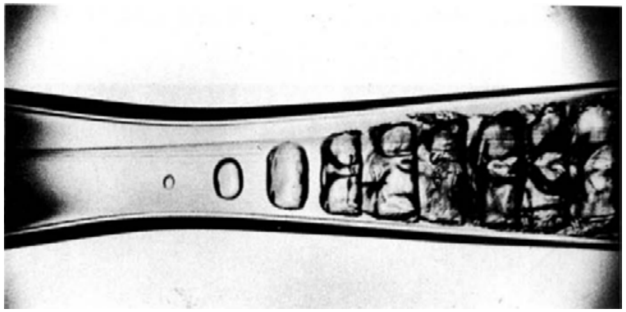
ВНИИА
ПРЕДПРИЯТИЕ ГОСКОРПОРАЦИИ "РОСАТОМ"
ФГУП "ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ АВТОМАТИКИ ИМ. Н.Л. ДУХОВА"

Программный комплекс CSPH&VD^3 с автоматической балансировкой вычислительной нагрузки для параллельного гидродинамического моделирования движения веществ в экстремальных состояниях методом SPH с использованием решения задачи Римана

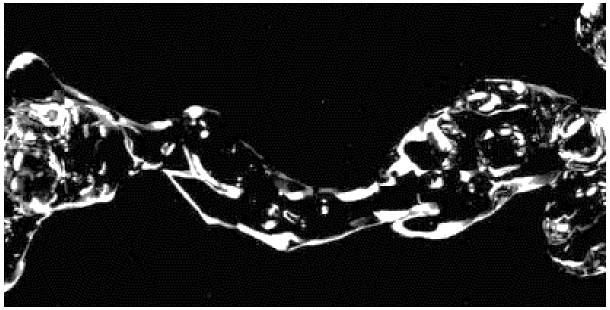
Егорова Мария С., Дьячков С.А., Мурзов С.А., Григорьев С.Ю., Паршиков А.Н., Жаховский В.В.

Цели разработки

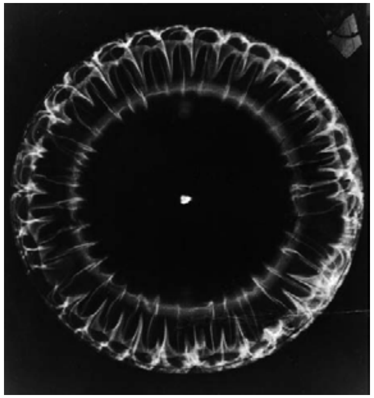
Высокопроизводительное моделирование сред с нестационарными свободными границами и разрывами сплошности



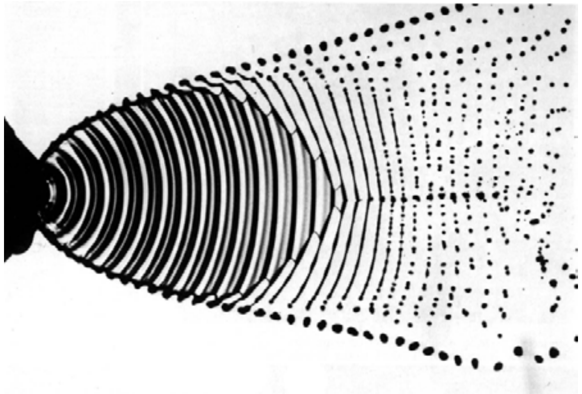
Кавитация [1]



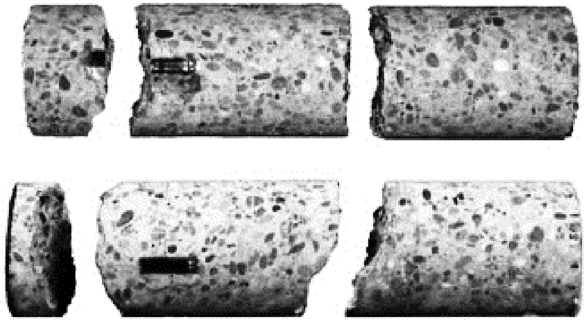
Струеобразование [1]



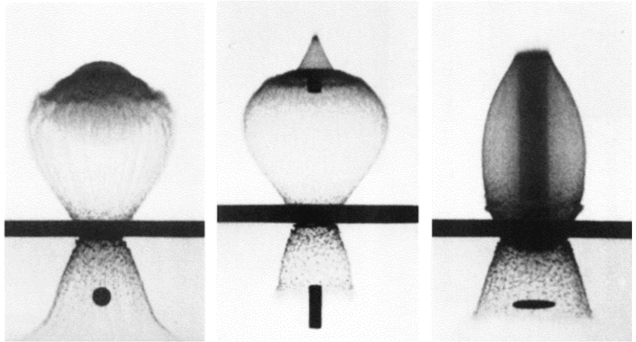
Взрывы [2]



Образование капель [1]



Разрушение [3]



Удар и пробитие [4]

1. M. Van Dyke, *"An album of fluid motion"*, 1982. 2. J.H.S. Lee, *"The detonation phenomenon"*, 2008.
3. H. Schuler et. al. / Int. J. Imp. Eng. 32 (2006) 1635–1650. 4. G.R. Johnson / Int. J. Imp. Eng. 38 (2011) 456-472.

Выбор метода моделирования

Задачи характеризуются следующими *особенност ями*, влияющими на выбор численного метода моделирования:

- сильной неоднородностью пространственного распределения вещества;
- сложной формой движения поверхностей;
- сильными деформациями и разрывами сплошной среды.

Два пути численного решения:

- приближение гомогенной среды + модели межфазного обмена;

Выбор метода моделирования

Задачи характеризуются следующими *особенностями*, влияющими на выбор численного метода моделирования:

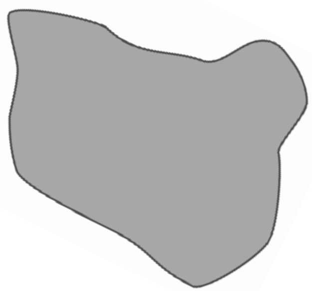
- сильной неоднородностью пространственного распределения вещества;
- сложной формой движения поверхностей;
- сильными деформациями и разрывами сплошной среды.

Два пути численного решения:

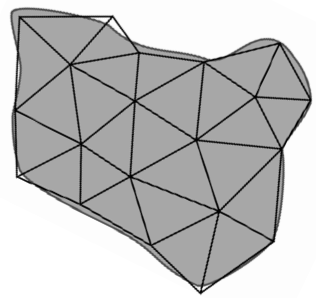
- приближение гомогенной среды + модели межфазного обмена;
- *прямое моделирование с учетом мезоструктуры материалов (мезомоделирование) методами частиц (MD, SPH, ….)*

Методы частиц (бессеточные) vs сеточные методы

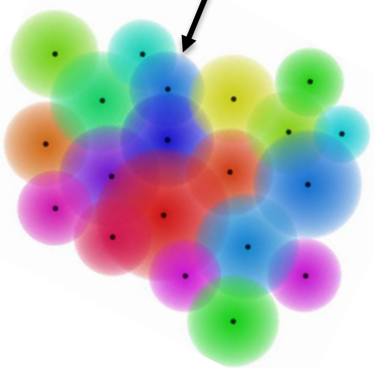
Частица имеет характерный размер («диаметр»), плотность, скорость, энергию и т.д.



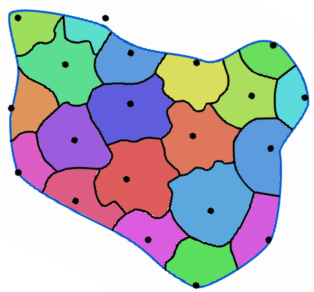
Образец



Сетка



Частицы в методе



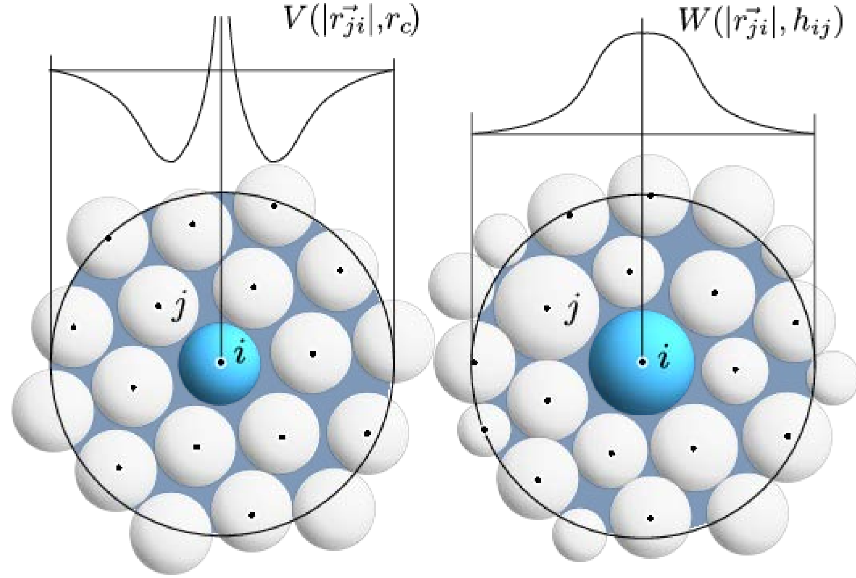
Частицы фактически

Параллелизация для методов частиц

Мы разработали и применили алгоритм балансирующей декомпозиции [5], который подходит для *любого метода частиц с ограниченной областью взаимодействия* и позволяет нам впервые решить множество задач, требующих высокой подробности разрешения расчетной области.

Ограниченная область взаимодействия означает, что все взаимодействия между частицами *локализованы в пространстве*, т.е.

- каждая частица взаимодействует с небольшим числом соседей (MD)
- производные в частице вычисляются через значения в соседних частицах (SPH)



MD среда *SPH среда*

---

5. S. Dyachkov et al. / Lobachevskii Journal of Mathematics 2017, vol. 38, no. 5, pp. 893–897.

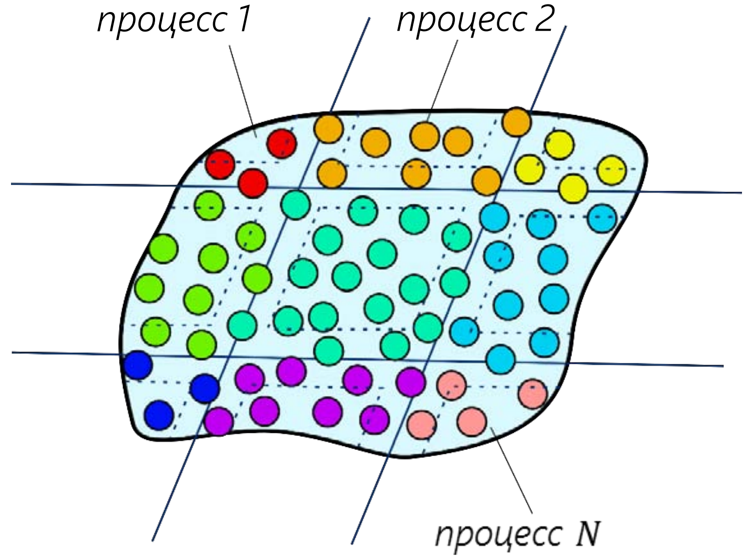
Проблемы высокопроизводительных вычислений для массивно-параллельных архитектур

Массивно-параллельная архитектура – архитектура вычислительной системы с физически распределенной памятью.

Распределенная память → физически разделенные данные.

Задачи декомпозиции:

- Как оптимально распределить данные?
- Как распределить данные так, чтобы необходимое время на обмен было минимизировано?
- Что делать, если процессы заканчивают расчет каждого шага не одновременно?



Концепция пространственной декомпозиции между процессами

Проблемы высокопроизводительных вычислений для массивно-параллельных архитектур

Массивно-параллельная архитектура – архитектура вычислительной системы с физически распределенной памятью.

Распределенная память → физически разделенные данные.

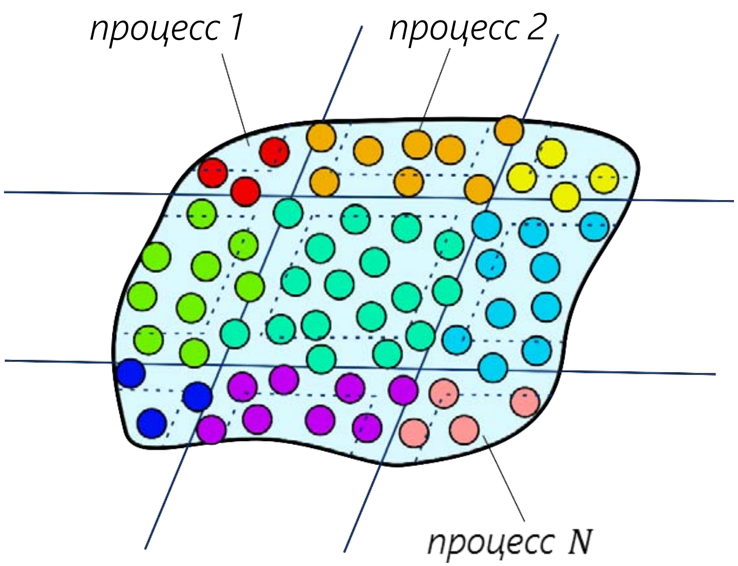
Задачи декомпозиции:

- Как оптимально распределить данные?

  прост ранст венно

- Как распределить данные так, чтобы необходимое время на обмен было минимизировано?

- Что делать, если процессы заканчивают расчет каждого шага не одновременно?



Концепция пространственной декомпозиции между процессами

Проблемы высокопроизводительных вычислений для массивно-параллельных архитектур

Массивно-параллельная архитектура – архитектура вычислительной системы с физически распределенной памятью.

Распределенная память → физически разделенные данные.

Задачи декомпозиции:

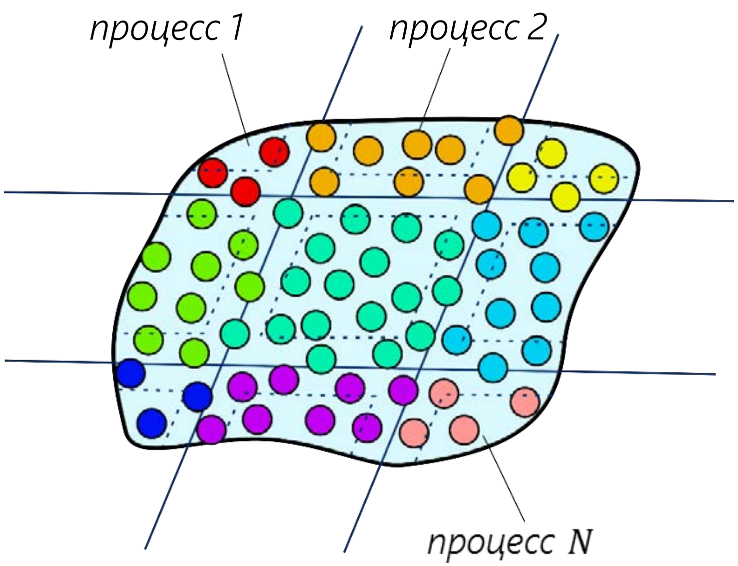
- Как оптимально распределить данные?

  прост ранст венно

- Как распределить данные так, чтобы необходимое время на обмен было минимизировано?

  с минимальной площадью границы

- Что делать, если процессы заканчивают расчет каждого шага не одновременно?



Концепция пространственной декомпозиции между процессами

Проблемы высокопроизводительных вычислений для массивно-параллельных архитектур

Массивно-параллельная архитектура – архитектура вычислительной системы с физически распределенной памятью.

Распределенная память → физически разделенные данные.

Задачи декомпозиции:

- Как оптимально распределить данные?

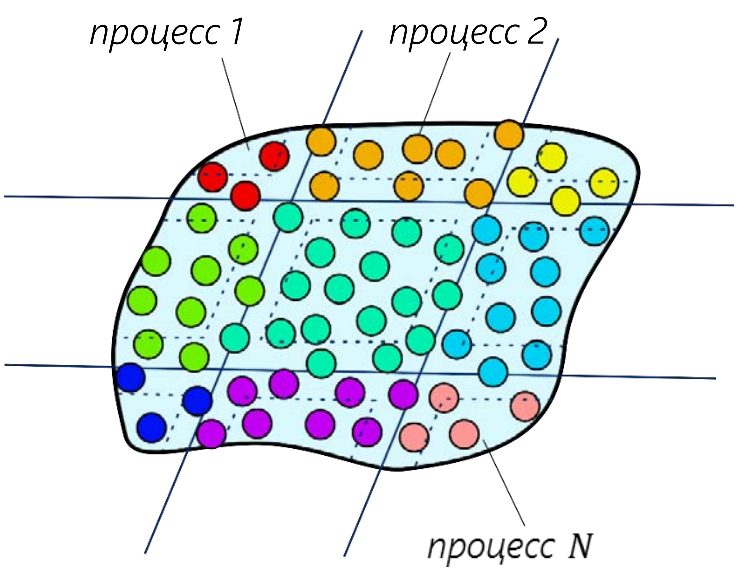
  прост ранст венно

- Как распределить данные так, чтобы необходимое время на обмен было минимизировано?

  с минимальной площадью границы

- Что делать, если процессы заканчивают расчет каждого шага не одновременно?

  т ребует ся алгорит м балансировки, перераспределяющий част ицы

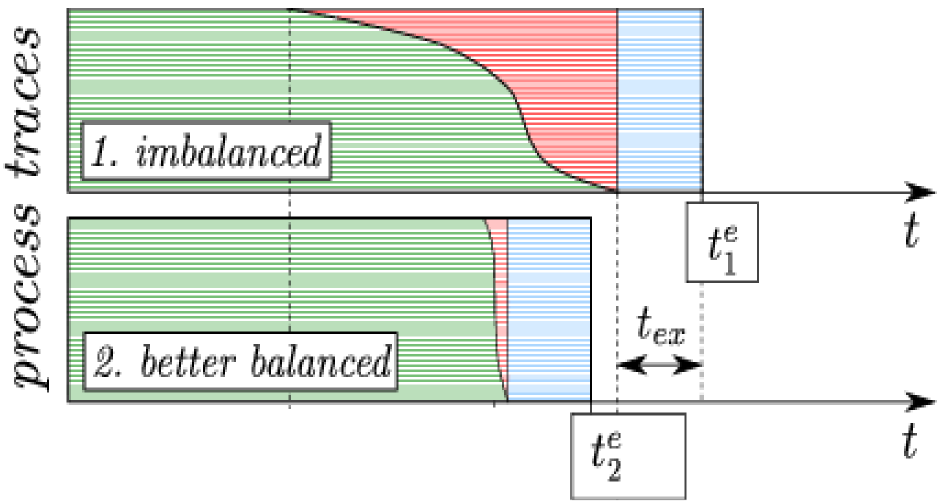


Концепция пространственной декомпозиции между процессами

Минимизация времени расчета при равномерном распределении нагрузки

- Что делать, если процессы заканчивают расчет каждого шага не одновременно?

