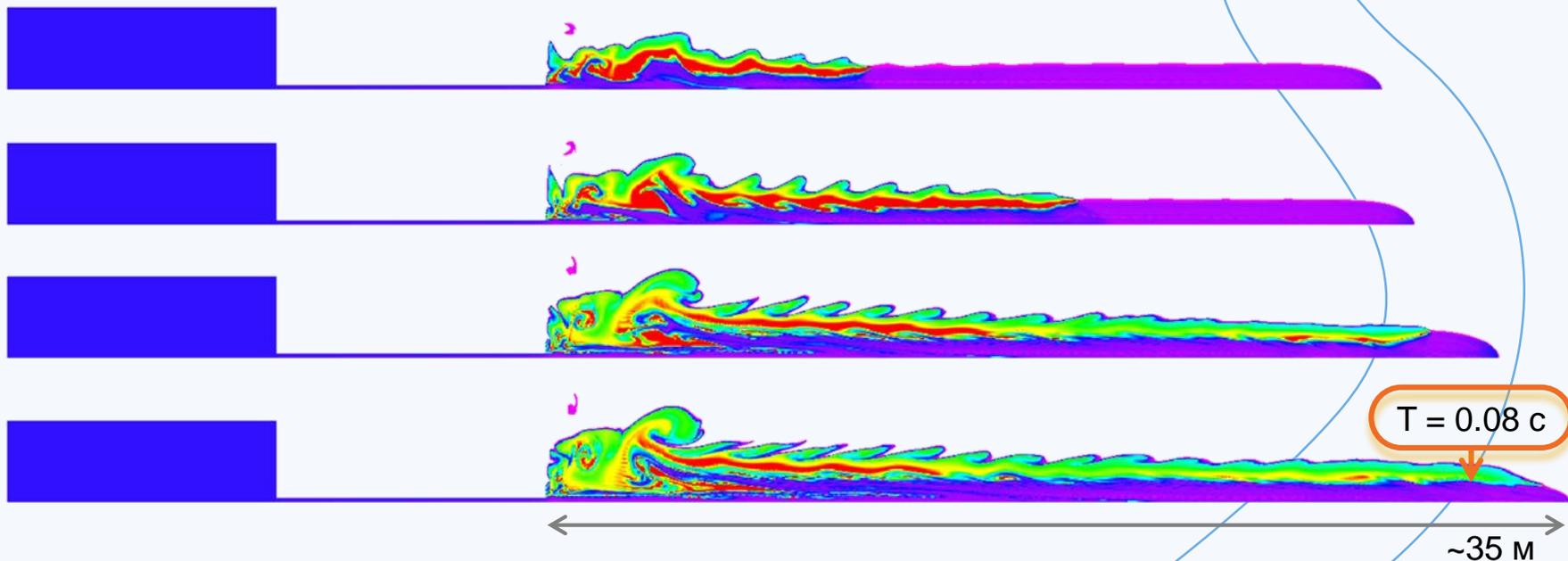
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Результат. Взрыв воздушно-водородной смеси



