

А. Б. Терентьев, С. А. Савихин, С. А. Золотов,  
А. А. Панкратов

## Об одном высокомасштабируемом методе численного решения уравнений математической физики и его реализации на программном комплексе CUMPS

Аннотация. В данной статье представлен метод эффективного численного решения широкого круга прикладных задач на высокопроизводительных вычислительных системах и о его реализации на специальном программном комплексе CUMPS.

*Ключевые слова и фразы:* уравнение Больцмана, суперкомпьютер, параллельные вычисления.

### 1. Актуальность проблемы

На сегодняшний день одной из критических проблем вычислительных методов естественных наук является обеспечение масштабируемости численных решений. Классические методы численного моделирования в физике, химии, биологии, геологии, астрономии и пр. основаны, как правило, на решении систем дифференциальных уравнений (в общем случае нелинейных). Этот подход имеет длинный ряд общеизвестных проблем: нерегулярность вычислительного метода, громоздкие математические выкладки, связанные с описанием граничных и краевых условий и неоднородностей среды, зачастую практическая невозможность одновременного описания различных фазовых состояний и/или разнородных физических процессов, вследствие чего все эти методы имеют существенные ограничения по эффективности вычислений на системах, содержащих большое и очень большое количество вычислительных элементов (узлов, процессоров, ядер).

---

© А. Б. Терентьев, С. А. Савихин, С. А. Золотов, А. А. Панкратов, 2013?

© ООО «Научно-исследовательский центр специальных вычислительных технологий», 2013?

© **ПРОГРАММНЫЕ СИСТЕМЫ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ**, 2013?

## 2. Предлагаемое решение

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

Естественно, данный подход имеет и ряд известных проблем: для некоторых уравнений отсутствуют строгие доказательства единственности, использование статистических методов приводит к шумам и др. Однако благодаря интенсивным исследованиям за последнее время в мире для многих случаев получены доказательства корректности либо эффективные способы компенсации этих проблем, а также описаны возможности использования локального подхода при решении многих прикладных задач.

## 3. Области практического применения

Указанный выше метод решения может быть применен к большому числу прикладных задач, в частности: к задачам, связанные с потоками и течениями (токи жидкостей, газов и сыпучих тел, обтекание тел сложной формы, распределение температур и давления в токе жидкости или газа, атмосферные процессы); моделирование лучистого переноса; волновое моделирование, задачи, связанные с моделированием деформации твёрдого тела и распространения изломов,

а также моделирование биологических и социологических процессов. Основным достоинством данного метода является относительно простое совместное решение разнородных (многофазных, многокомпонентных, мультифизических) задач, в том числе с обратной связью.

#### 4. Программный комплекс CUMPS

На сегодняшний день нами разработан масштабируемый решатель для гетерогенного кластера (CPU+GPU), основанный на применении локальных правил, использующий в качестве основы разномасштабный клеточный автомат и позволяющий описывать модели неограниченной сложности (размер модели, количество параметров и сложность локальных правил ограничены только размерами вычислительной системы). Верификация, проведённая на традиционных задачах газо-гидро-тепло-динамики на вычислительных системах среднего масштаба (до 200 GPU), подтвердило корректность решений и практически линейную (свыше 90%) масштабируемость. В настоящее время продолжается тестирование на кластерах большего масштаба (500 и более GPU) и на более сложных задачах, включая уравнения переноса и химические реакции.

При разработке решателя используются только открытые широко распространённые инструменты (C++, OpenCL, MPI), что позволяет без проблем перенести его на практически любую аппаратную платформу, а также использовать как модуль в составе научно-инженерных программных комплексов в различных предметных областях.

#### 5. Первые результаты

В рамках разрабатываемого проекта CUMPS был решён ряд модельных задач:

- (1) обтекание твёрдых тел слабосжимаемой жидкостью;
- (2) моделирование течения в каверне;
- (3) моделирование конвективного течения;
- (4) моделирование теплового (нейтронного) излучения;

а также следующие прикладные задачи:

- (1) моделирование электромагнитного поля в различных слоях атмосферы при молниевом разряде и
- (2) моделирование развития и распространения лесных пожаров.

*Об авторах:*

**Александр Борисович Терентьев**  
e-mail: [ater@ivc.mnov.ru](mailto:ater@ivc.mnov.ru)

**Степан Александрович Савихин**  
e-mail: [savikhin@ivc.mnov.ru](mailto:savikhin@ivc.mnov.ru)

**Сергей Александрович Золотов**  
e-mail: [sergey@ivc.mnov.ru](mailto:sergey@ivc.mnov.ru)

**Антон Александрович Панкратов**  
e-mail: [apankrat@ivc.mnov.ru](mailto:apankrat@ivc.mnov.ru)

*Образец ссылки на эту публикацию:*

А. Б. Терентьев, С. А. Савихин, С. А. Золотов, А. А. Панкратов. *Об одном высокомасштабируемом методе численного решения уравнений математической физики и его реализации на программном комплексе CUMPS* // Программные системы: теория и приложения : электрон. научн. журн. 2013?. Т. 4?, № 4(17)?, с.??-??.

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

A. B. Terent'ev, S. A. Savikhin, S. A. Zolotov, A. A. Pankratov. *On a high scalable method for the numerical solution of the mathematical physics equations and its implementation on the toolchain CUMPS.*

ABSTRACT. This issue describes a method for effective numerical solution of numerous applications on high performance computing systems and its implementation on a special toolchain CUMPS (*in Russian*).

*Key Words and Phrases:* Boltzmann equation, high parallel computing.