требуется алгоритм балансировки, перераспределяющий частицы



полезная работа
ожидание
обмен

Трассировка процессов, упорядоченная по «полезной» работе.

- *Чем более равномерно распределена работа во время расчета, тем меньше общее время расчета на шаг.*

Метод SPH с решением задачи Римана, или CSPH

SPH – Smoothed Particles Hydrodynamics

- *Дискрет изация по прост ранст ву:*

Дельта-функция:

$$f(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}')\, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, d\mathbf{x}'$$

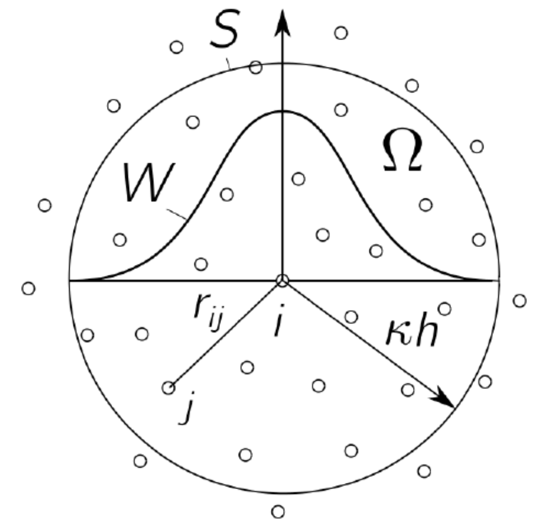
Переход к ядру:

$$f(\mathbf{r}) = \lim_{h \to 0} \int_{\Omega} f(\mathbf{r}')\, W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, h)\, d\mathbf{r}'$$

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \lim_{h \to 0} \int_{\Omega} f(\mathbf{r}') \nabla W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, h)\, d\mathbf{r}'$$

$$\boxed{f(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{\rho_j} f(\mathbf{r}_j)\, W_{ij} + \mathcal{O}(h^2)}$$

$$\boxed{\nabla f(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{\rho_j} f(\mathbf{r}_j) \nabla_i W_{ij} + \mathcal{O}(h^2)}$$



$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \le \kappa h$ - *область действия сглаживающего ядра*

обычно ядро – многочлен.

$$\nabla_i W_{ij} = \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}}{h}$$

SPH – Smoothed Particles Hydrodynamics

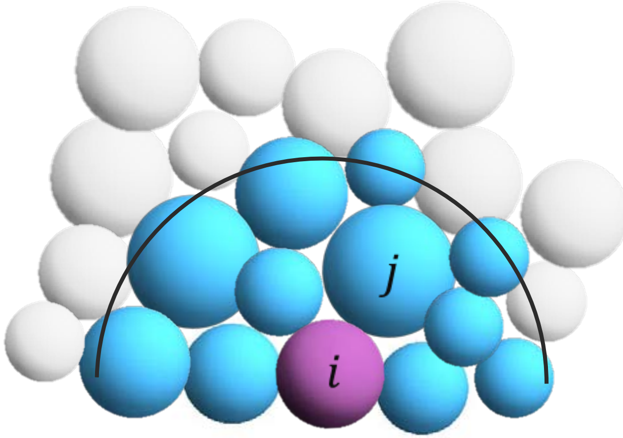
- *SPH-аппроксимация законов сохранения*

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\vec{v_i} - \vec{v_j}) \cdot \nabla_i W_{ij}\,;$$

$$\frac{d\vec{v_i}}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{P_i + P_j}{2} \cdot \nabla_i W_{ij};$$

$$\frac{d(e_i + \frac{v_i^2}{2})}{dt} = \frac{1}{2\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{P_i + P_j}{2} (\vec{v_i} - \vec{v_j}) \cdot \nabla_i W_{ij}.$$

Система замыкается уравнением состояния.



SPH – Smoothed Particles Hydrodynamics

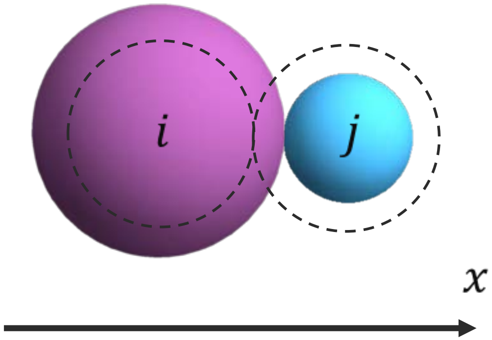
- *SPH-аппроксимация законов сохранения*

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\vec{v_i} - \vec{v_j}) \cdot \nabla_i W_{ij};$$

$$\frac{d\vec{v_i}}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{P_i + P_j}{2} \cdot \nabla_i W_{ij};$$

$$\frac{d(e_i + \frac{v_i^2}{2})}{dt} = \frac{1}{2\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{P_i + P_j}{2} (\vec{v_i} - \vec{v_j}) \cdot \nabla_i W_{ij}.$$

Система замыкается уравнением состояния.



- *Проблема сжатия-расширения частиц*

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \rho_i \frac{m_j}{\rho_j} (v_i - v_j) \cdot W'_{ij} = \boldsymbol{\rho_i} \frac{\boldsymbol{m_j}}{\boldsymbol{\rho_j}} v_{ij} \cdot W'_{ij};$$

$$\frac{d\rho_j}{dt} = \rho_j \frac{m_i}{\rho_i} (v_j - v_i) \cdot W'_{ji} = \boldsymbol{\rho_j} \frac{\boldsymbol{m_i}}{\boldsymbol{\rho_i}} v_{ij} \cdot W'_{ij}.$$

$$(| W'_{ji} = -W'_{ij} |)$$

$$\operatorname{sgn}\left(\frac{d\rho_i}{dt}\right) = \operatorname{sgn}\left(\frac{d\rho_j}{dt}\right)!$$

CSPH = SPH + задача Римана [6]

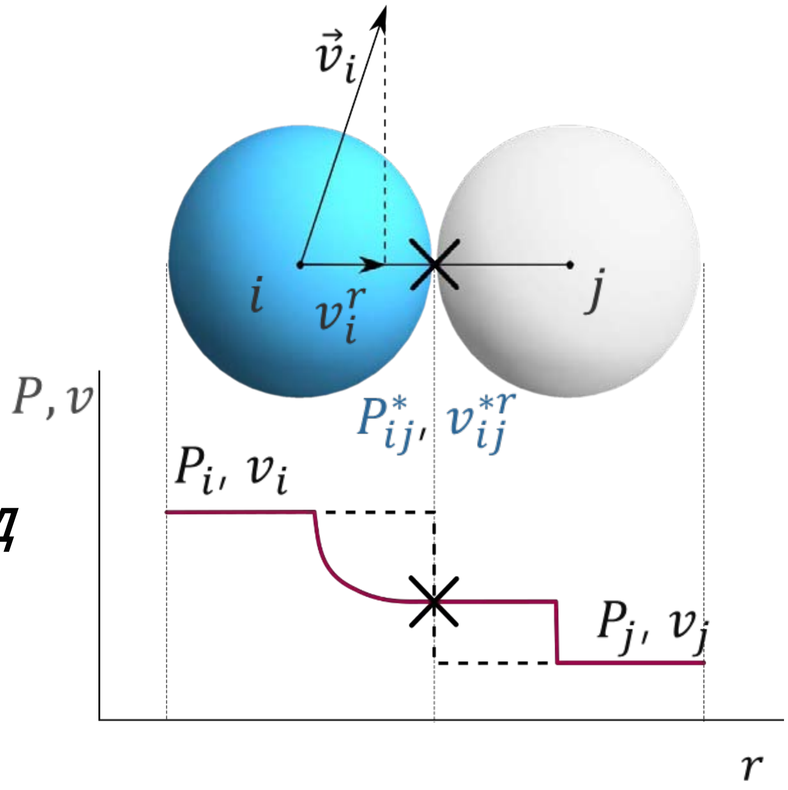
- *SPH-аппроксимация законов сохранения*

$$\frac{d\rho_i}{dt} = 2\rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\vec{v_i} - \overrightarrow{v_{ij}}^*) \cdot \nabla_i W_{ij};$$

$$\frac{d\vec{v_i}}{dt} = -\frac{2}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} P_{ij}^* \nabla_i W_{ij};$$

$$\frac{d(e_i + \frac{v_i^2}{2})}{dt} = \frac{1}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} P_{ij}^* \overrightarrow{v_{ij}}^* \cdot \nabla_i W_{ij}.$$

Система замыкается уравнением состояния.



- *Для упругопласт ических сред*

$$\frac{d\vec{v_i}}{dt} = \frac{2}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \overrightarrow{\sigma_{ij}^*} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}};$$

$$\frac{d(e_i + \frac{v_i^2}{2})}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \overrightarrow{\sigma_{ij}^*} \cdot \overrightarrow{v_{ij}^*} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}.$$

6. A. N. Parshikov and S. A. Medin / J. Comp. Phys., vol. 180, no. 1, pp. 358–382, 2002.

Динамическая декомпозиция по Вороному (VD^3)

Идея [7]

Пост роим на прост ранст ве, занят ом част ицами, диаграмму Вороного.

<u>Определение (Диаграмма Вороного, VD) [8]:</u>

1. Набор точек $\{\mathrm{G}_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}} \in \overline{\Omega}$ назовем центрами (генераторами) диаграммы Вороного.
2. Ячейка диаграммы $\hat{V}_k$ определяется множеством точек, ближайших к G_k:
$$\hat{V}_k = \{\vec{x} \in \Omega : \ |\vec{x} - \vec{g}_k| < |\vec{x} - \vec{g}_l|,$$
$$l = 1, \dots, N_{\hat{V}}, l \neq k\},$$
где $\vec{g}_k$ — радиус-вектор точки G_k.
3. $\{\hat{V}_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$ есть диаграмма Вороного.

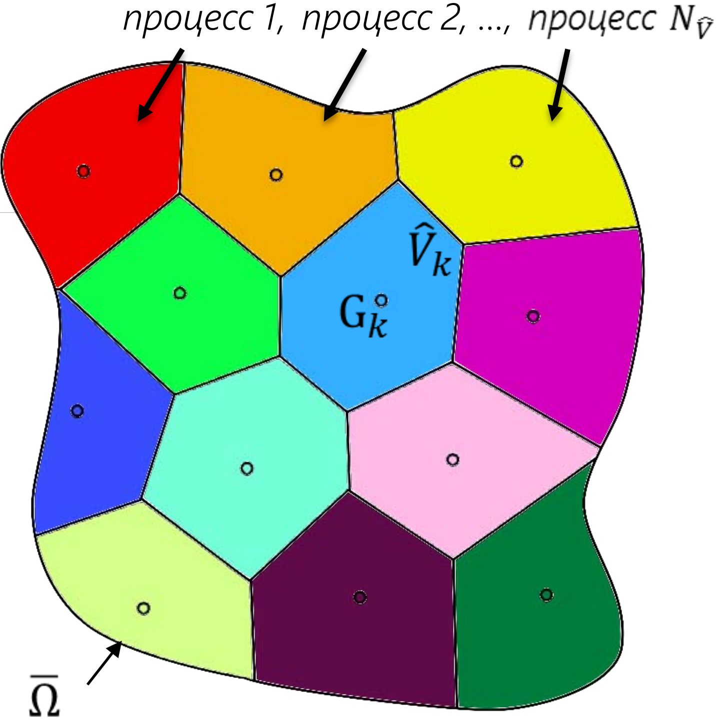
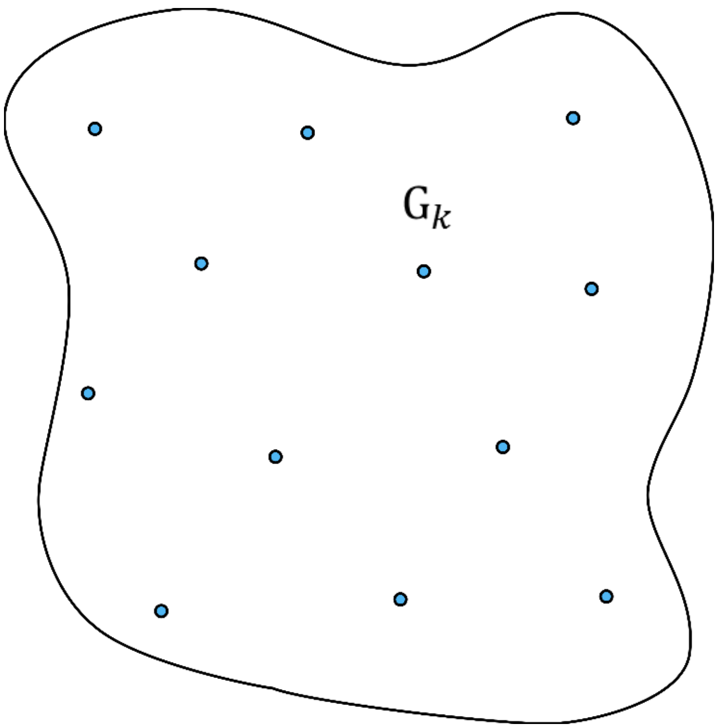


Диаграмма Вороного на замкнутой области $\overline{\Omega}$

Пусть $\mathbf{G}_k$ (а следовательно, $\hat{\mathbf{V}}_k$) двигаются вместе с потоком частиц с поправкой на дисбаланс нагрузки в ячейках.

7. V. Zhakhovskii et al. / CCGrid 2005, vol. 2, pp. 848–854.
8. Q. Du, V. Faber, and M. Gunzburger / SIAM review, vol. 41, no. 4, pp. 637–676, 1999.

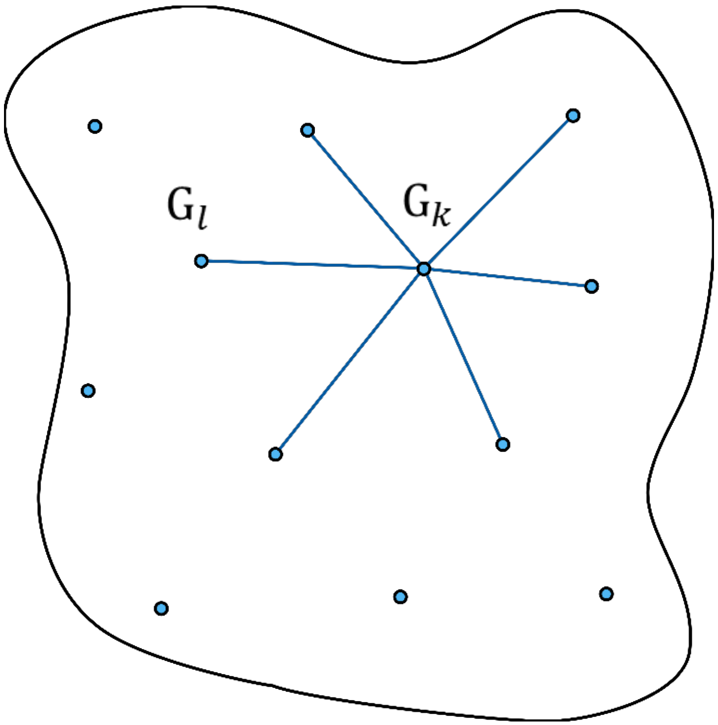
Создание начальной декомпозиции



Расчетный образец

1. Выберем набор точек $\{\mathrm{G}_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$. Каждую точку G_k соотнесем с процессом P_k.

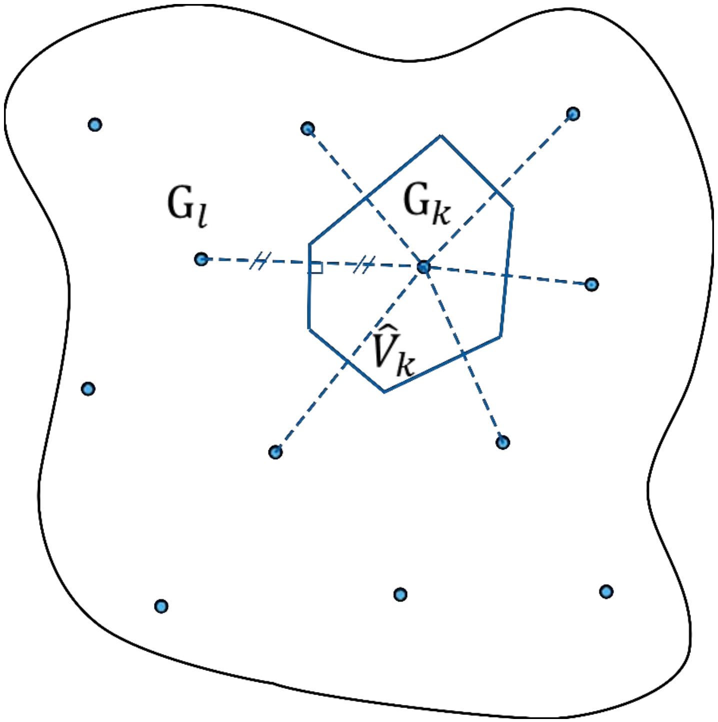
Создание начальной декомпозиции



Расчетный образец

1. Выберем набор точек $\{G_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$. Каждую точку G_k соотнесем с процессом P_k.
2. Каждый процесс ищет своих соседей по диаграмме.