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ



Поле энергии

$3.154e-01$

6.17

12.3

18.5

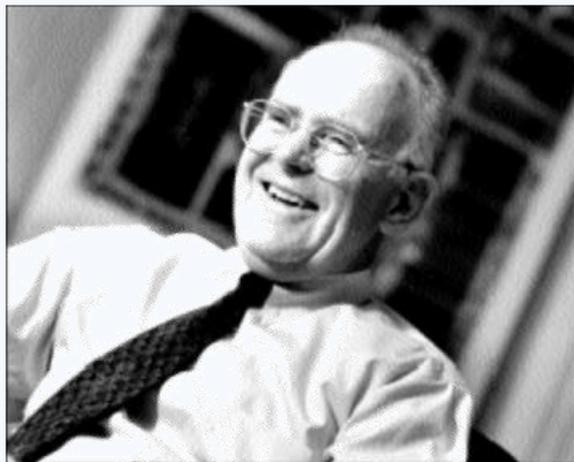
$2.500e+01$



Сложности написания программ для высокопроизводительных вычислений



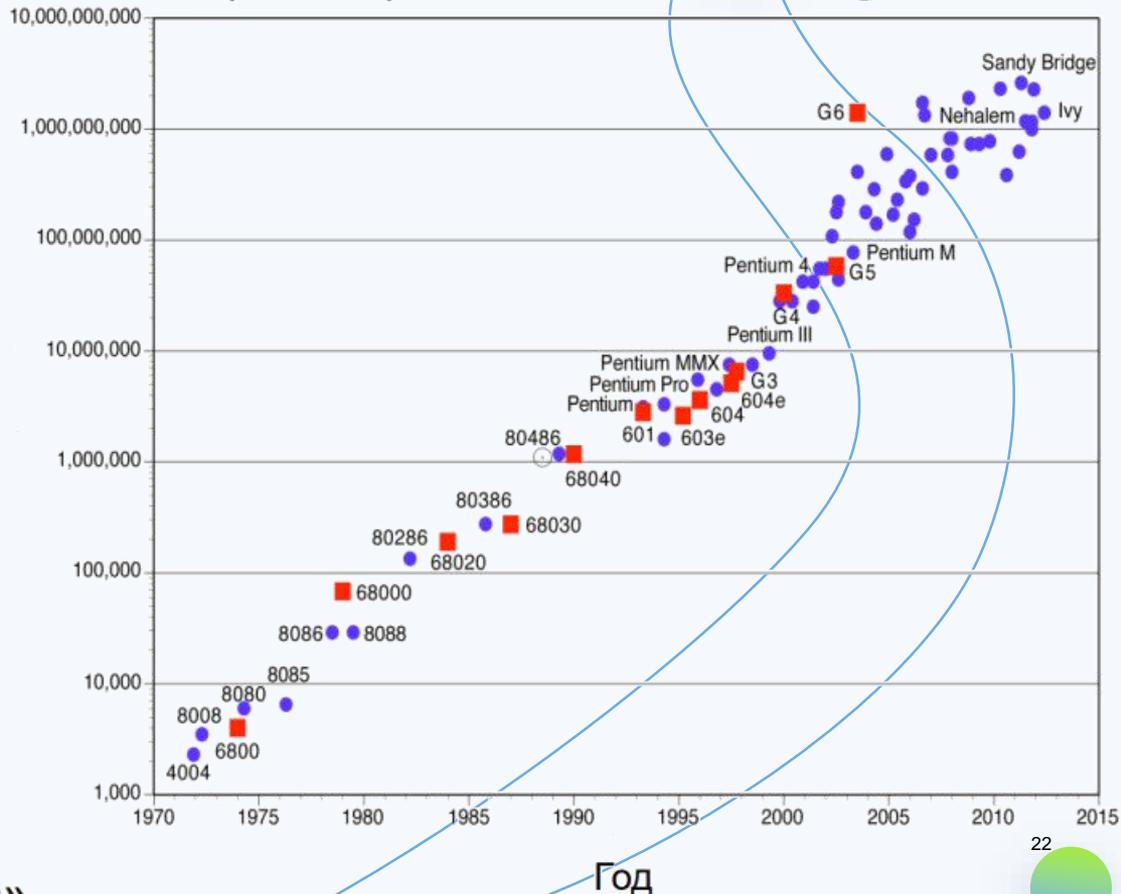
Закон Мура



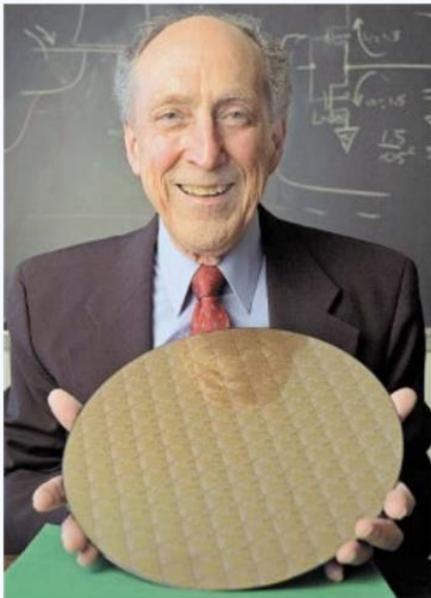
Gordon E. Moore в 1965 году:
«Количество транзисторов,
размещаемых на кристалле
интегральной схемы,
удваивается каждые 18
месяцев»

В 1975 году — «каждые 24 месяца»

Количество транзисторов



Теория масштабирования Деннарда



Robert H. Dennard

в 1968 году
изобрёл динамическую
память с произвольным
доступом (DRAM)

Роберт Деннард в 1974 году объяснил закон Мура:
«Уменьшая размеры транзистора и повышая тактовую частоту процессора, мы можем легко повышать его производительность»

Чем меньше транзистор по размеру,
тем быстрее он может переключаться;
Чем быстрее транзистор может переключаться,
тем быстрее работает процессор.

**Для повышения производительности надо
повышать плотность, частоту и
снижать энергопотребление**

суперкомпьютерная революция

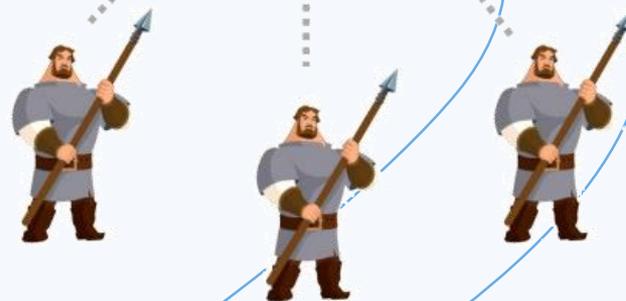


- Серийно выпускаемое сетевое оборудование позволило использовать в качестве суперкомпьютера **обычную локальную сеть**
- Технический и экономический смысл разработки и изготовления собственных плат и шкафов для интеграции стандартных микропроцессоров в единую систему пропал
- Подавляющее большинство суперкомпьютеров стало строиться по технологии **кластеров выделенных рабочих станций**
- На рабочих станциях устанавливается только **специальное программное обеспечение**

Всегда хочется чего-то большего

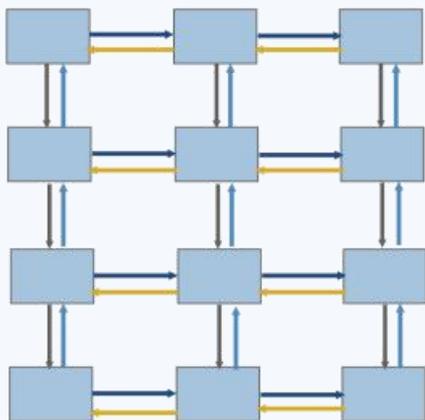


HTC – High **T**hroughput **C**omputing
Высокоинтенсивные вычисления



HPC – High **P**erformance **C**omputing
Высокопроизводительные вычисления

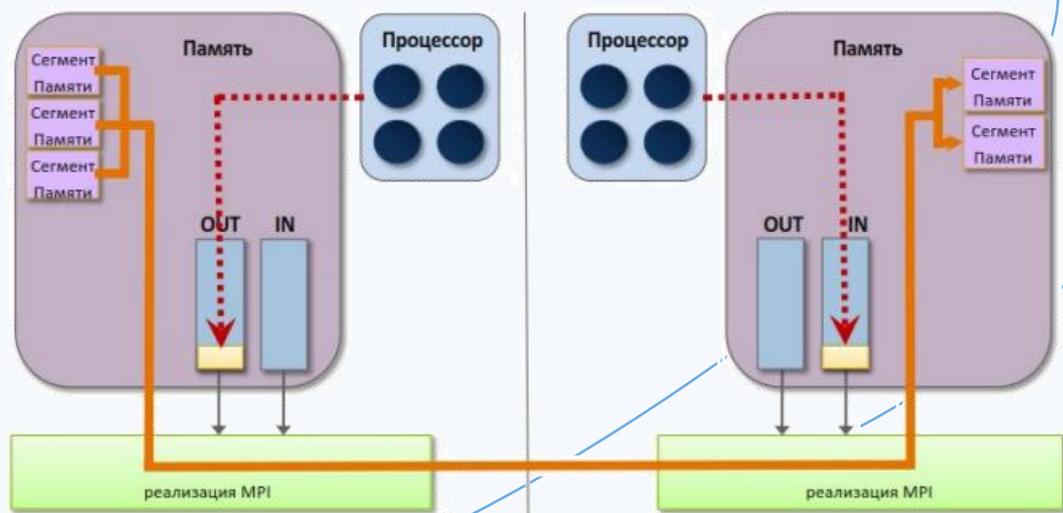
Распределённая память – MPI



MPI – **M**essage **P**assing **I**nterface – интерфейс передачи сообщений – программный интерфейс для передачи информации, который позволяет обмениваться сообщениями между процессами, выполняющими одну задачу

