

К РАЗРАБОТКЕ УЧЕБНЫХ КУРСОВ ПО ТЕМАТИКЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО ИНЖИНИРИНГА

Ю.Я. Болдырев, К.Ю. Замотин, Е.П. Петухов, М.А. Чурилова

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Рассматриваются вопросы разработки учебных курсов, предназначенных для подготовки выпускников высшей технической школы к широкому применению суперкомпьютерных технологий в области инженерного анализа и проектирования.

Прежде чем перейти к рассмотрению процесса разработки учебных курсов, необходимо описать ключевые понятия – «суперкомпьютерные технологии» и «суперкомпьютерный инжиниринг». В работе [1] суперкомпьютерные технологии определяются как триада процессов – разработка суперЭВМ, разработка системного и прикладного программного обеспечения (ПО) и совокупность предметных областей их использования. Под суперкомпьютерным инжинирингом понимаются знания и технологии применения суперкомпьютеров, на основе которых создаются конкурентоспособные машины, агрегаты, системы и прочая продукция. Такое определение суперкомпьютерного инжиниринга полностью попадает в сегмент суперкомпьютерных технологий, как один из его наиболее наукоемких прикладных сегментов. Наукоемкость здесь упоминается с целью подчеркнуть, что суперкомпьютерные технологии являются объединяющим началом, связывающим естественные и прикладные (инженерные) науки.

Рассмотрим примеры, тактику и стратегию использования компьютерных (суперкомпьютерных) технологий в сфере промышленного производства в наиболее развитых странах мира, основываясь на публикациях последних лет. В работе [2] приведен ретроспективный анализ применения компьютерных технологий за последние 30–40 лет, который показывает, что такие технологии стали не только неотъемлемой частью практически любого производства, но и его интегрирующим ядром на основе PLM (Product Lifecycle Management) технологий. Это ядро определяет все стороны производства, начиная от задач, связанных непосредственно с созданием новых изделий, и до его обслуживающих составляющих (планирование, поставки комплектующих, экономика предприятия и т.д.). В рамках данной статьи нас в первую очередь интересует первая группа задач, связанная с созданием новых изделий на основе новых подходов инженерного анализа.

Как же эти новые подходы отразились на самом процессе производства и как их последствия должны повлиять на процесс подготовки кадров в высшей школе? Эти вопросы обсуждаются в работе «Современное инженерное образование» [3], где авторы пособия утверждают, что во многих отраслях производства произошла полная смена технологических цепочек разработки. Речь идет не только о широком внедрении компьютеров в производство, но и о смене парадигмы всей разработки. В первую очередь имеется в виду процесс параллельного проектирования, сформировавшийся в последние десятилетия. Суть его состоит в том, что проектирование изделия ведется одновременно разными группами разработчиков. При этом каждая группа отвечает либо за разработку своего сегмента изделия, либо за анализ эффективности уже разработанных другими группами сегментов. Весь процесс разработки изделия реализуется на общей

базе данных предприятия, поэтому очевидно, что продуктивность работы напрямую зависит от имеющихся вычислительных мощностей.

Второй немаловажный аспект – это переход в естественно-научном и инженерном анализе к решению междисциплинарных задач. На сегодняшний день ставятся и решаются такие классы задач, решение которых не представлялось возможным 15-20 лет тому назад. Эти задачи во многих сферах практики приближают нас к описанию реального физического мира. Поэтому именно научно- и учебно-методические работы, посвященные постановке и решению междисциплинарных задач, определяют тенденции и направления разработки учебных курсов по тематике суперкомпьютерного инжиниринга [5, 6].

Следует отметить, что переход от компьютерного инжиниринга к суперкомпьютерному связан с использованием параллельных вычислительных технологий [4, 7-9], то есть с переходом к совершенно другому классу вычислительных задач. Умение поставить задачу, в том числе и междисциплинарную, для решения на суперЭВМ составляет фундаментальную основу современного естественно-научного и инженерного знания.