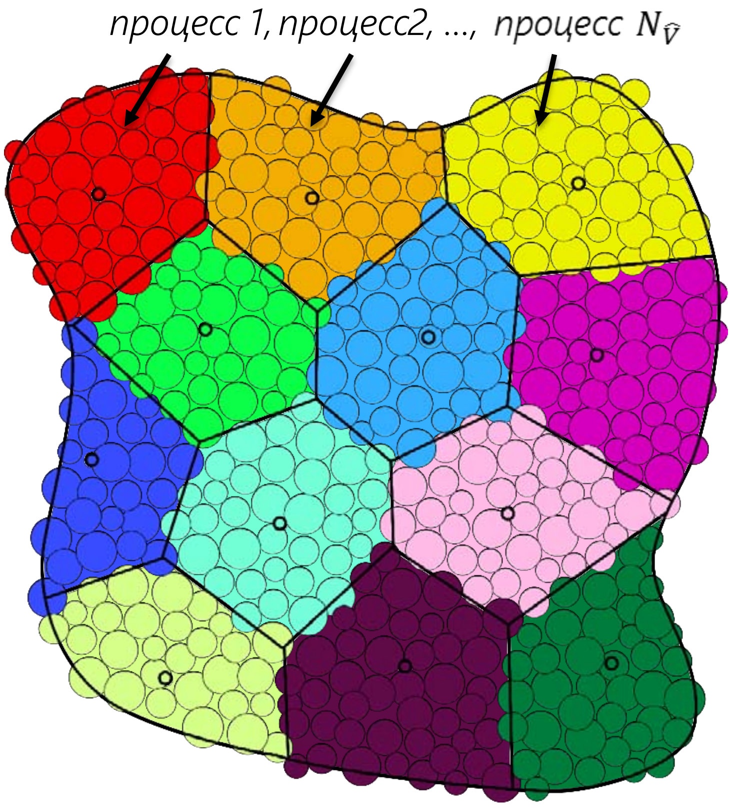
Создание начальной декомпозиции



Расчетный образец

1. Выберем набор точек $\{G_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$. Каждую точку G_k соотнесем с процессом P_k.
2. Каждый процесс ищет своих соседей по диаграмме.
3. Все ячейки наполняются частицами, при этом используется проверка положения частиц согласно определению диаграммы: частица относится к тому процессу, к генератору ячейки которого она ближе.

Создание начальной декомпозиции



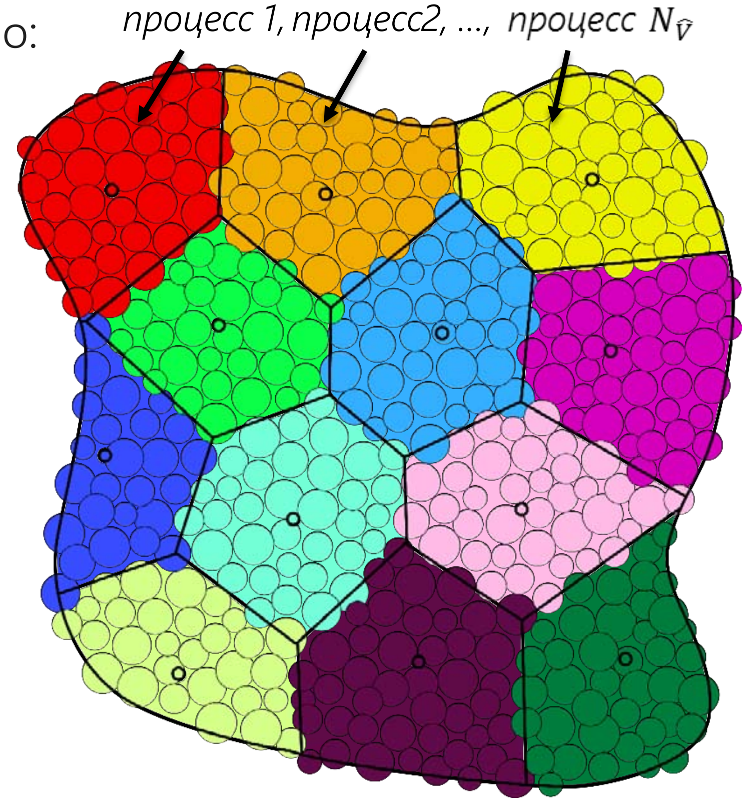
Расчетный образец

1. Выберем набор точек $\{G_k\}_{k=1}^{N_{\hat{V}}}$. Каждую точку G_k соотнесем с процессом P_k.
2. Каждый процесс ищет своих соседей по диаграмме.
3. Все ячейки наполняются частицами, при этом используется проверка положения частиц согласно определению диаграммы: частица относится к тому процессу, к генератору ячейки которого она ближе.

Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.

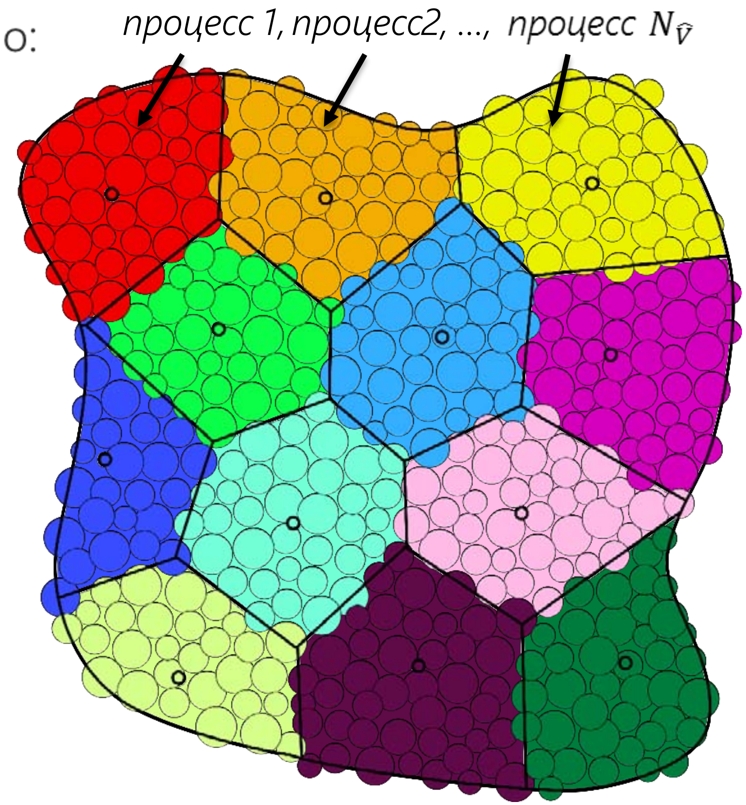


Расчетный образец

Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w/t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.

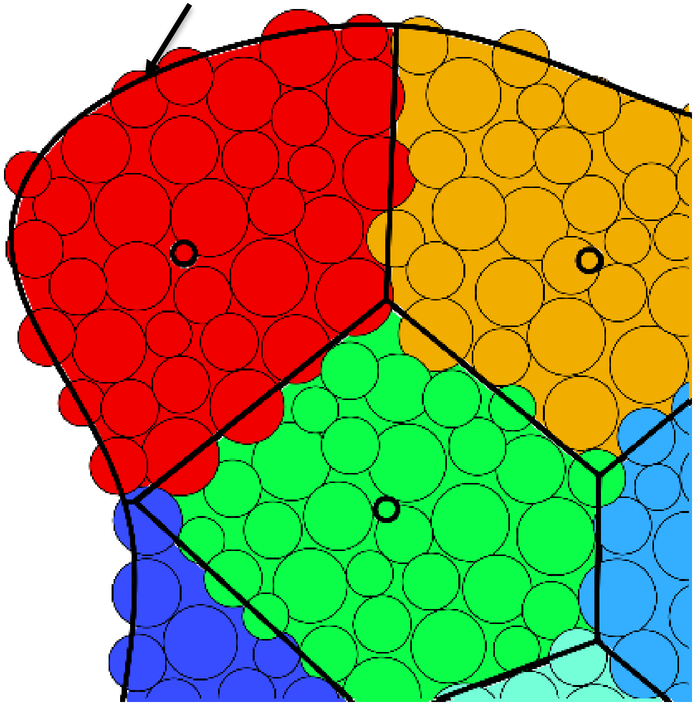


Расчетный образец

Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w / t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.



Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w/t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.
3. Вычислить смещения генераторов:

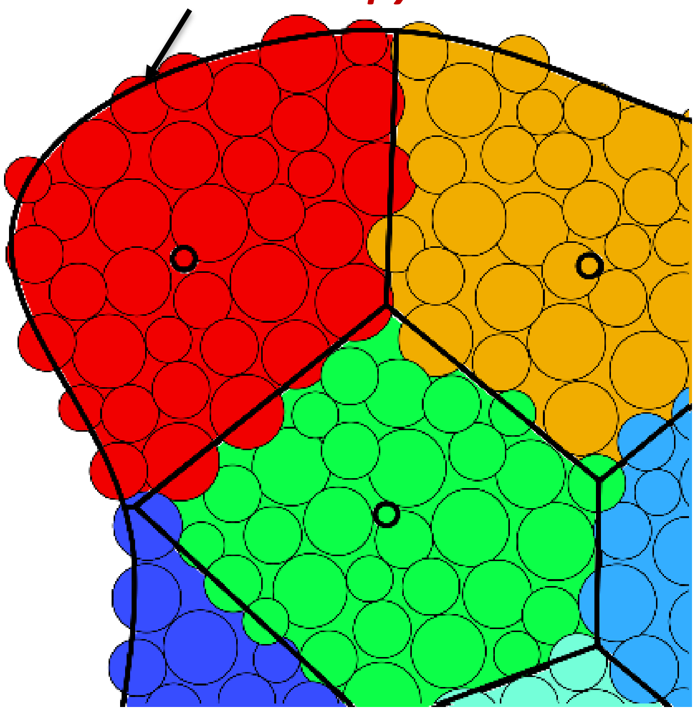
   $\Delta\vec{r}_i = (1-\sigma)\Delta\vec{r}_{mc,\,i} + \sigma\Sigma_j\Delta\vec{g}_{ij}$, где:

   $\Delta\vec{r}_{mc,i}$ – смещение геометрического центра ячейки из-за движения ее частиц

   $\Delta\vec{g}_{ij} \sim r_c(L_i - L_j)$ – балансирующие смещения центра ячейки

   σ – параметр, контролирующий вес балансирующих смещений, $\sigma \in [0,1]$.

   При $\sigma = 0$ ячейки Вороного привязаны к движению вещества.



Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w/t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.
3. Вычислить смещения генераторов:

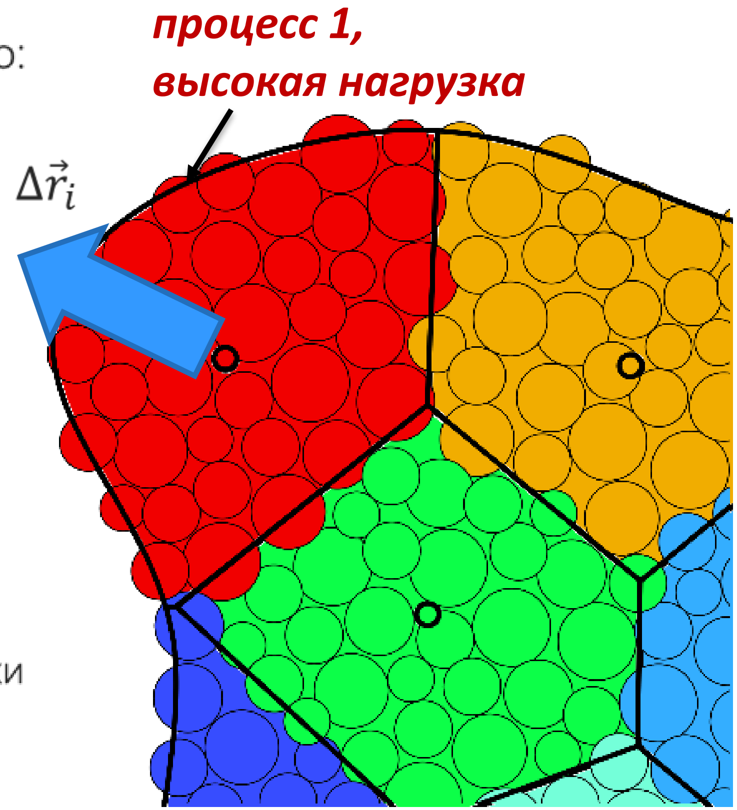
   $\Delta\vec{r}_i = (1-\sigma)\Delta\vec{r}_{mc,\,i} + \sigma\Sigma_j\Delta\vec{g}_{ij}$, где:

   $\Delta\vec{r}_{mc,i}$ – смещение геометрического центра ячейки из-за движения ее частиц

   $\Delta\vec{g}_{ij} \sim r_c(L_i - L_j)$ – балансирующие смещения центра ячейки

   σ – параметр, контролирующий вес балансирующих смещений, $\sigma \in [0,1]$.

   При $\sigma = 0$ ячейки Вороного привязаны к движению вещества.



Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w/t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.
3. Вычислить смещения генераторов:

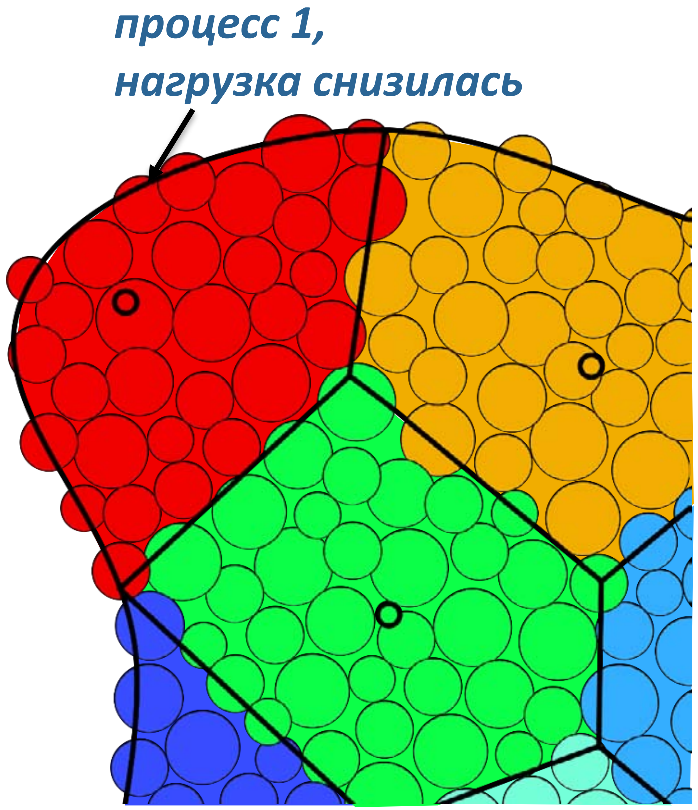
$\Delta\vec{r}_i = (1-\sigma)\Delta\vec{r}_{mc,\,i} + \sigma\Sigma_j\Delta\vec{g}_{ij}$, где:

$\Delta\vec{r}_{mc,i}$ – смещение геометрического центра ячейки из-за движения ее частиц

$\Delta\vec{g}_{ij} \sim r_c(L_i - L_j)$ – балансирующие смещения центра ячейки

σ – параметр, контролирующий вес балансирующих смещений, $\sigma \in [0,1]$.

При $\sigma = 0$ ячейки Вороного привязаны к движению вещества.



Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w / t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.
3. Вычислить смещения генераторов:

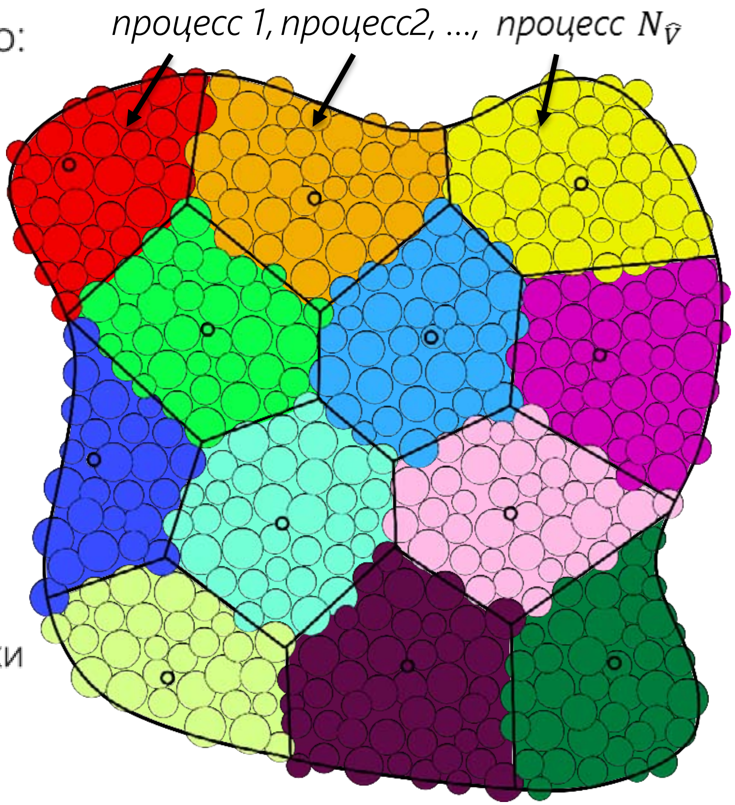
   $\Delta\vec{r}_i = (1-\sigma)\Delta\vec{r}_{mc,\,i} + \sigma\Sigma_j\Delta\vec{g}_{ij}$, где:

   $\Delta\vec{r}_{mc,i}$ – смещение геометрического центра ячейки из-за движения ее частиц

   $\Delta\vec{g}_{ij} \sim r_c(L_i - L_j)$ – балансирующие смещения центра ячейки

   σ – параметр, контролирующий вес балансирующих смещений, $\sigma \in [0,1]$.

   При $\sigma = 0$ ячейки Вороного привязаны к движению вещества.