MPI-1 – 1994, MPI-2 – 1997, MPI-3 – 2012

У каждого процесса своя независимая память и доступ к другой по MPI





Закон Амдала – предел ускорения



Gene Amdahl

американский учёный
в области
вычислительной
техники

Джин Амдал в 1967 году:

«В случае, когда задача разделяется на несколько частей, суммарное время её выполнения на параллельной системе не может быть меньше времени выполнения **самого медленного фрагмента**»

Максимально возможное ускорение при $P \rightarrow \infty$

α – последовательная часть вычислений

$$S(P) = \frac{\text{Время}_{\text{посл}}}{\text{Время}_{\text{пар}}(P)} = \frac{\text{Время}_{\text{посл}}}{\left(\alpha + \frac{1-\alpha}{P}\right) \cdot \text{Время}_{\text{посл}}} = \frac{1}{\alpha + \frac{1-\alpha}{P}} \approx \frac{1}{\alpha}$$

Идеальный для распараллеливания алгоритм не должен содержать последовательной части

Мера производительности



FLOPS – **F**loating point **O**perations per **S**econd – количество операций с плавающей запятой за секунду

Пиковая производительность

Оценка производителя оборудования исходя из архитектуры процессора

100%



Тестовая производительность

измеренная на одной и той же специально для этого написанной тестовой программе

80% - 60%



Пользовательская производительность

программы, написанной для решения научных или инженерных задач

15% - 5%





Мера производительности

FLOPS – **F**loating point **O**perations per **S**econd – количество операций с плавающей запятой за секунду

Пиковая производительность

Оценка производителя оборудования исходя из архитектуры процессора

100%



Тестовая производительность

измеренная на одной и той же специально для этого написанной тестовой программе

80% - 60%



Обычная производительность

При простом распараллеливании последовательной программы

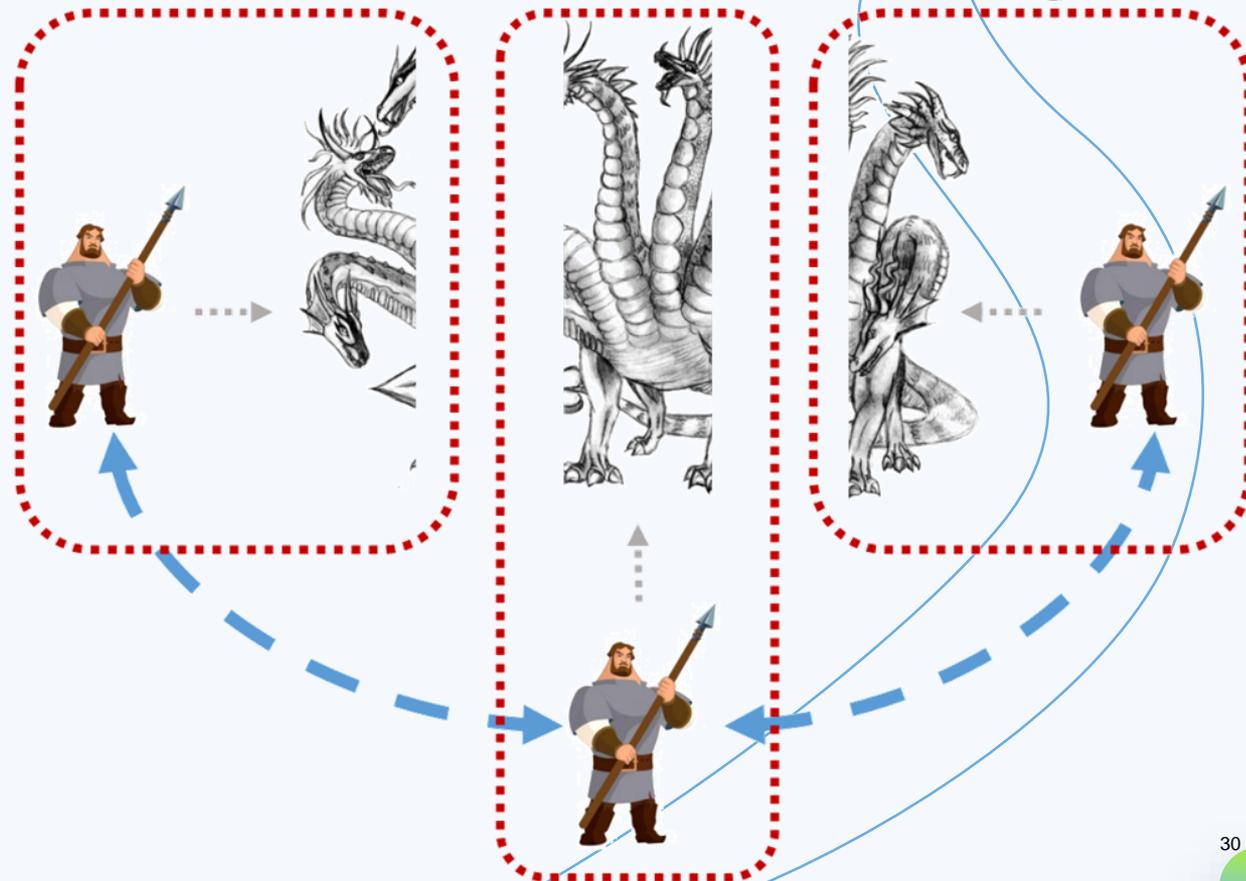
<1% !!!