Чтобы выделить основные необходимые курсы по тематике суперкомпьютерного инжиниринга, рассмотрим отрасли инженерного знания, в которых они будут применяться. В каждой из крупных областей (механика жидкости и газа, механика твердого и деформируемого тела и др.) имеется свой, присущий только данной области, блок математических моделей и технологий, составляющих ее ядро. Например, для задач горения газов и их смесей таковыми являются модели газовой динамики и модели турбулентности. Для задач, связанных с расчетами прочности машин и механизмов, такое ядро составляют уравнения теории упругости и модели механики конструкций. Таким образом, фундаментальные основы каждой из отраслей составляют теоретические и экспериментальные методы построения математических моделей, описывающих те или иные явления в данной области.

Каждой из перечисленных отраслей присущи свои особенности применения суперкомпьютерных технологий как в инженерных, так и в естественно-научных расчетах. Например, в прикладных задачах аэрогидродинамики одной из важнейших проблем является проблема описания турбулентности. Именно она была одной из тех проблем, что стимулировали развитие высокопроизводительных вычислительных технологий. Приведем таблицу из работы [10], иллюстрирующую соотношение вычислительных ресурсов и перспективы практического применения различных подходов к моделированию турбулентных течений. В табл. 1 приведены наиболее распространенные модели турбулентности, именуемые в англоязычной литературе Direct Numerical Simulation (DNS) – прямое численное моделирование, Large Eddy Simulation (LES) – метод моделирования крупных вихрей, Detached-Eddy Simulation (DES) – метод моделирования отсоединенных вихрей и, наконец, Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) – уравнения Навье–Стокса осредненные по Рейнольдсу [11].

Помимо фундаментальных основ инженерного знания в виде математических моделей и методов вычислительной математики в тех или иных отраслях, для применения суперкомпьютеров инженерам необходимо знать методы постановки задачи на суперкомпьютере. Например, к ним относится декомпозиция задачи или разбиение ее на части, каждая из которых обрабатывается отдельным вычислительным узлом или одним из его ядер. От решения этой проблемы весьма существенно зависит сходимость вычислительного процесса и его продолжительность.

Таблица 1. Перспективы практического применения различных подходов к моделированию турбулентных течений

Метод	Необходимое число узлов сетки	Необходимое число шагов по времени	Год готовности ¹
3D Steady RANS	10^7	10^3	1985
3D Unsteady RANS	10^7	$10^{3.5}$	1995
DES	10^8	10^4	2000
LES	$10^{11.5}$	$10^{6.7}$	2045
DNS	10^{16}	$10^{7.7}$	2080 ²

Является ли поиск решения, удовлетворяющего определенным начальным и граничным условиям (для задач, связанных с уравнениями математической физики), единственной задачей суперкомпьютерного инжиниринга? Предположим, что мы получили решение нашей задачи для какой-то совокупности определяющих параметров. Таких параметров может быть множество, и они могут иметь самый разнообразный характер. Например, это могут быть характерные размеры или их совокупность, различные формы поверхности и так далее. Тогда перед разработчиком встает вопрос: насколько удачно выбраны параметры для того, чтобы характеристики системы были наилучшими? То есть оптимально ли построена рассматриваемая система? Таким образом, мы приходим к необходимости включения оптимизационных задач в область применения суперкомпьютерного инжиниринга. Примером такой проблемы является задача оптимизации формы профиля крыла самолета для получения максимальной подъемной силы.

В качестве характерного примера междисциплинарной задачи, требующей для своего решения применения суперкомпьютерных технологий, рассмотрим разработку гидротурбин в энергомашиностроительной отрасли. Мощные гидротурбины современных гидроэлектростанций – это высокотехнологичные изделия. При наличии жесткой конкуренции на мировом рынке ведется борьба за доли процентов КПД гидромашин. КПД определяется геометрией проточной части гидротурбины (рабочее колесо, направляющий аппарат и т.д.), поэтому для его повышения необходима оптимизация геометрии, которую невозможно провести только с помощью физического эксперимента. Требуемое оптимальное профилирование всех элементов проточной части, с точки зрения математики, есть связанная пространственная задача Лагранжа вариационного исчисления [8], где в качестве связей выступают дифференциальные уравнения механики вязкой жидкости. Также необходимо учесть турбулентный характер течения. Более глубокий анализ показывает, что при испытываемых нагрузках рабочее колесо турбины изнашивается под воздействием кавитации. Таким образом, проблема становится междисциплинарной – при расчете кроме уравнений турбулентного движения жидкости необходимо учесть процессы кавитации на поверхности металла, включая проблемы, связанные с физикой металлов. Также нельзя забывать про процессы упруго-гидродинамического взаимодействия рабочего колеса с потоком жидкости, которые при имеющемся уровне давлений (многие десятки атмосфер) могут оказаться существенными.