Расчетный образец

Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w/t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.
3. Вычислить смещения генераторов:

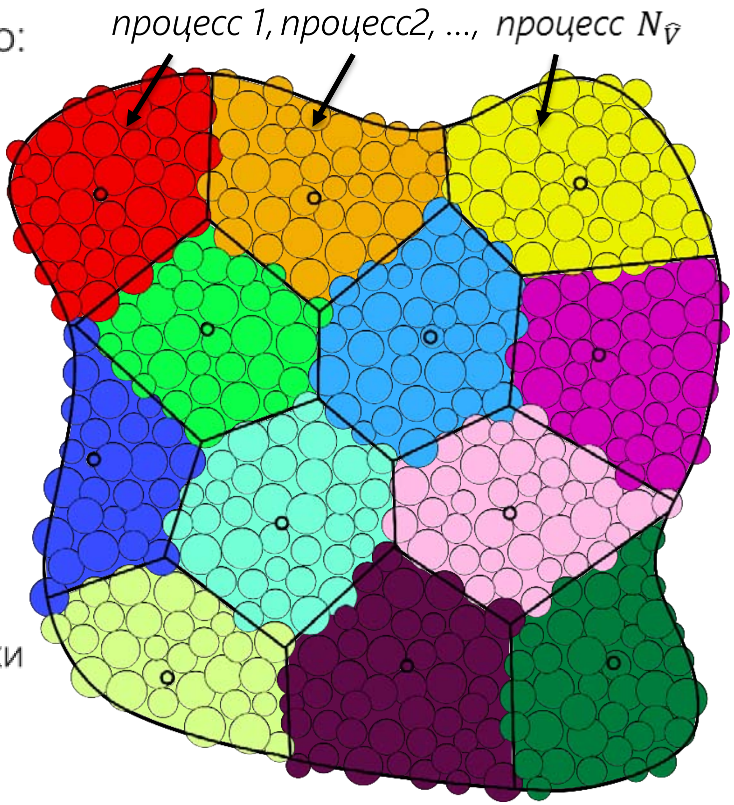
$\Delta\vec{r}_i = (1-\sigma)\Delta\vec{r}_{mc,\,i} + \sigma\Sigma_j\Delta\vec{g}_{ij}$, где:

$\Delta\vec{r}_{mc,i}$ – смещение геометрического центра ячейки из-за движения ее частиц

$\Delta\vec{g}_{ij} \sim r_c(L_i - L_j)$ – балансирующие смещения центра ячейки

σ – параметр, контролирующий вес балансирующих смещений, $\sigma \in [0{,}1]$.

При $\sigma = 0$ ячейки Вороного привязаны к движению вещества.



Расчетный образец

Автобалансировка декомпозиции

Перед каждым перестроением диаграммы нужно:

1. Провести несколько шагов SPH-расчета.
2. Измерить нагрузку $L = t_w/t_e$ в каждом процессе (в ячейке) как отношение времени на счет к общему времени, включая простой.
3. Вычислить смещения генераторов:

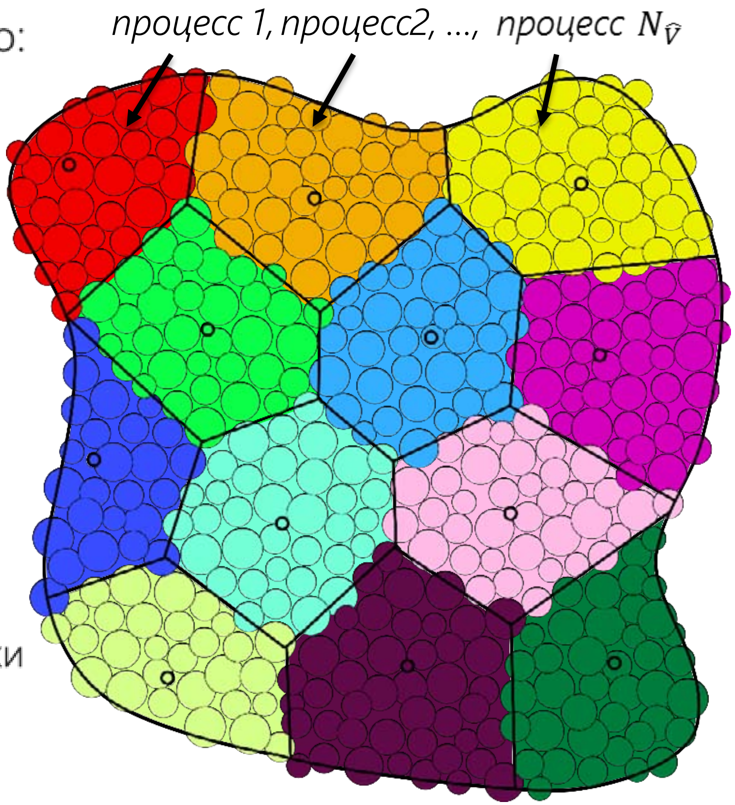
$\Delta\vec{r}_i = (1-\sigma)\Delta\vec{r}_{mc,\,i} + \sigma\Sigma_j\Delta\vec{g}_{ij}$, где:

$\Delta\vec{r}_{mc,i}$ – смещение геометрического центра ячейки из-за движения ее частиц

$\Delta\vec{g}_{ij} \sim r_c(L_i - L_j)$ – балансирующие смещения центра ячейки

σ – параметр, контролирующий вес балансирующих смещений, $\sigma \in [0,1]$.

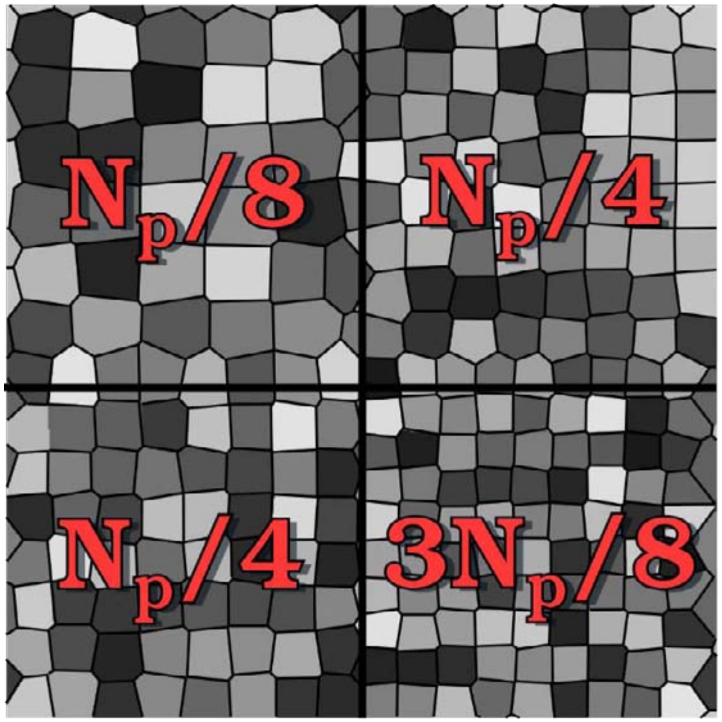
При $\sigma = 0$ ячейки Вороного привязаны к движению вещества.



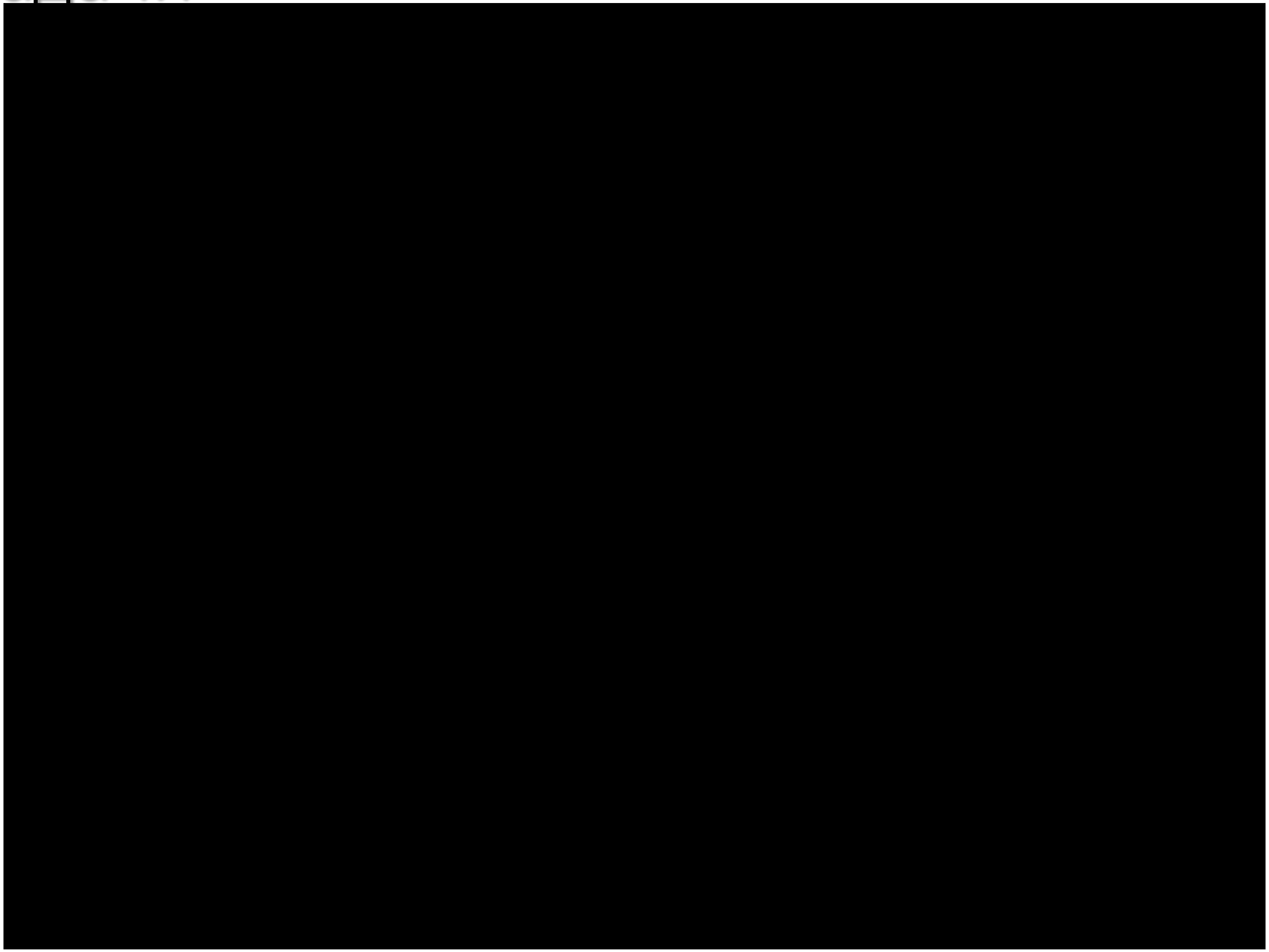
Расчетный образец

Балансировка на примере статической задачи

- $L_x = L_y = 1$ м, $L_z = 0.015$ м
- Периодические граничные условия
- Олово в покое
- 52 миллиона частиц
- N – общее число процессов: 32, 64, 128, 256, 512, 1024
- 2D декомпозиция по Вороному с начальным дисбалансом нагрузки



Балансировка на примере статической задачи

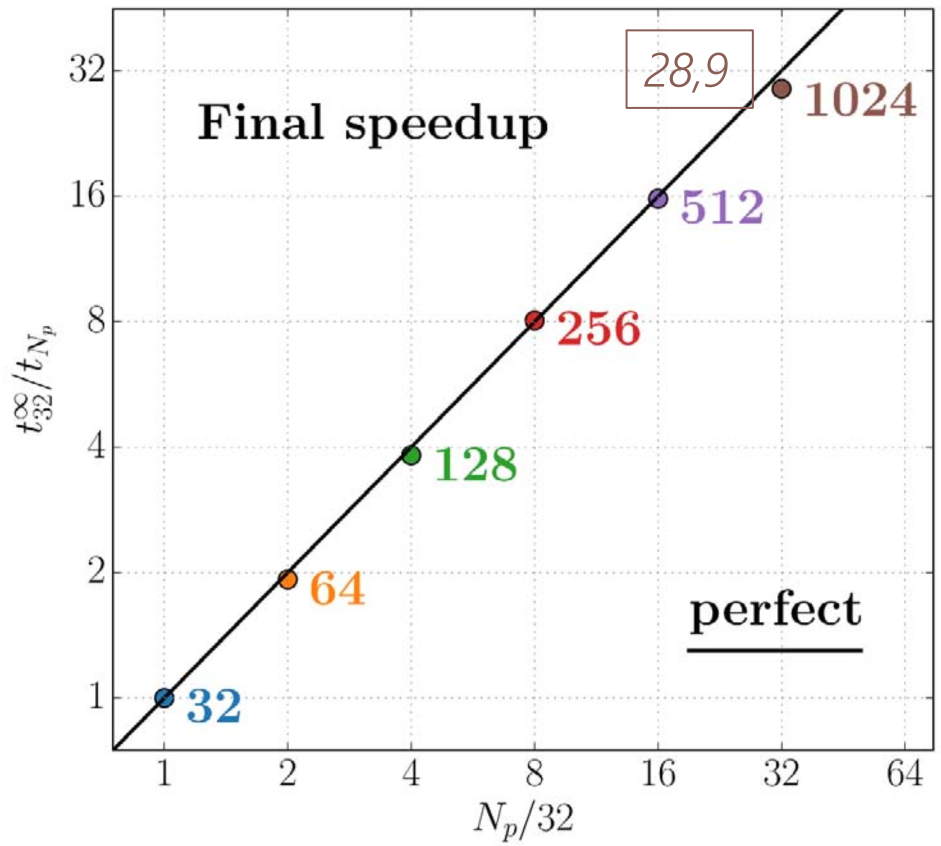


Тест на сильное масштабирование

% времени на

N_{cpu}	SPH	Обмен
128	52.6/87.3	44.2/11.6
256	49.1/91.2	46.6/7.9
512	46.8/88.9	47.9/9.5
1024	45.0/81.6	50.0/15.4

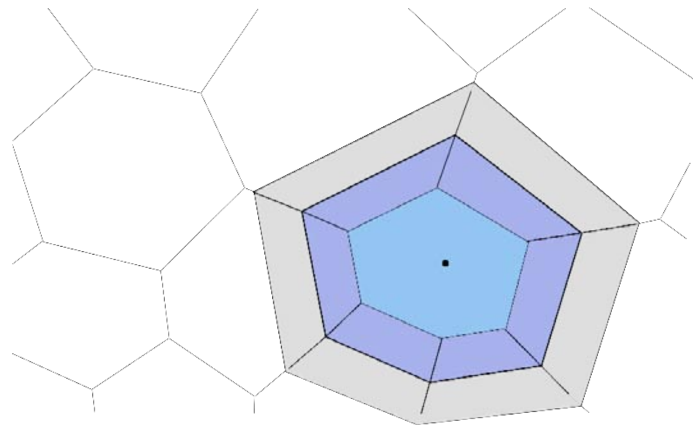
начало/конец



- Наблюдается почти линейное масштабирование при использовании от 32 до 1024 ядер
- Балансировочный алгоритм сокращает время на ожидание коммуникаций

Почему «завал» на 1024 процессорах?

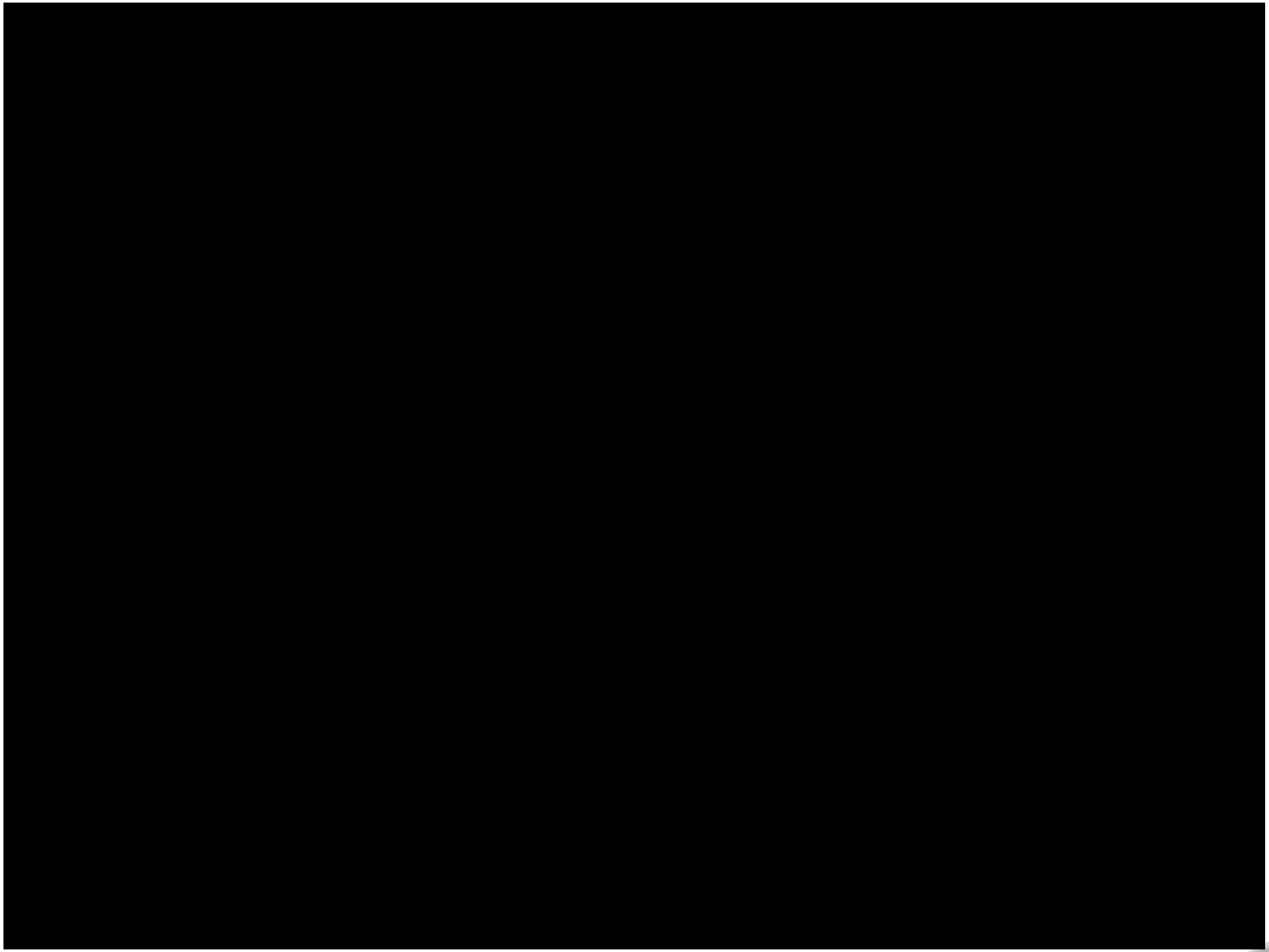
Почему «завал» на 1024 процессорах?