Уровни распараллеливания – 1

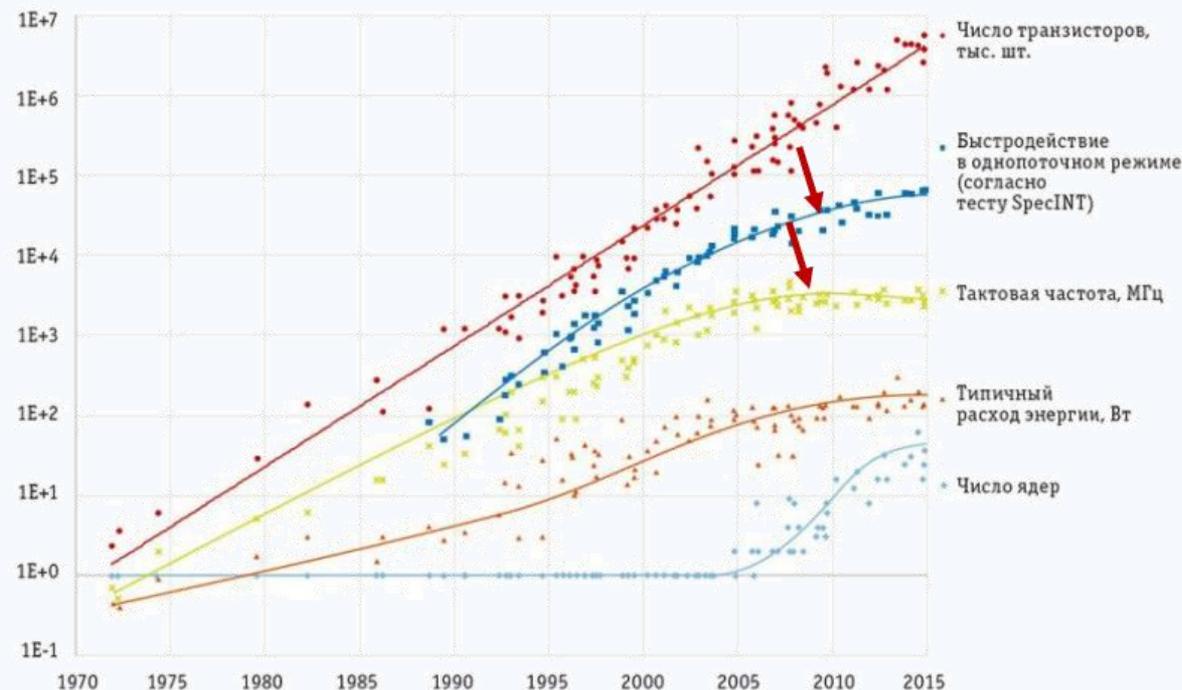


MPI
распределённая
память





После 2005 что-то пошло не так...

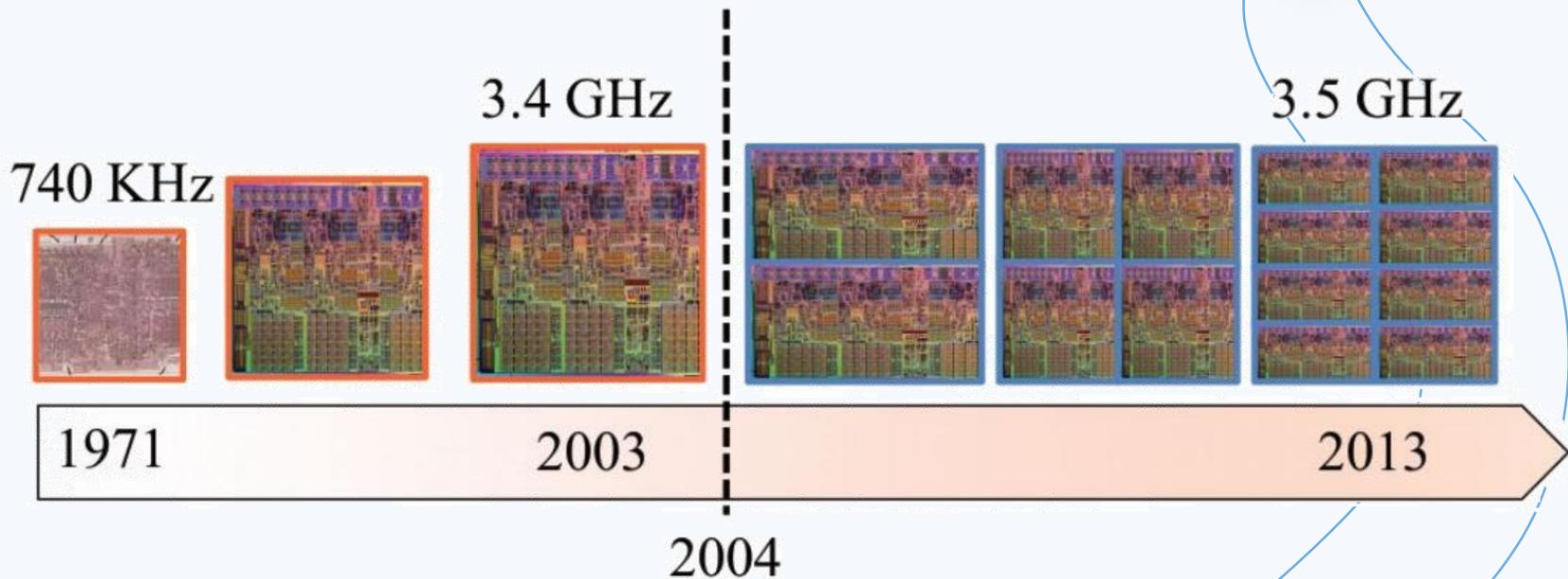


Теория масштабирования Деннарда перестала работать из-за перегрева микросхем (токи утечки нагревают микросхему).

Рост частоты процессоров остановился.

Новый процессор **перестал** давать заявленный прирост производительности на **старой** программе

Много ядер вместо одного



Чтобы считать быстрее надо:

- **более быстрое ядро**

Чтобы считать быстрее надо:

- **более быстрое ядро**
- **больше ядер**



Общая память – OpenMP

OpenMP – **Open Multi-Processing** — открытый стандарт для распараллеливания программ на общей памяти одного процесса

Стандарт даёт описание совокупности:

- директив компилятора
- библиотечных процедур
- переменных окружения

необходимых для программирования многопоточных приложений на многопроцессорных системах с общей памятью



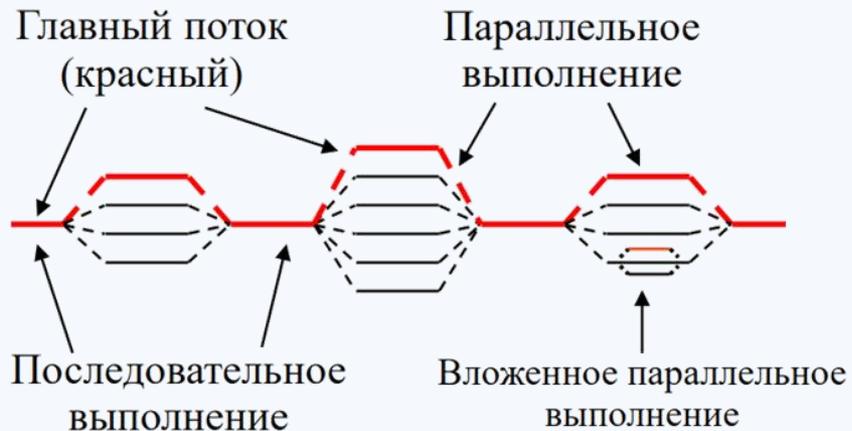
OpenMP-1.0 – 1997, OpenMP-2.0 – 2000, OpenMP-3.0 – 2008,