Таким образом, полномасштабная корректная физико-математическая постановка задачи об описании течения в проточном тракте гидротурбины представляет собой совокупность связанных начально-краевых задач математической физики. При этом зада-

¹ Под готовностью подразумевается возможность расчета одного варианта в течение суток на самых мощных из доступных компьютеров.

² На компьютере с производительностью 1 Тфлоп/с время расчета составляет 5000 лет.

ча решается в весьма сложной по своей геометрии области и для ее описания необходимо разбиение области решения на многие миллионы ячеек (конечных объемов). В работах с ЛМЗ в 2006-2007 годах [6] вычисления во всей проточной части проводились на 5,6 миллионах конечных объемов, причем в каждом конечном объеме вычисляются три компоненты вектора скорости и давление, плюс две составляющие энергии турбулентных пульсаций. Также при решении междисциплинарных задач дополнительно необходимо знать температуру воды. Таким образом, число неизвестных доходит уже до десятков миллионов.

Таким образом, мы видим, что в результате необходимо разрабатывать систему курсов, в рамках которых студентам даются представления не только о современных суперкомпьютерах и их возможностях, но и множество материала для постановок и решения вычислительно ресурсоемких междисциплинарных задач математического моделирования. В таких дисциплинах должны рассматриваться и современная концепция математического моделирования, роль и место в ней высокопроизводительных вычислительных систем. И, конечно, курсы должны быть направлены на освоение учащимися подходов к решению широкого круга междисциплинарных прикладных инженерных задач, а также на приобретение ими начальных знаний по методам и подходам применения передовых программных комплексов для инженерного и естественно-научного анализа в их версиях для суперкомпьютеров.

Таким образом, главная цель создаваемых курсов – привитие учащимся практических навыков работы (в естественно-научном и инженерном анализе) на мощных вычислительных системах.

Авторы благодарят компанию Intel за поддержку работ в данной области.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.B37.21.0594.

Литература

1. Болдырев Ю.Я., Петухов Е.П. Суперкомпьютерные технологии и их приложения. СПбГПУ: Изд-во Политехн. ун-та. 2011. 88 с.
2. Боровков А.И., Бурдаков С.Ф. и др. Компьютерный инжиниринг. Учебное пособие. СПб.: Изд. СПбГПУ, 2012. 93 с.
3. Боровков А.И., Бурдаков С.Ф. и др. Современное инженерное образование. Учебное пособие. СПб.: Изд. СПбГПУ, 2012. 81 с.
4. High Performance Computing in Science and Engineering '11. Transactions of the High Performance Computing Center (Editors Wolfgang E. Nagel, Michael M. Resch, Dietmar V. Kröner). Stuttgart (HLRS), 2011. P. 649.
5. Болдырев Ю.Я. Суперкомпьютерные технологии как современное воплощение междисциплинарного подхода в научно-образовательной деятельности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. № 4. 2010. С. 99-106.
6. Болдырев Ю.Я. Роль суперкомпьютерных технологий в инженерном образовании // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. № 162. 2012. С. 9-15.
7. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб.: BHV, 2002. 599 с.
8. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений: Учеб. Пособие. М.: Интернет-Университет Информационных технологий; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. 423 с.

9. Гегель В.П., Фурсов В.А. Лекции по параллельным вычислениям. Самара: Издательство СГАУ, 2009. 163 с.
10. Spalart P.R. Strategies for turbulence modeling and simulations // Int. J. Heat Fluid Flow. 2000. V. 21. P. 252–263.
11. Гарбарук А.В., Стрелец М.Х., Шур М.Л. Возможности и ограничения современных подходов к моделированию турбулентности в аэродинамических расчетах. Учебное пособие. СПбГПУ, 2012. 88 с.