- При уменьшении размера ячейки Вороного *зона, подлежащая обмену* для осуществления расчета взаимодействия между частицами, попавшими в разные ячейки, *ст ановит ся больше*.
- Обмен информацией *«маскирует ся» расчет ом* «внутренних» частиц с использованием *неблокирующих коммуникаций*, но при большей доле обменной области эффективность «маскировки» снижается.

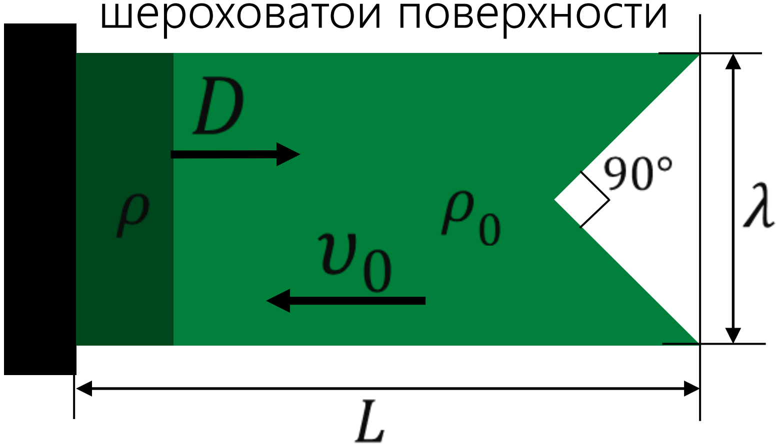
Работа алгоритма декомпозиции в динамических задачах

Пример динамической задачи для MD при большом начальном дисбалансе



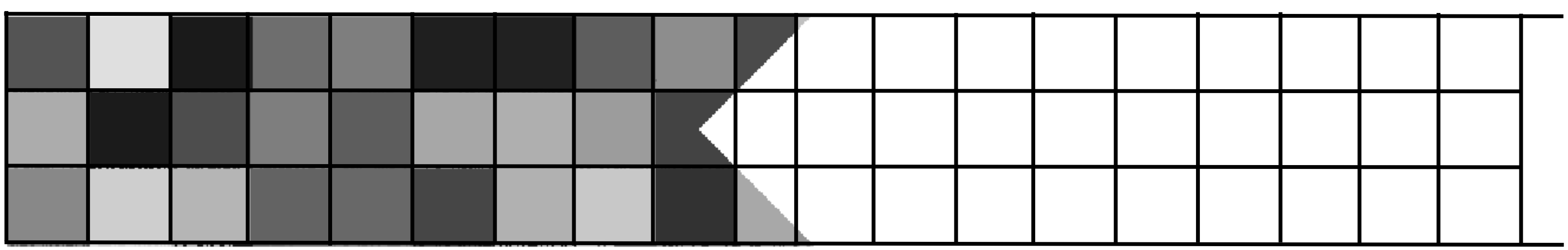
Пример динамической задачи для SPH

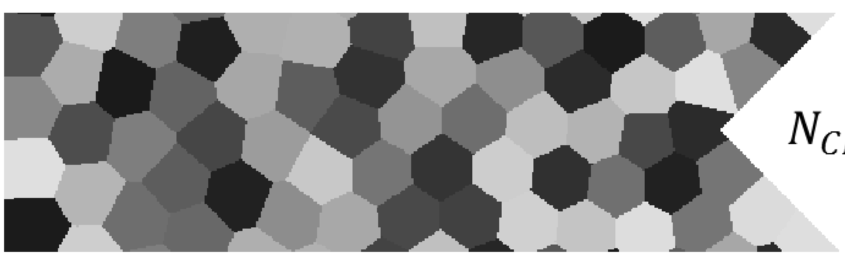
Струеобразование с шероховатой поверхности



Декомпозиция:

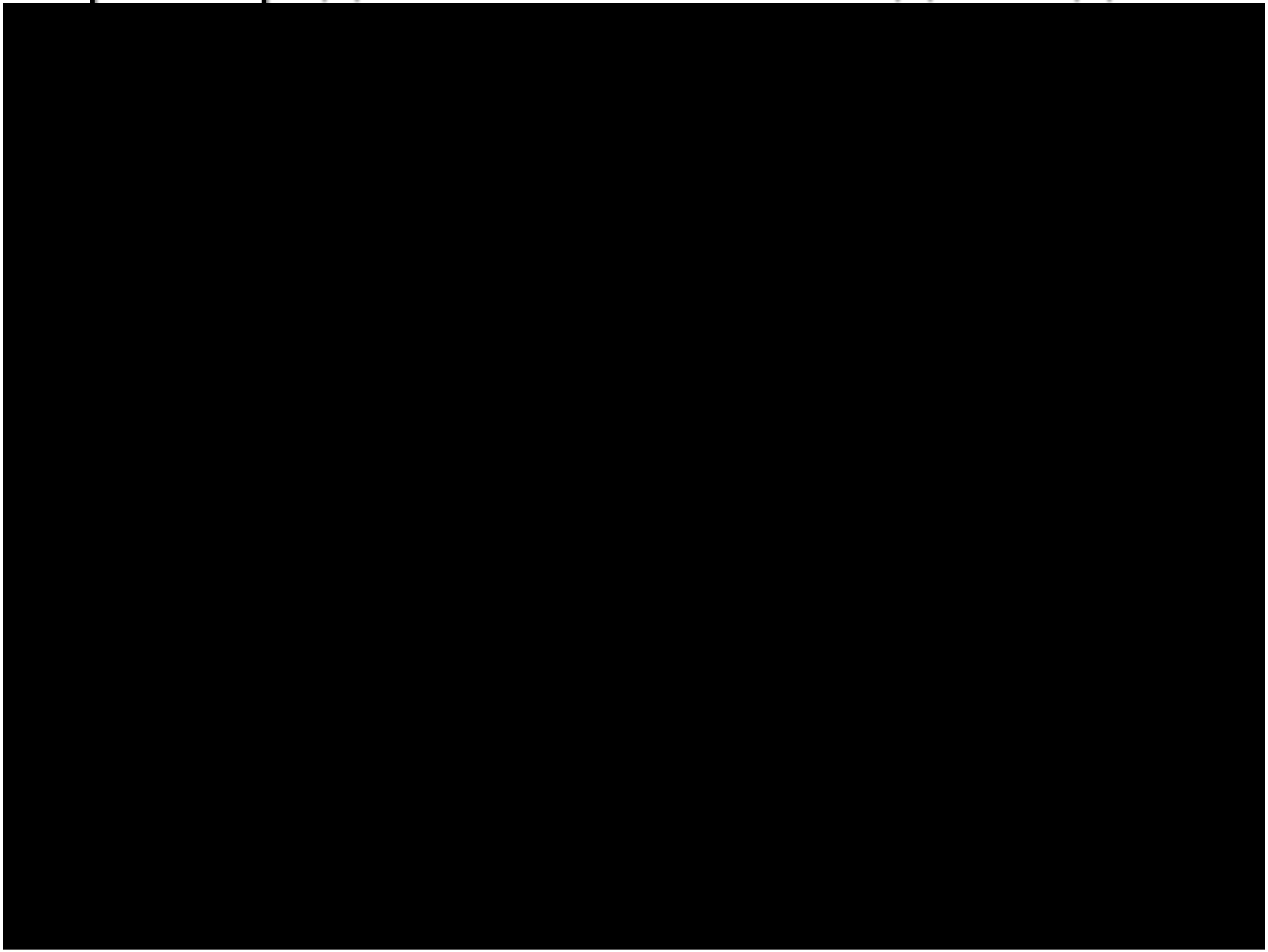
1. Статическая
2. По Вороному лагранжева («поток»)
3. По Вороному лагранжева с балансом нагрузки («поток+баланс»)