OpenMP-4.0 – 2013, OpenMP-4.5 – 2015, OpenMP-5.0 – 2018, **OpenMP-5.2**

Программные модели OpenMP

Модель Fork – Join

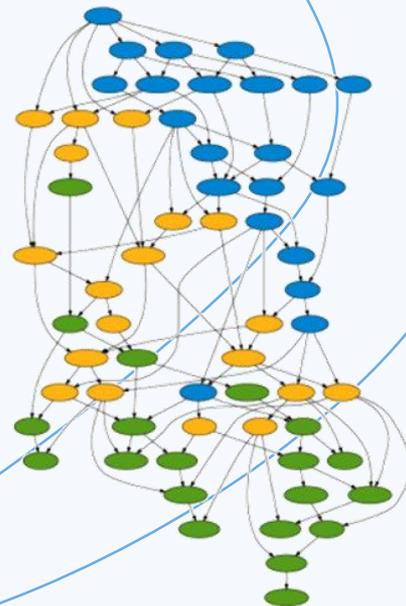
Разветвление – Объединение



Модель Task

Граф заданий

Исполнение заданий по готовности других заданий

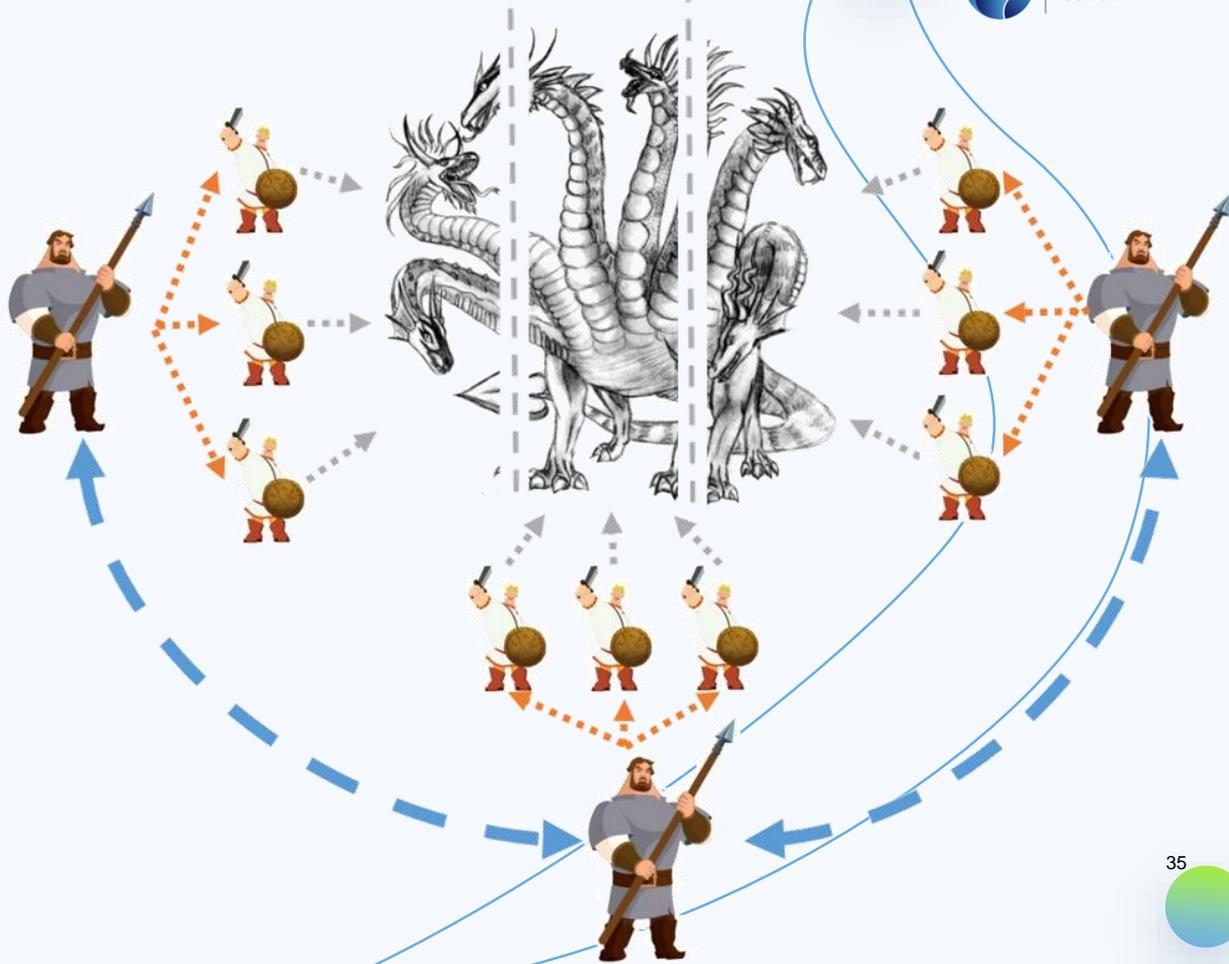