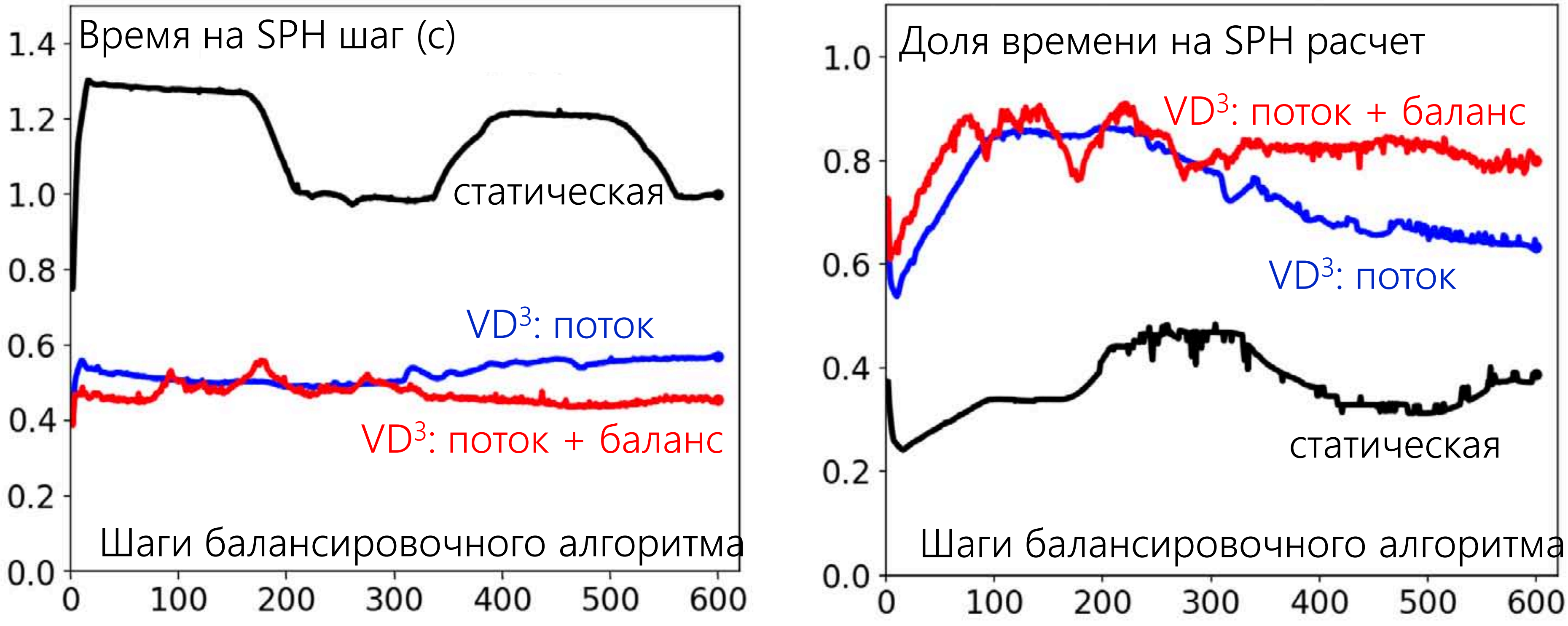


$N_{CPU} = 64, N_p = 2.5$ млн

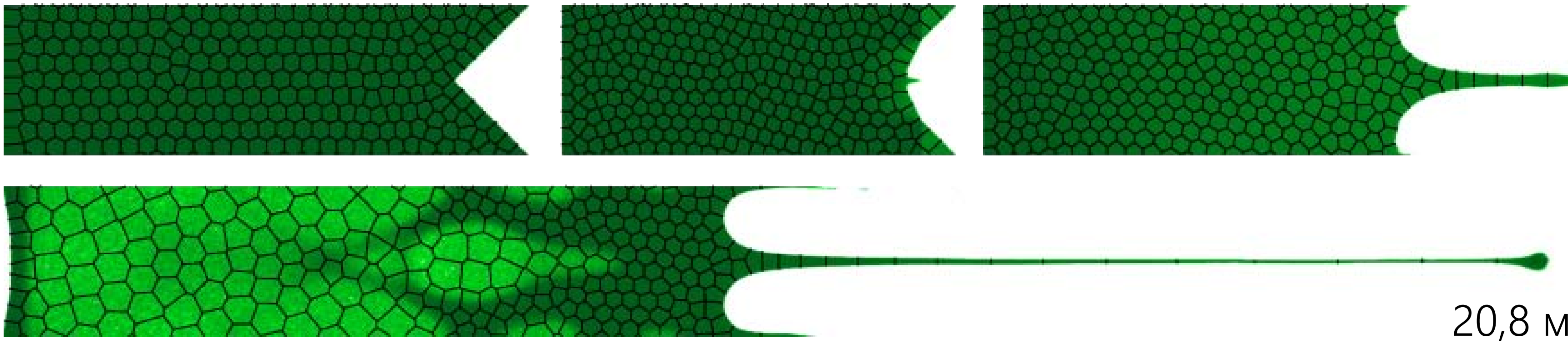
Пример динамической задачи для SPH



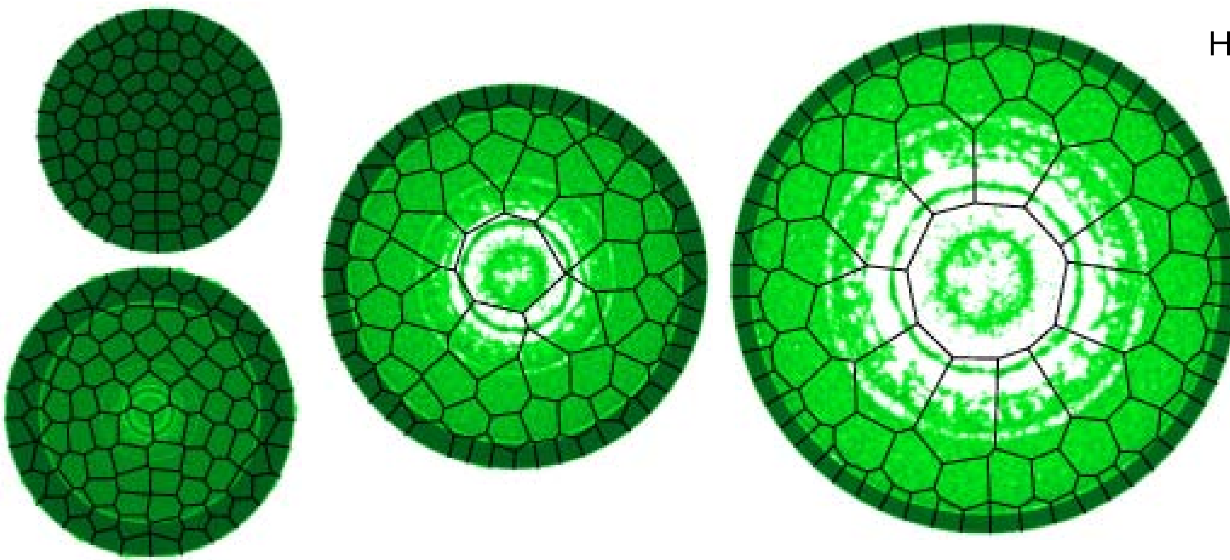
Пример динамической задачи для SPH



Тест на сильную масштабируемость

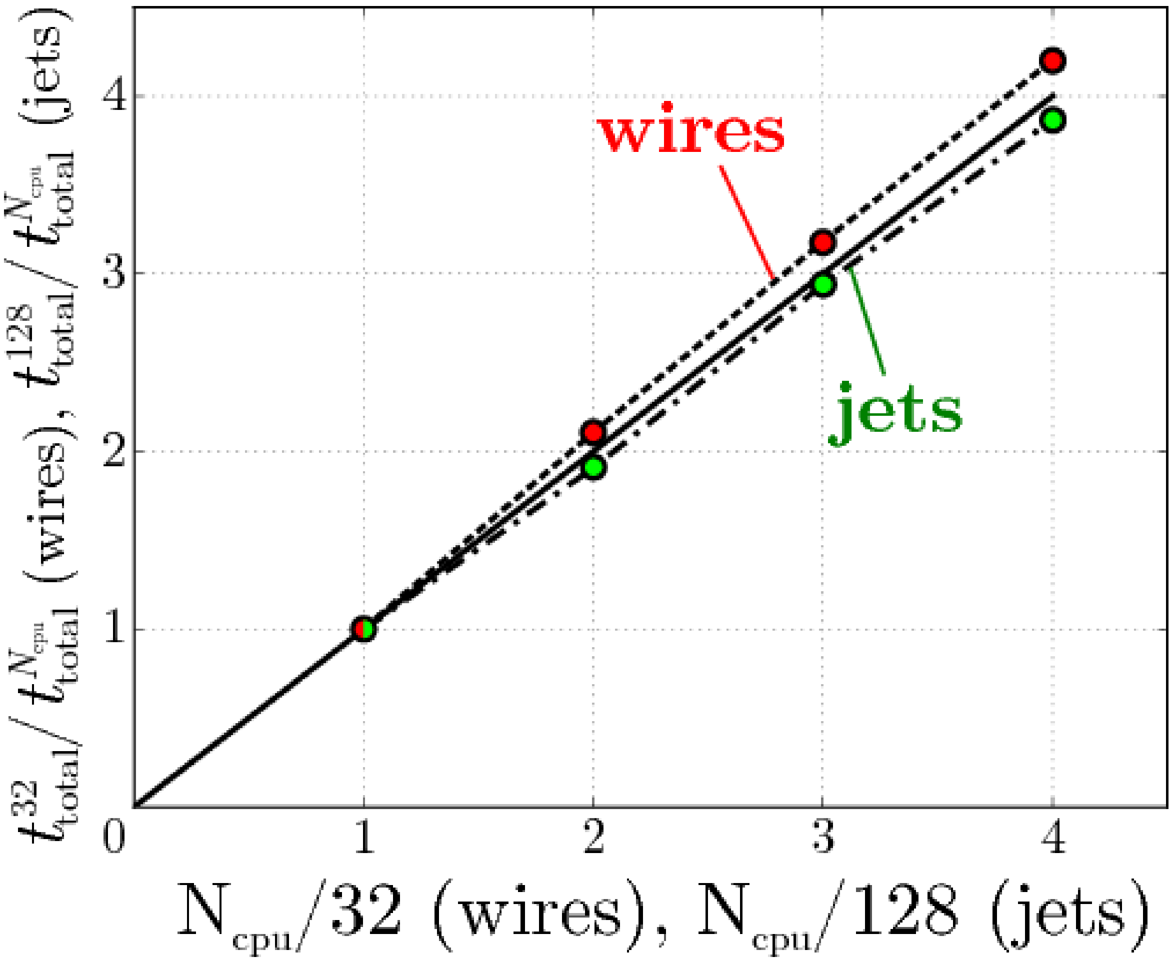


20,8 млн
SPH частиц
на 256 ядрах



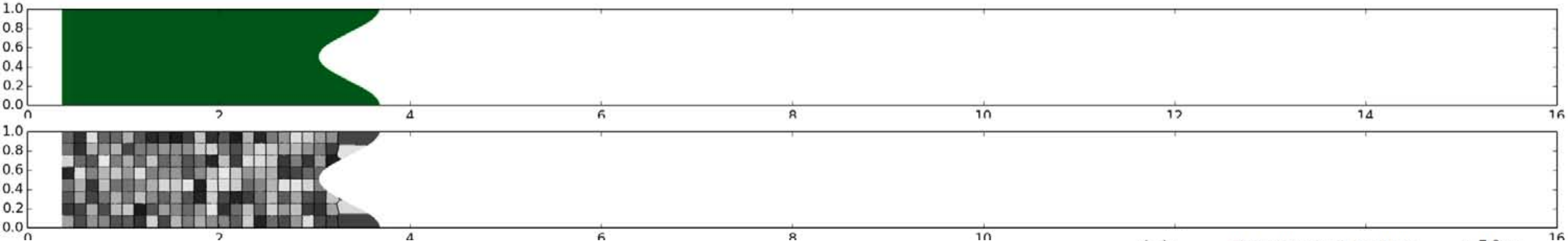
3,6 млн
SPH частиц
на 96 ядрах

Тест на сильную масштабируемость

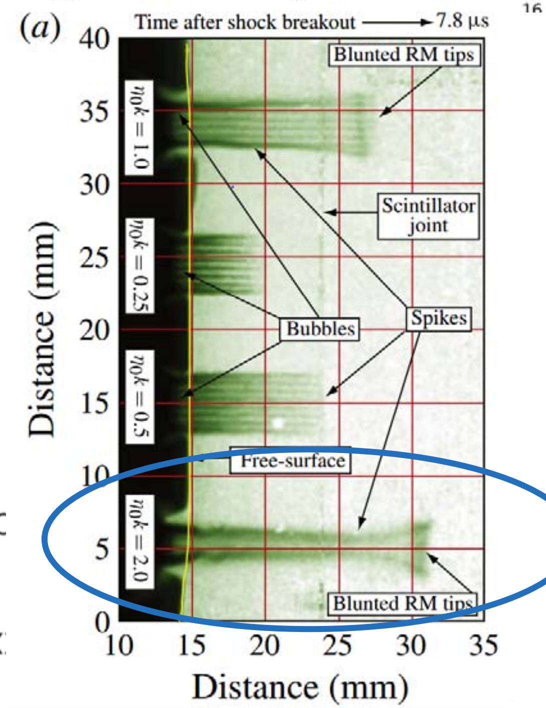


Решенные задачи

Пыление металлической поверхости при выходе на нее ударной волны



Распределение плотности в задаче кумуляции. Большие относительные перемещения обрабатываются естественным образом. Внизу - динамическая декомпозиция по Вороному.



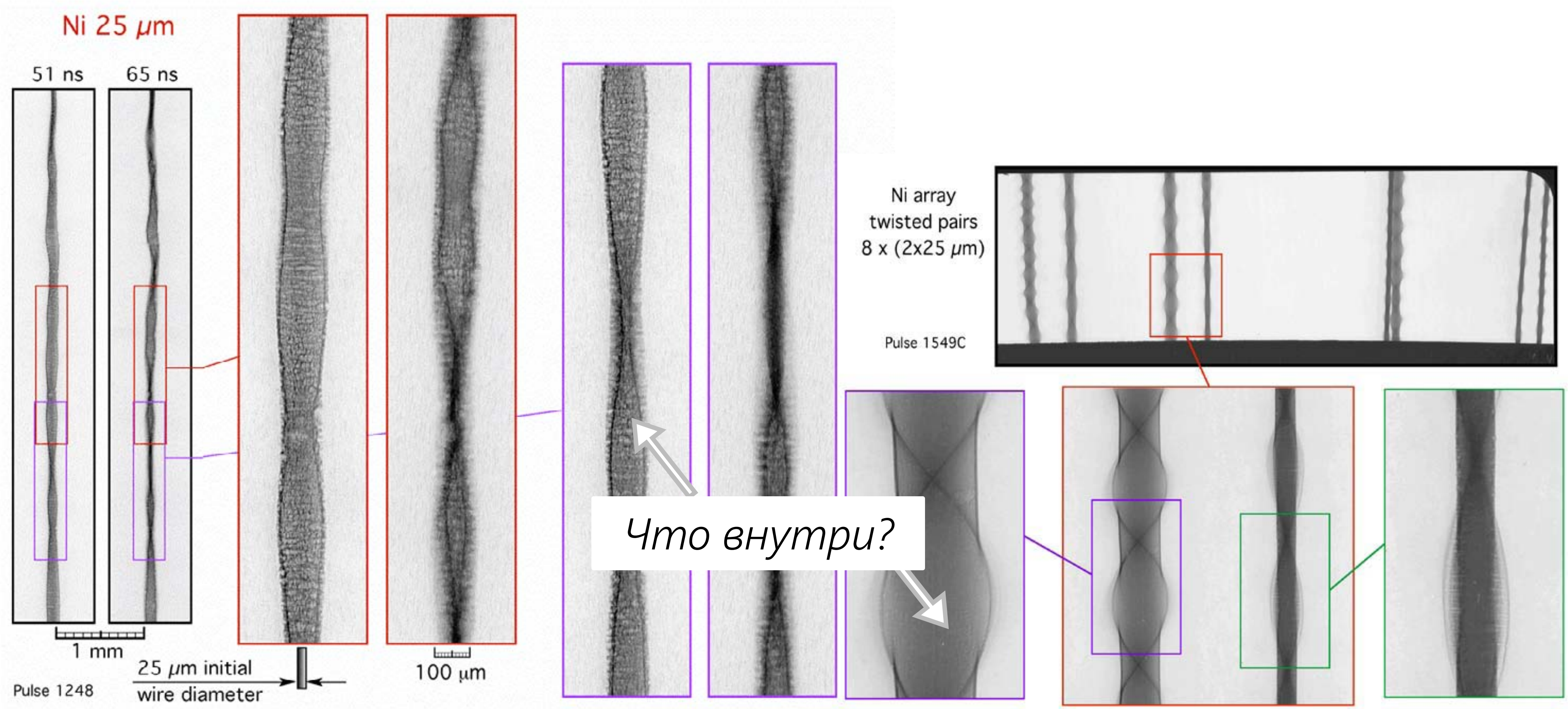
- Уравнение состояния в форме Ми – Грюнайзена для олова.
- Размеры образца: $H = 0.55$ мм, $L = 1.65$ мм, $W = 0.2\ H$. Периодические ГУ по осям z, y. T = 2.9 мкс.
- Образец ударяется о жесткую стенку (потенциальный барьер) сс скоростью $v = 930$ m/s.
- 9.6 млн частиц. 4 часа на 192 ядрах (процессоры Intel Xeon E312x

Рисунок из Buttler et al. / J. Fluid Mech. V. 703, p. 60-84 (2012)

Пыление металлической поверхости при выходе на нее ударной волны

Рисунок из Buttler et al. / J. Fluid Mech. V. 703, p. 60-84 (2012)

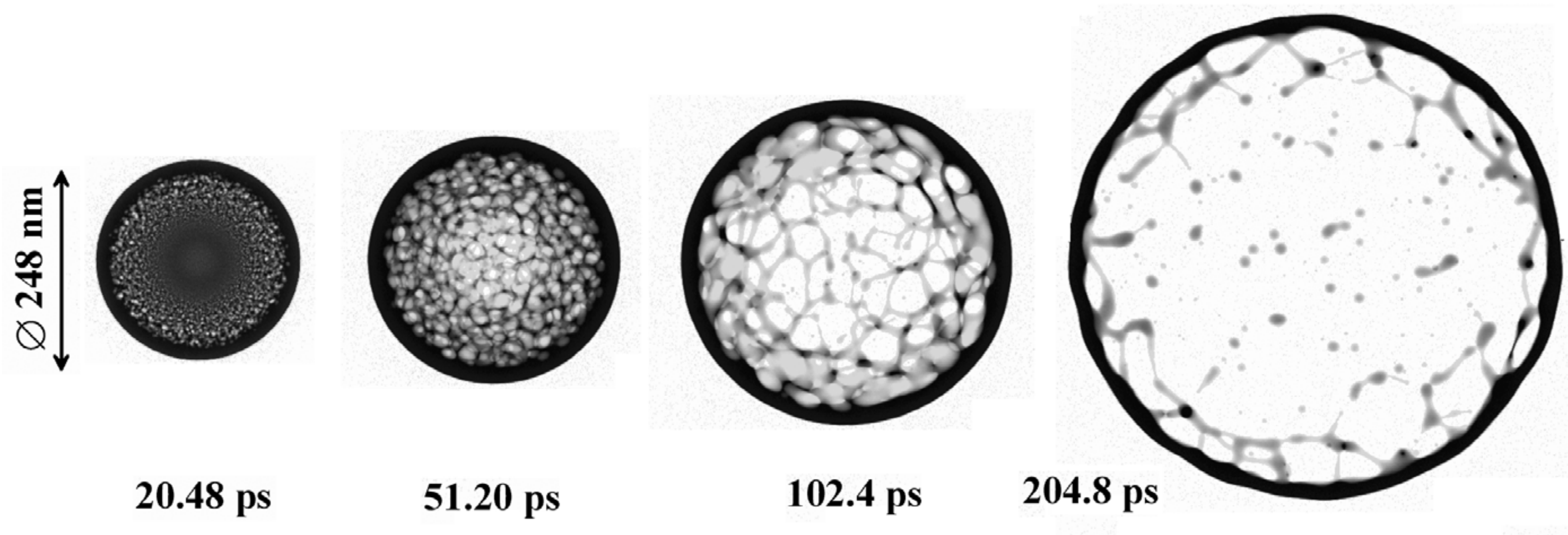
Взрыв проволочек



Рентгенограмма никелевой проволочки (I_{wire} = 240 кА)
*и витой пары (I_{wire} = 1.2 МА)**

* S. A. Pikuz, et al. / Phys. Rev. Let. Vol. 83. No. 4313

Взрыв проволочек



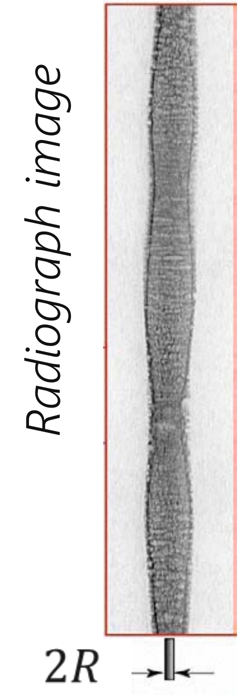
MD-моделирование мгновенно нагретого до T(5 пс) = 6 кК цилиндра из Ni радиусом R_0 = 100 нм (инерционное удержание). $\rho(x;y)$ осреднена по толщине L_z = 40 нм.*

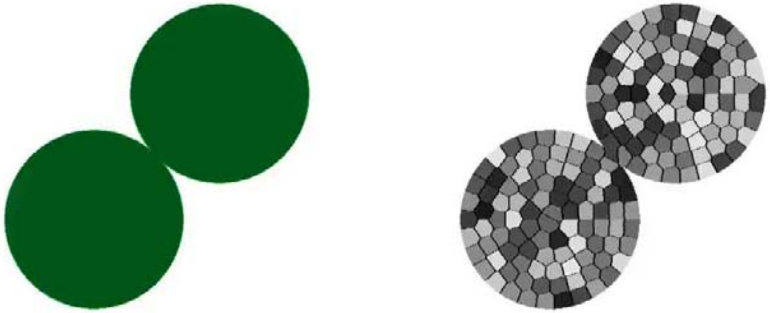
Результаты масштабируются до реального микромасштаба?

* S. A. Pikuz, et al. / Phys. Rev. Let. Vol. 83. No. 4313

Взрыв проволочек

- Используется уравнение состояния Ми - Грюнайзена для алюминия.
- Размеры образца $H = 2$ мкм, $R = 6$ мкм. Периодические ГУ по оси z. $T = 9.6$ нс. 3.6 & 7.2 млн частиц. 1 час на 96 ядрах & 24 часа на 192.
- Условие разрушения: если $\rho_{i,j} < \frac{\rho_0}{1.1}$ (соотношение, получаемое в MD-расчете), связь между частицами не учитывается.
- В коде еще нет модели поверхностного натяжения.
- Начальные условия получены МГД моделированием* **.



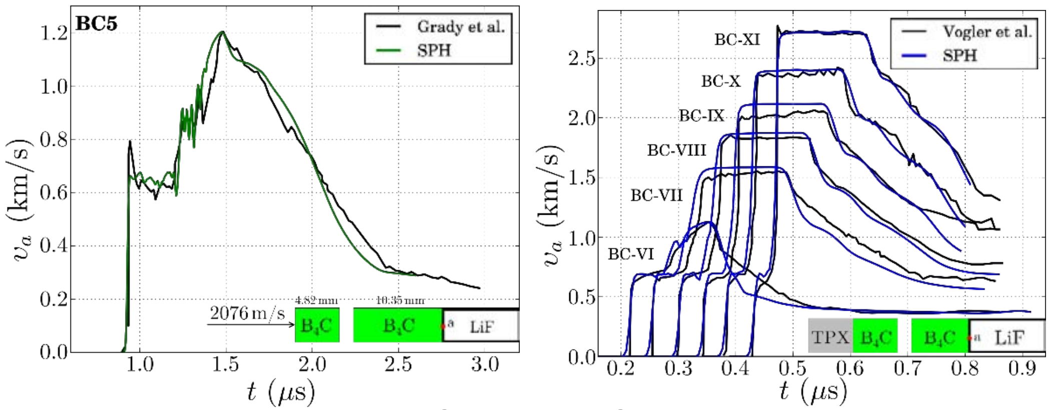


Распределение плотности и декомпозиция до 9,6 нс и 34 нс. Воспроизводится кавитация.

*S. I. Tkachenko, et al. / Plasma physics reports 38.1 (2012): 1-11,
**V. E. Fortov, et al. / Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A 415:604, 1998

Разрушение хрупких материалов

- Моделирование сверхтвердых керамик (B_4C, SiC, AlN) с помощью улучшенной модели Джонсона – Холмквиста
- Модель Джонсона – Кука для металлов
- Модель откола



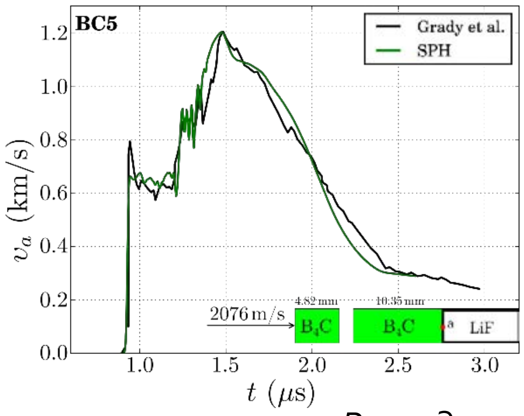
Валидация моделей по волновым профилям VISAR

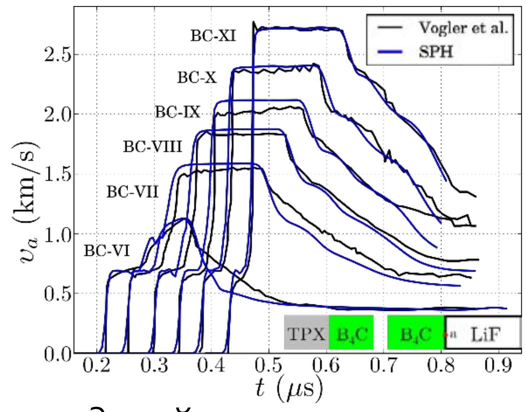
Ударник (B_4C) Мишень (B_4C) Окно (LiF)

Эксперименты Grady, Vogler et al.

Разрушение хрупких материалов

- Моделирование сверхтвердых керамик (B_4C, SiC, AlN) с помощью улучшенной модели Джонсона – Холмквиста
- Модель Джонсона – Кука для металлов
- Модель откола





Валидация моделей
по волновым профилям VISAR

Откольные процессы

Ударник (B_4C)

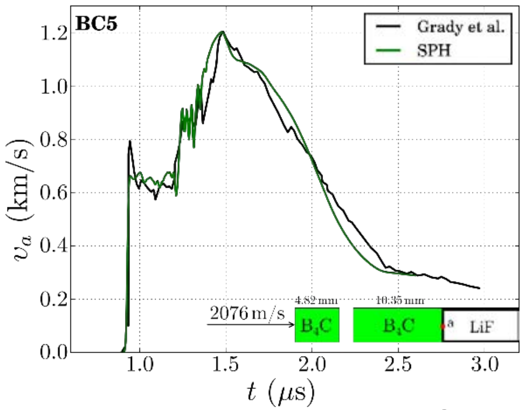
Мишень (B_4C)

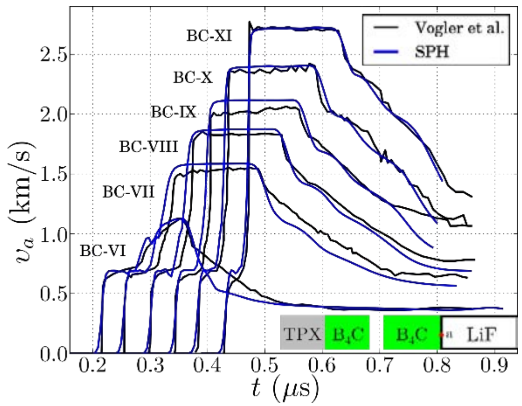
Окно (LiF)

Эксперименты Grady, Vogler et al.

Разрушение хрупких материалов

- Моделирование сверхтвердых керамик (B_4C, SiC, AlN) с помощью улучшенной модели Джонсона – Холмквиста
- Модель Джонсона – Кука для металлов
- Модель откола

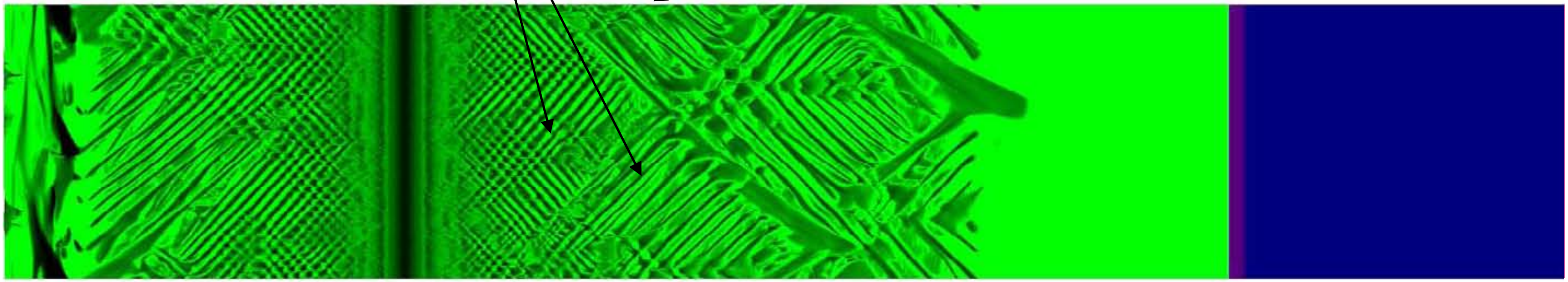




Валидация моделей по волновым профилям VISAR

Откольные процессы

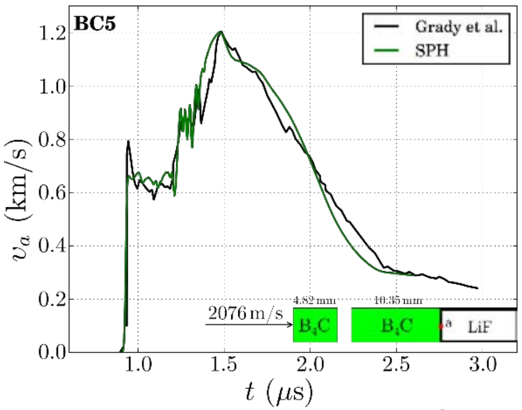
Ударник (B_4C) Мишень (B_4C) Окно (LiF)

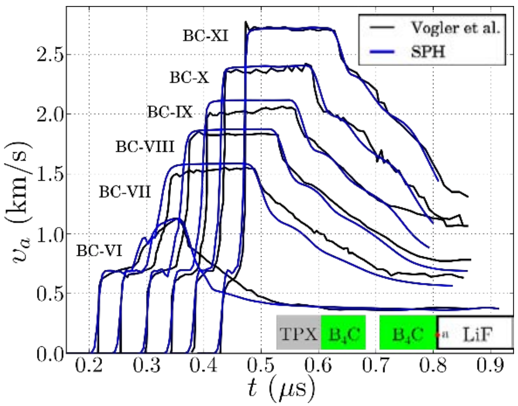


Эксперименты Grady, Vogler et al.

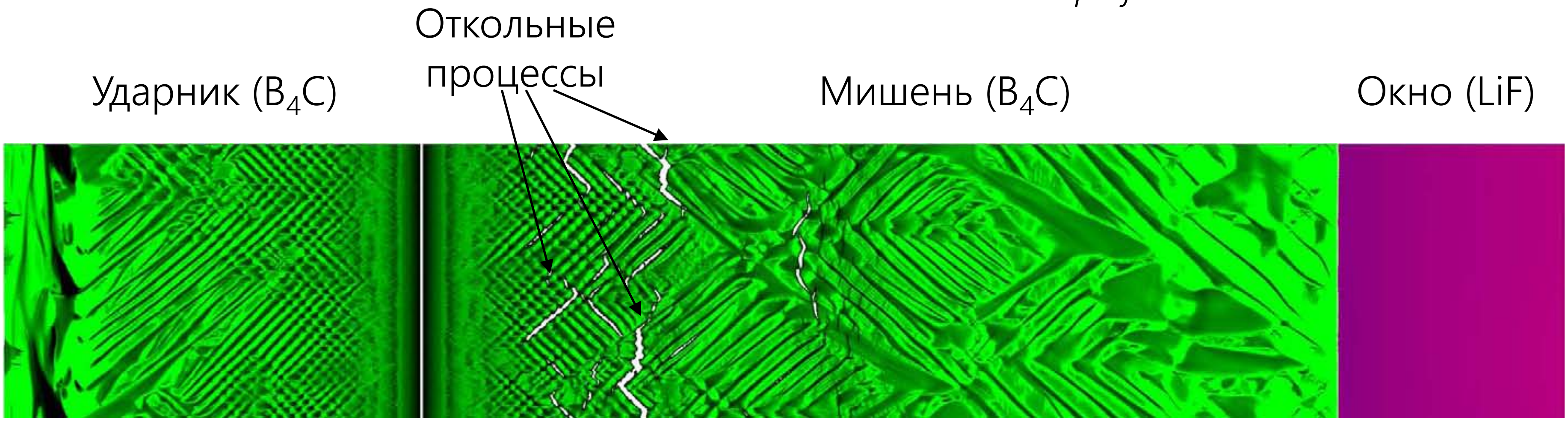
Разрушение хрупких материалов

- Моделирование сверхтвердых керамик (B_4C, SiC, AlN) с помощью улучшенной модели Джонсона – Холмквиста
- Модель Джонсона – Кука для металлов
- Модель откола



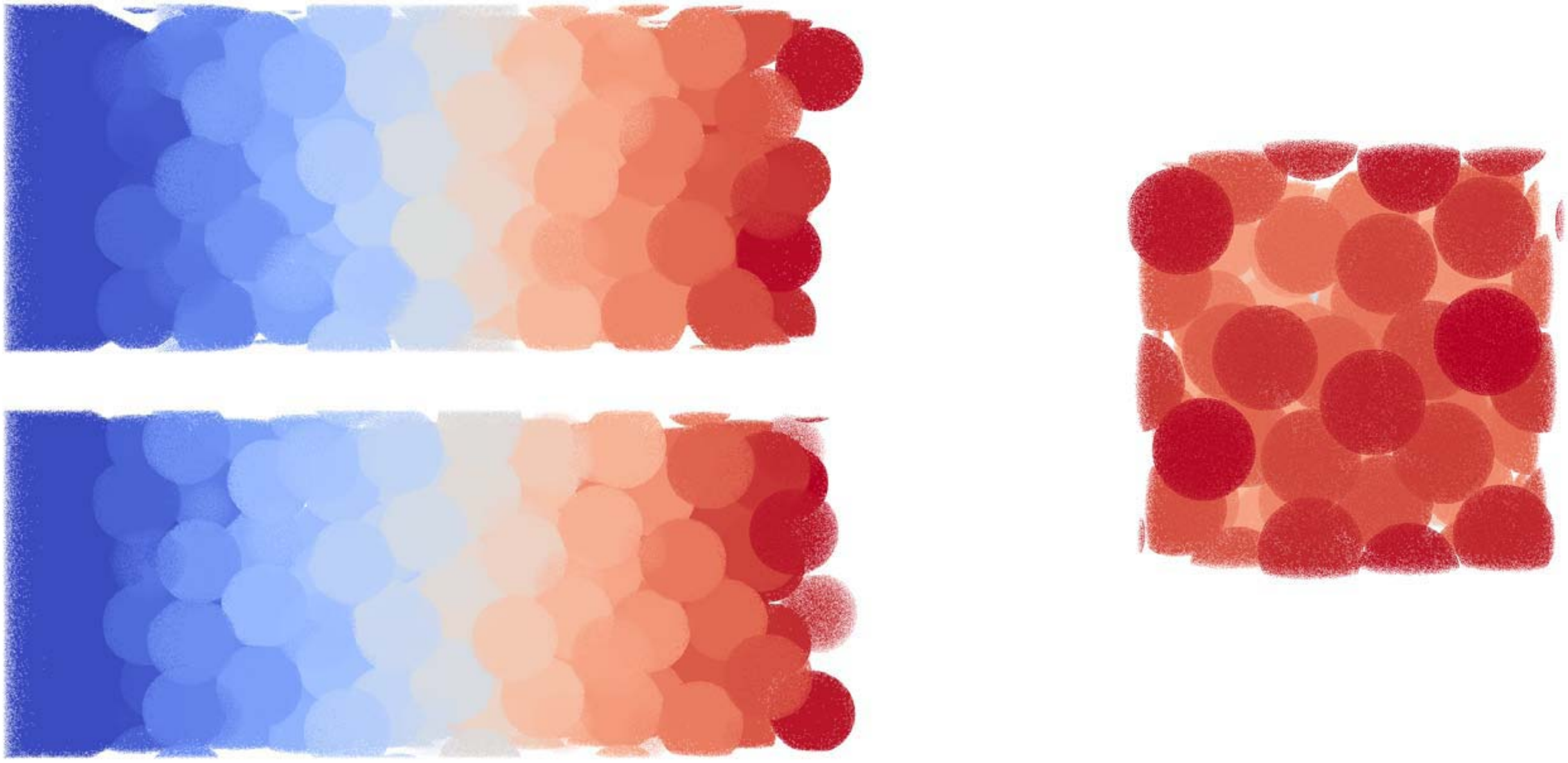


Валидация моделей по волновым профилям VISAR



Эксперименты Grady, Vogler et al.

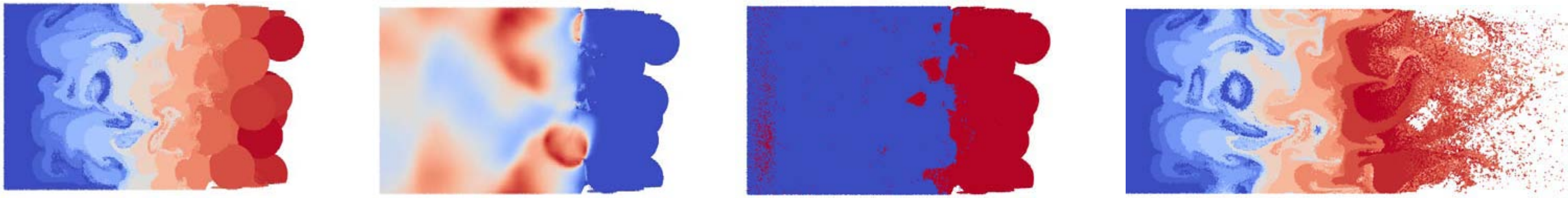
Прохождение ударной волны через слой частиц



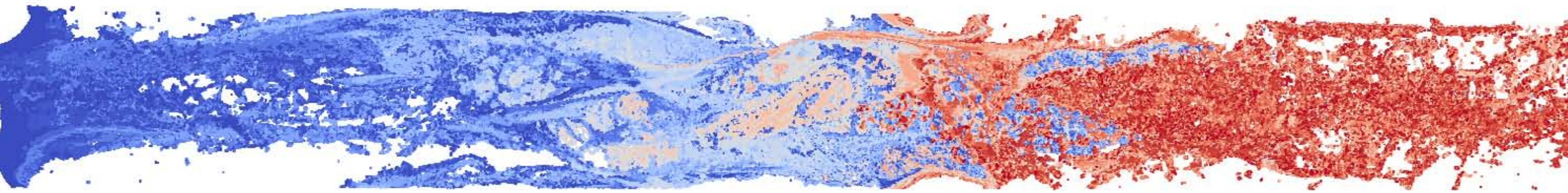
XY, XZ и YZ виды

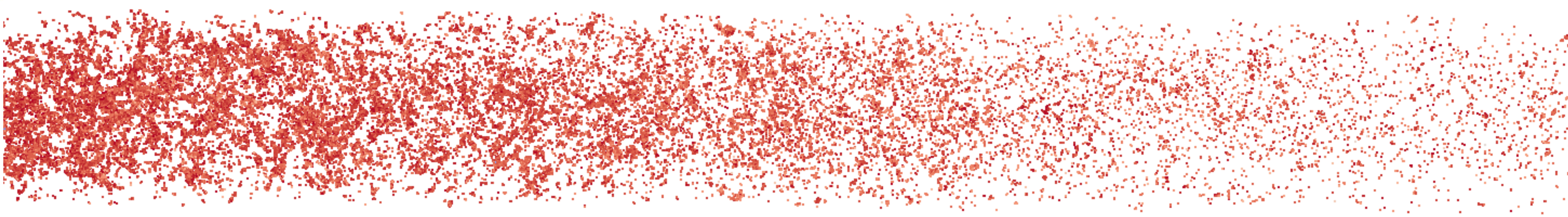
Золотые частицы диаметром 9 мкм

Прохождение ударной волны через упакованный баллистически слой частиц



частицы давление жидкость/тв. тело





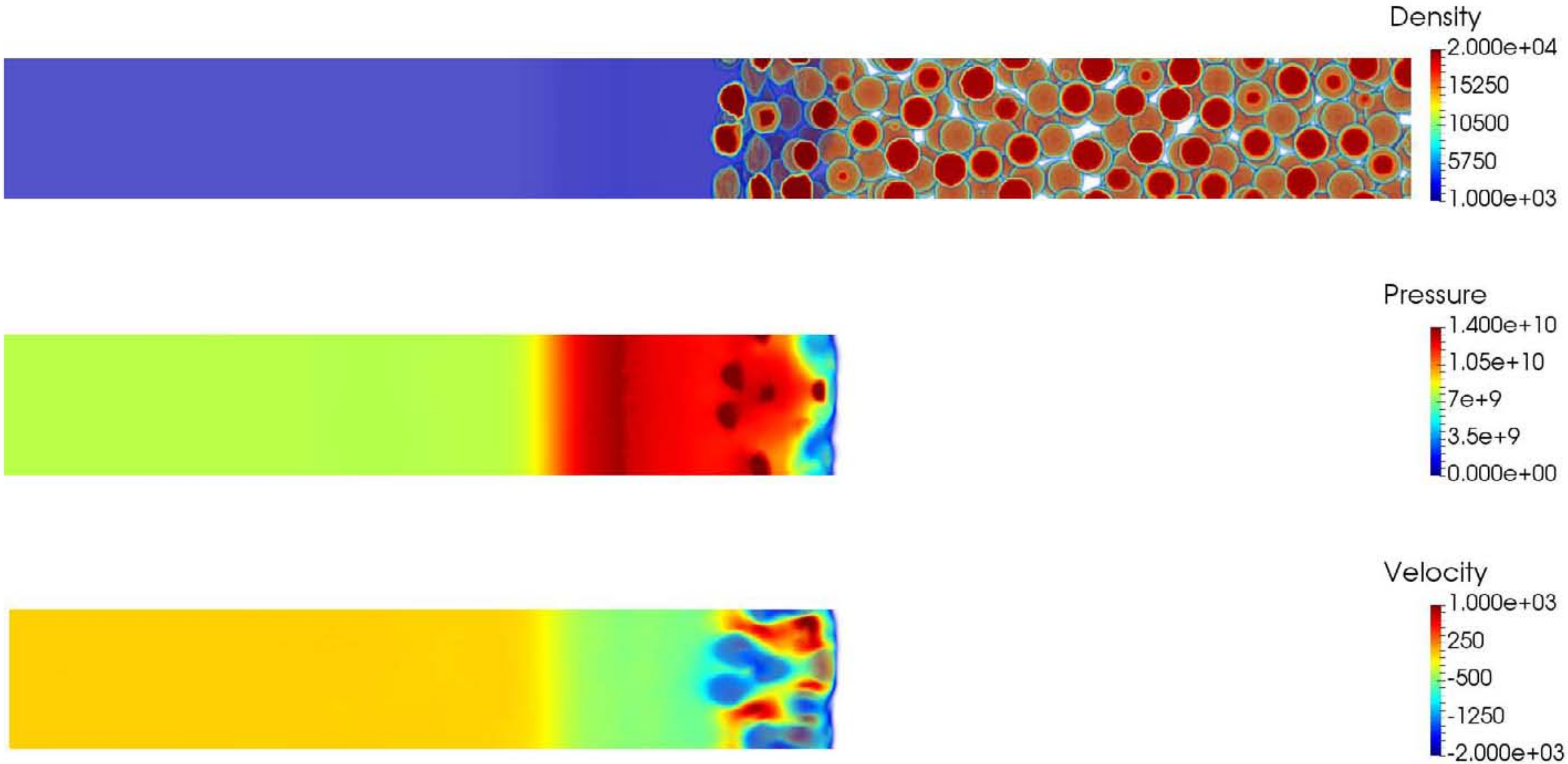
изометрическое изображение распределения материала различных частиц после прохождения УВ через слой (t=0,3 мкс)

- Расчет 8.2 млн. частиц на 128 CPU-ядрах (размер частицы ~ $2{,}5 \cdot 10^{-7}$ м) 5 часов