Уровни распараллеливания – 1 – 2



MPI
распределённая
память

OpenMP
общая память



Уровни распараллеливания – 1 – 2 – 3

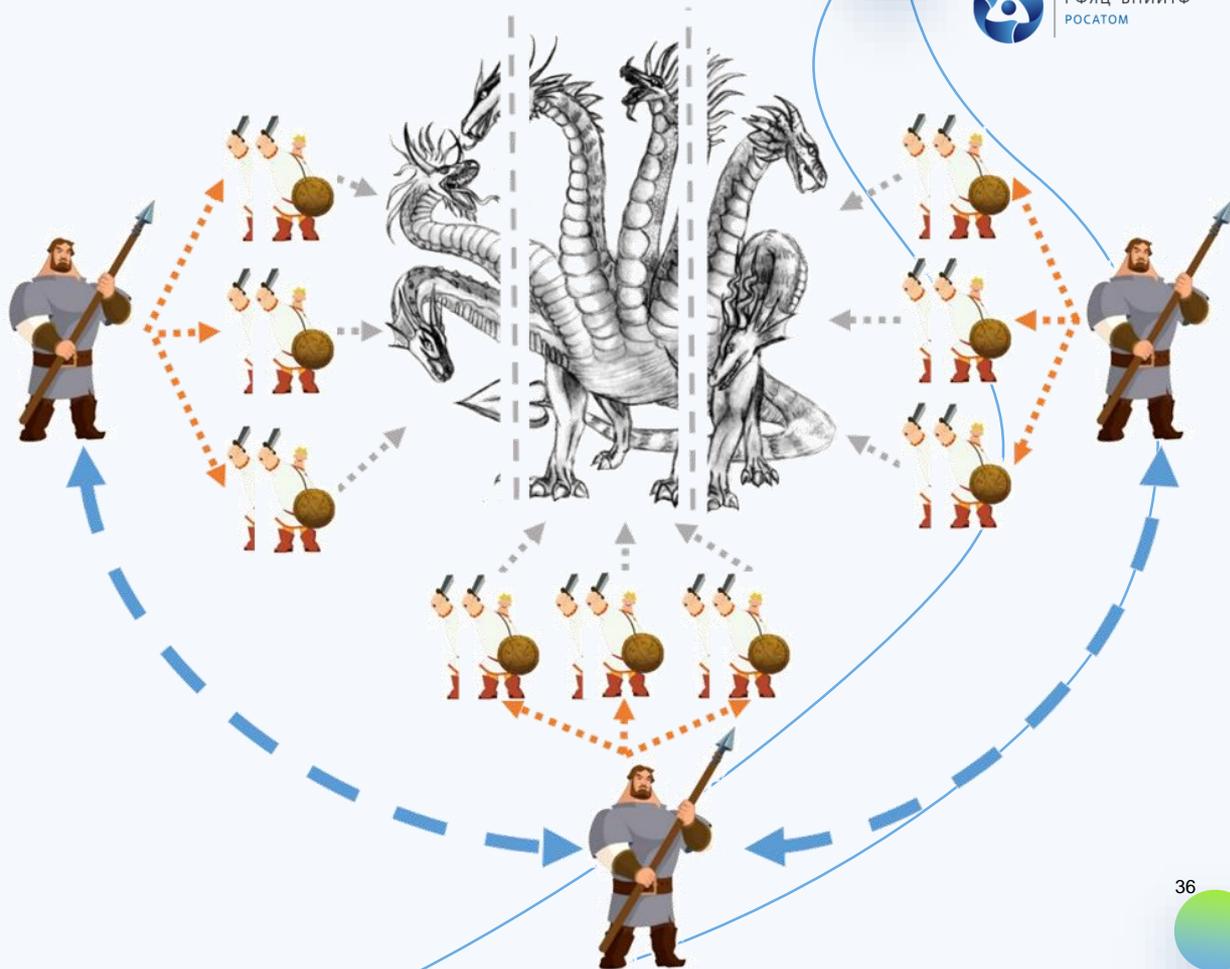


РФЯЦ-ВНИИФ
РОСАТОМ

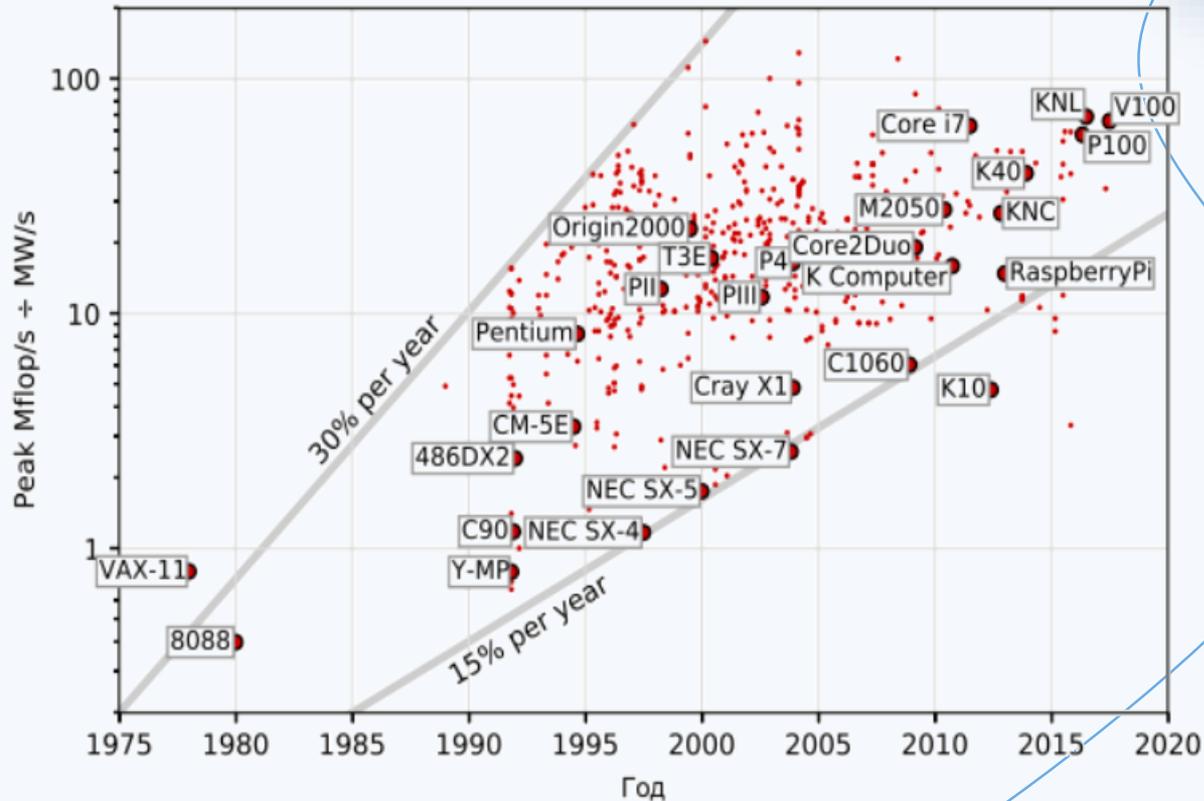
MPI
распределённая
память

OpenMP
общая память

Векторизация
внутри ядра



«Стена памяти»

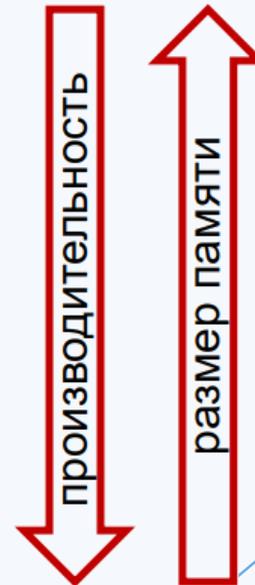
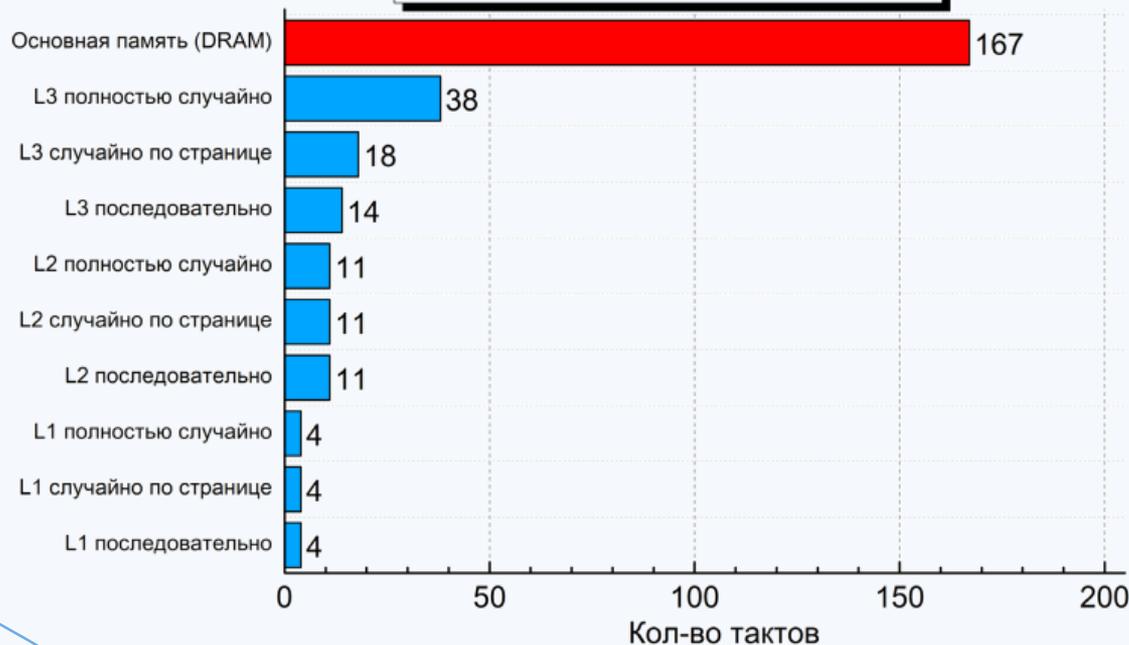


Разница в росте производительности за 45 лет **>540 раз!!!**

Иерархическая память современных процессоров



167 тактов = 2672 DP-FLOPS

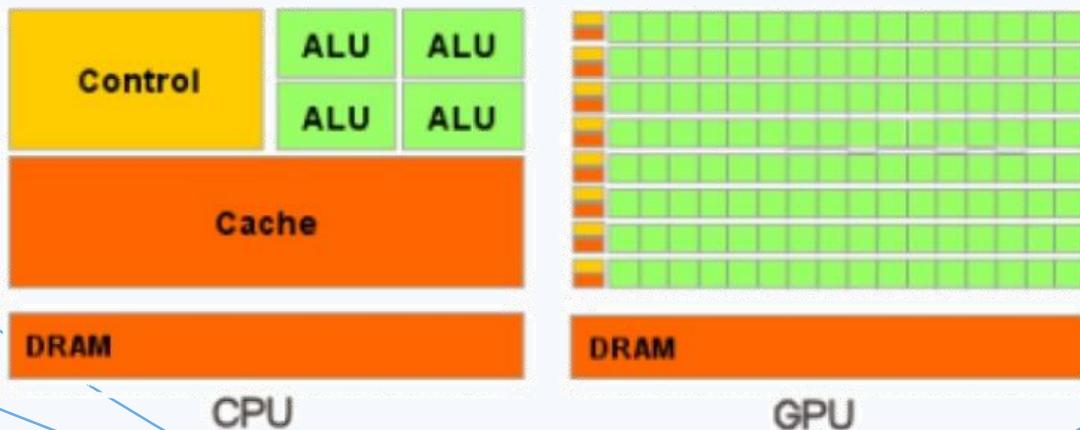


Доступ к данным в L3 в **10 раз** быстрее чем в ОП

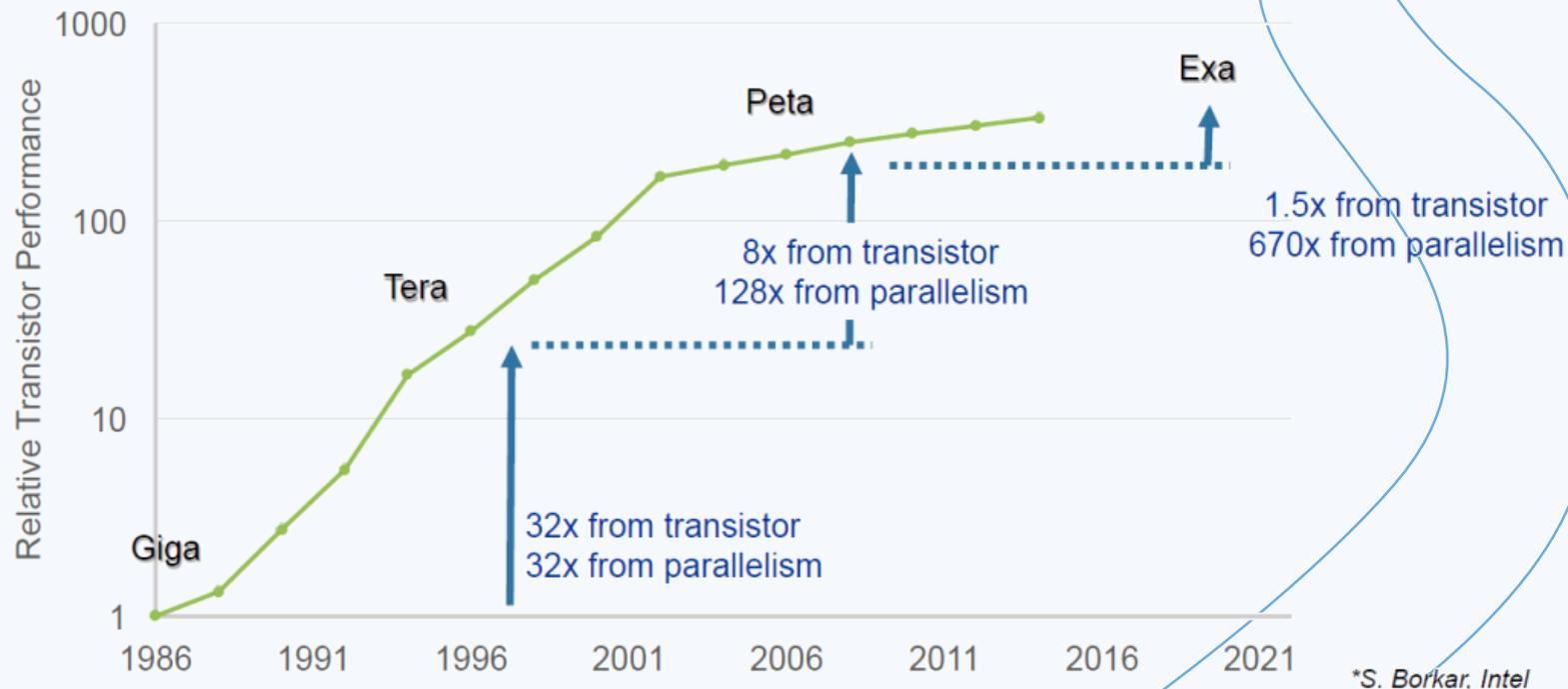
Откуда GPU в супервычислениях?



- **GPU** (**G**raphics **P**rocessing **U**nit) – адаптированный под работу с графикой процессор
- Большая часть площади GPU занята элементарными модулями (ALU, FPU, Load, Store)
- Устройство управления (Control) – существенно проще чем у CPU



В чем основной вызов для софта?



Весь прирост производительности экса-ВВС достигается за счёт **параллелизма**, причем большая его часть будет внутри **узла**

Инструменты разработки

PMR Core (17)	Compilers and Support (7)	Tools and Technology (11)	xSDK (16)	Visualization Analysis and Reduction (9)	Data mgmt, I/O Services, Checkpoint restart (12)	Ecosystem/E4S at-large (12)
QUO	openarc	TAU	hypr	ParaView	SCR	mpiFileUtils
Papyrus	Kitsune	HPCToolkit	FieSCI	Catalyst	FAODEL	TriBITS
SICM	LLVM	Dyninst Binary Tools	MFEM	VTK-m	ROMIO	MarFS
Legion	CHiLL autotuning comp	Gotcha	Kokkoskernels	SZ	Mercury (Mochi suite)	GUFI
Kokkos (support)	LLVM openMP comp	Caliper	Trilinos	zfp	HDF5	Intel GEOPM
RAJA	OpenMP V & V	PAPI	SUNDIALS	VisIt	Parallel netCDF	BEE
CHAI	Flang/LLVM Fortran comp	Program Database Toolkit	PETSс/TAO	ASCENT	ADIOS	FSEFI
PaRSEC*		Search (random forests)	libEnsemble	Cinema	Darshan	Kitten Lightweight Kernel
DARMA		Siboka	STRUMPACK	ROVER	UnifyCR	COOLR
GASNet-EX		C2C	SuperLU		VeloC	NRM
Qthreads		Sonar	ForTrilinos		IOSS	ArgoContainers
BOLT			SLATE		HXHIM	Spack
UPC++			MAGMA			
MPICH			DTK			
Open MPI			Tasmanian			
Umpire			Ginkgo			
AML						

- PMR
- Tools
- Math Libraries
- Data and Vis
- Ecosystems and delivery

Legend



Критические аспекты алгоритмов экза-эры

- **Минимизация точек синхронизации:**
отказ от fork-joint модели
- **Алгоритмы с минимизацией обменов:**
использование алгоритмов, которые имеют меньше точек обменов
- **Смешивание методов разной точности:**
2x в арифметике и перемещении за счет использования float
- **Автоматическая оптимизация:**
современные процессоры очень сложные, необходимы «умные решения» в программах, которые позволяют адаптироваться к «железу»
- **Автоматическое восстановление после отказа:**
реализация алгоритмов которые могут восстанавливаться после отказа узла
- **Воспроизводимость результатов:**
в настоящий момент гарантировать данный тезис невозможно, но работа над этим ведется



- **Самые мощные** современные **суперкомпьютеры** имеют **сложные архитектуру** и **средства программирования**: ожидается, что это сложность будет только возрастать
- **Научные и инженерные приложения**, разработанные для таких систем, также имеют достаточно **сложную структуру**
- Требуется большое число специалистов высокого класса, которые будут двигать высокопроизводительные параллельные вычисления вперед

Интересные прикладные задачи



- 1)** Решить СЛАУ $\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \end{bmatrix} [x_1] = [11/6]$, $\begin{bmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/4 \end{bmatrix} [x_2] = [13/12]$, $\begin{bmatrix} 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{bmatrix} [x_3] = [47/60]$ и возмущенную (с погрешностью 0.0001 в свободных членах) $\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \end{bmatrix} [x_1] = [11/6 + 0.0001]$, $\begin{bmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/4 \end{bmatrix} [x_2] = [13/12 + 0.0001]$, $\begin{bmatrix} 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{bmatrix} [x_3] = [47/60 + 0.0001]$. (Решение возмущенной $x_3 \approx 0.9949$ (-0.51%) $x_2 \approx 1.3368$ (+33.68%) $x_1 \approx 0.0629$ (-93.71%)) придумать способ улучшения решения?
- 2)** Имеется 4096 целых чисел, придумать алгоритм сортировки по возрастанию максимально использующий 2048 вычислителей на общей памяти.
- 3)** Есть 10 кроликов и 1000 бутылок вина. В одной бутылке вино отравлено. Кролики могут пробовать вино, и если они отравлены, то умрут. Как за минимальное количество дней можно определить, в какой бутылке отравленное вино?
- 4)** Есть 100 комнат, каждая из которых изначально тёмная. Каждый раз мимо комнат проходит человек и нажимает выключатель в каждой комнате, номер которой делится на его номер (например, второй человек переключает свет в комнатах 2, 4, 6, ...). Всего проходит 100 человек. В каких комнатах в конце останется свет включён?
- 5)** В социальной сети 25 пользователей. Известно, что в каждой группе из трёх человек хотя бы двое знакомы. Докажите, что существует хотя бы один пользователь, у которого не менее 12 друзей.

**Спасибо за
внимание**