Прохождение УВ через взвесь

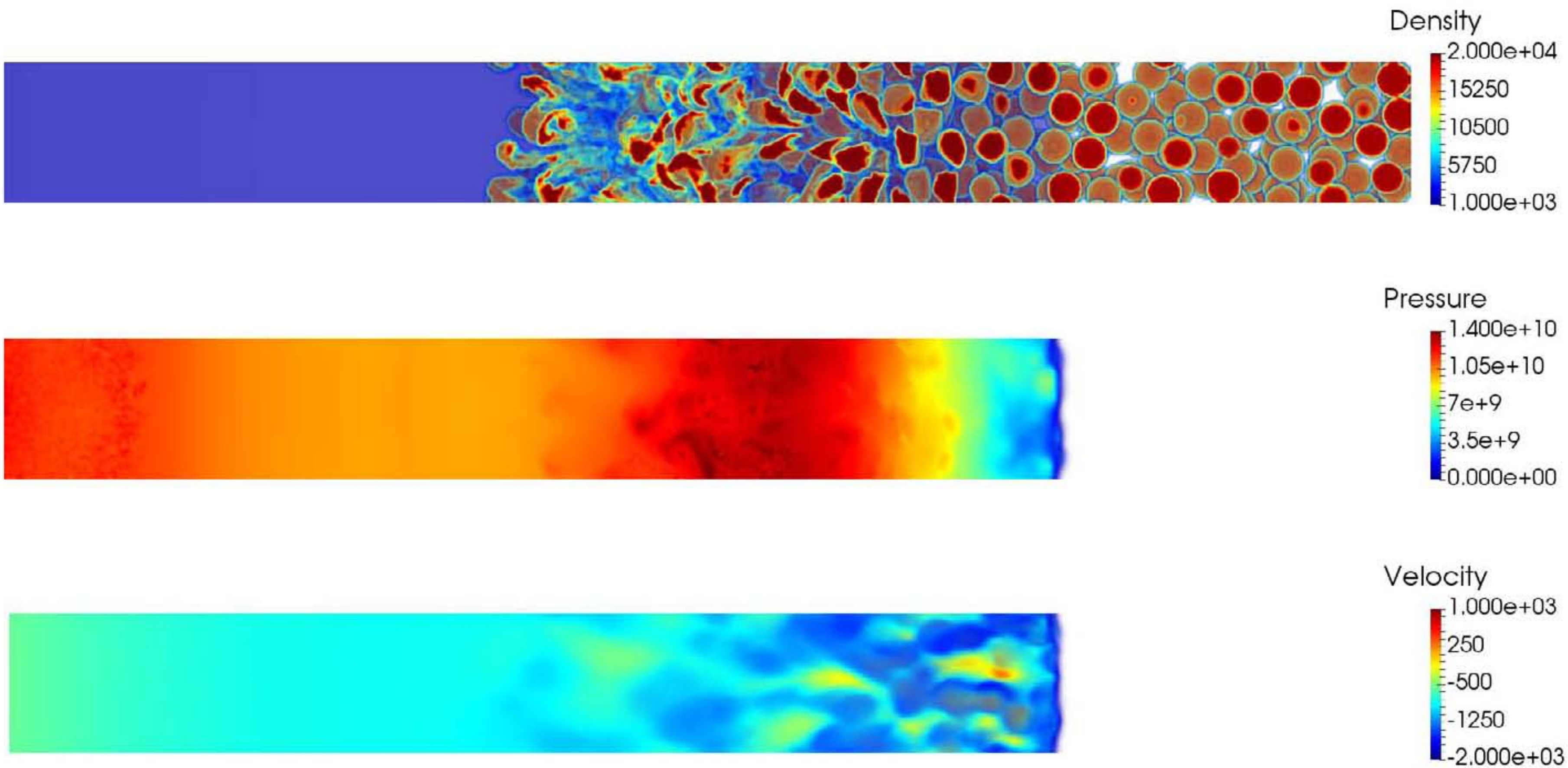
- УВ входит во взвесь. Начинается образование зоны скоростной неравновесности

Прохождение УВ через взвесь



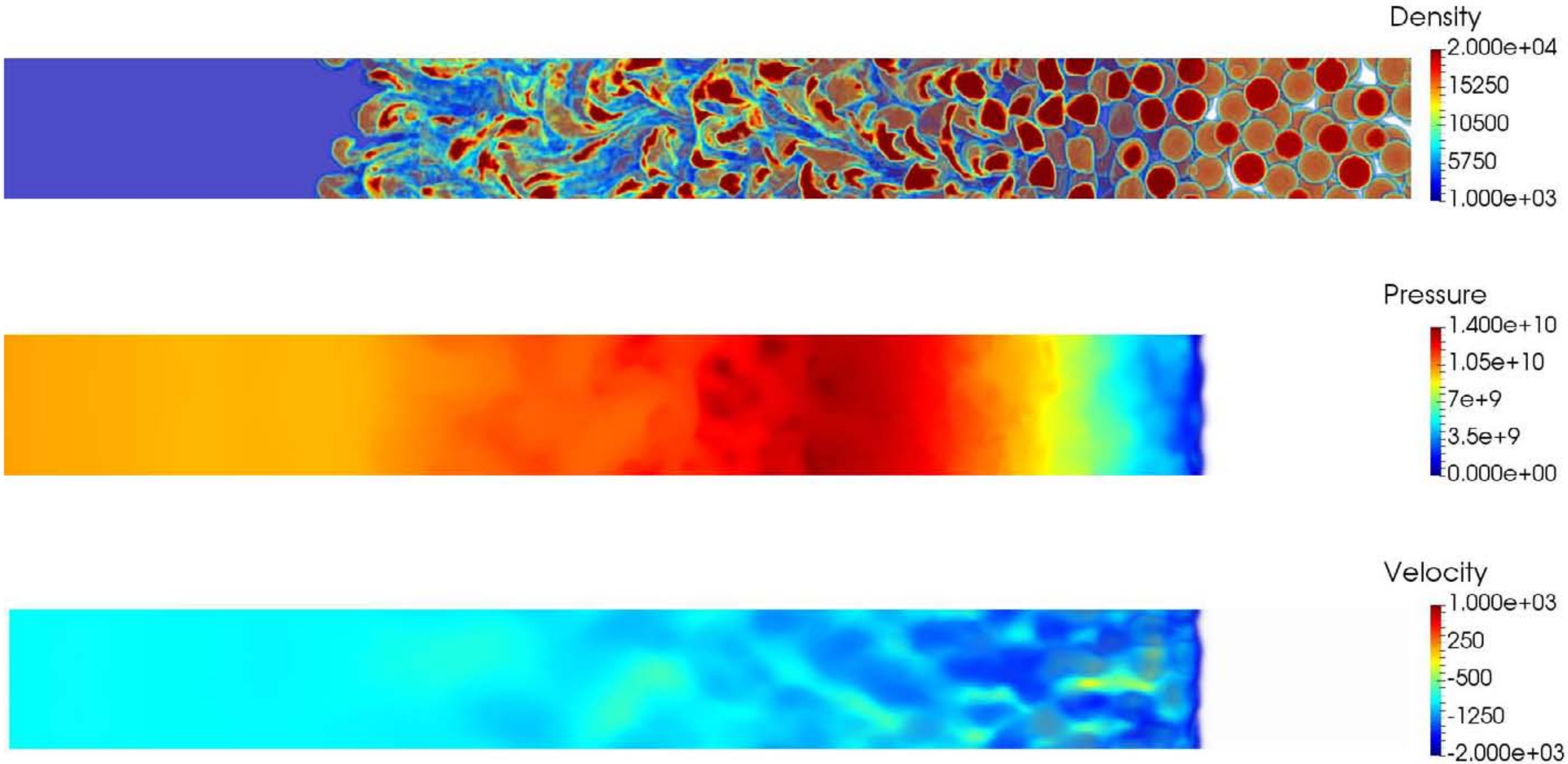
- УВ отражается от границы взвеси

Прохождение УВ через взвесь



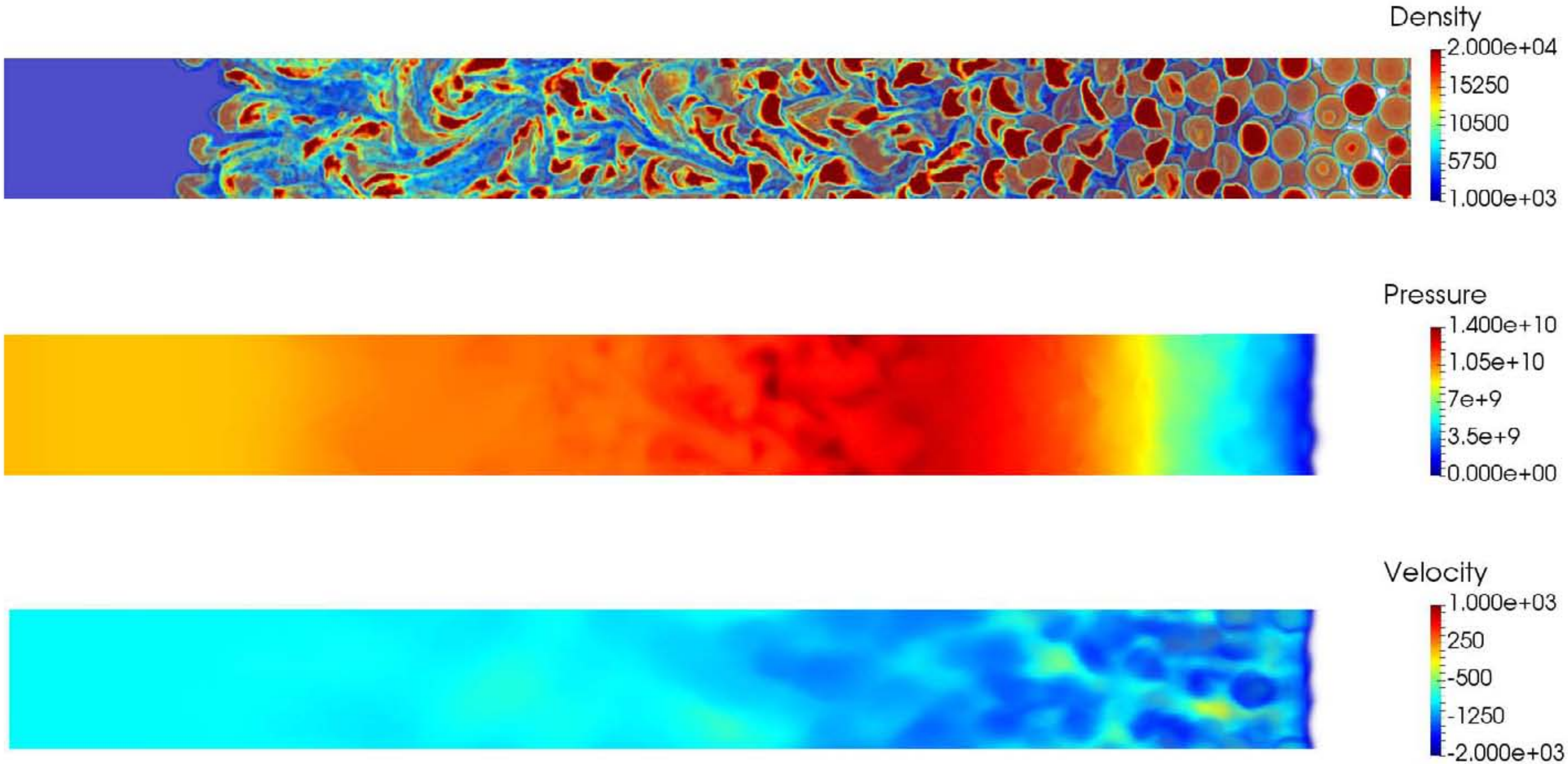
- Профиль прошедшей УВ меняет форму

Прохождение УВ через взвесь



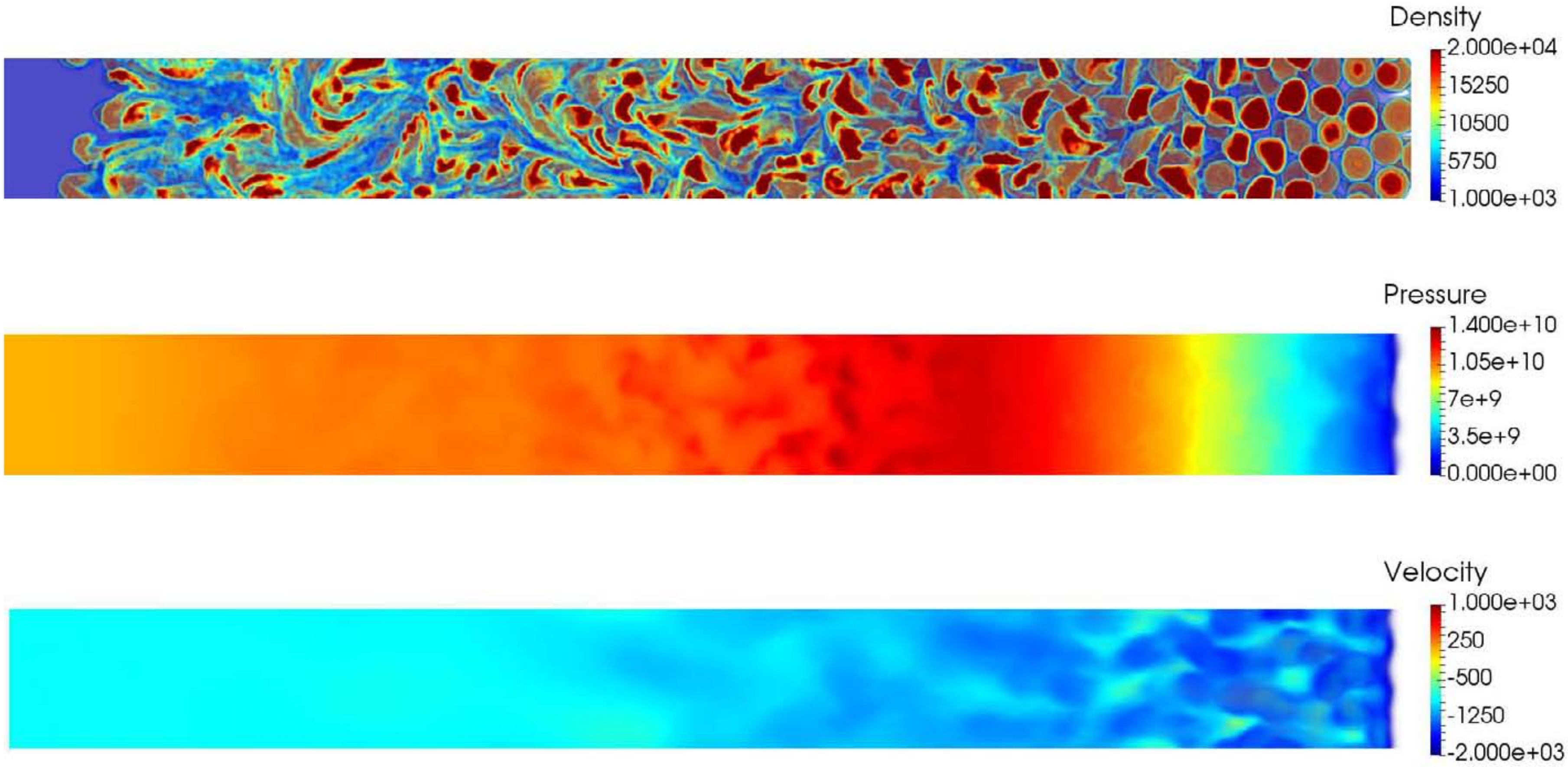
- В зоне, где «чистый» флюид вошел во взвесь, начинает устанавливаться скоростное равновесие

Прохождение УВ через взвесь



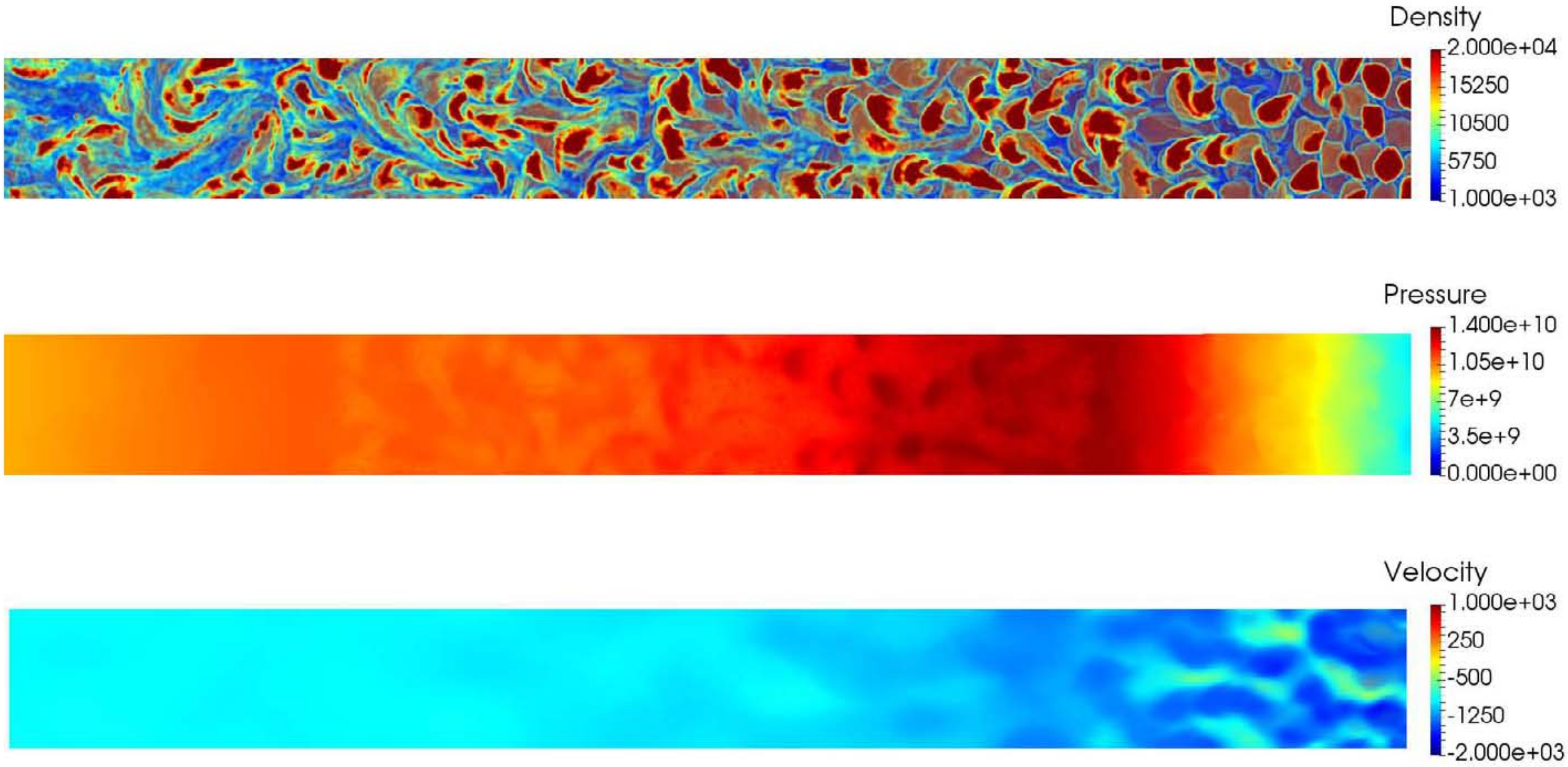
- Не наблюдается компактирования зоны фильтрации

Прохождение УВ через взвесь



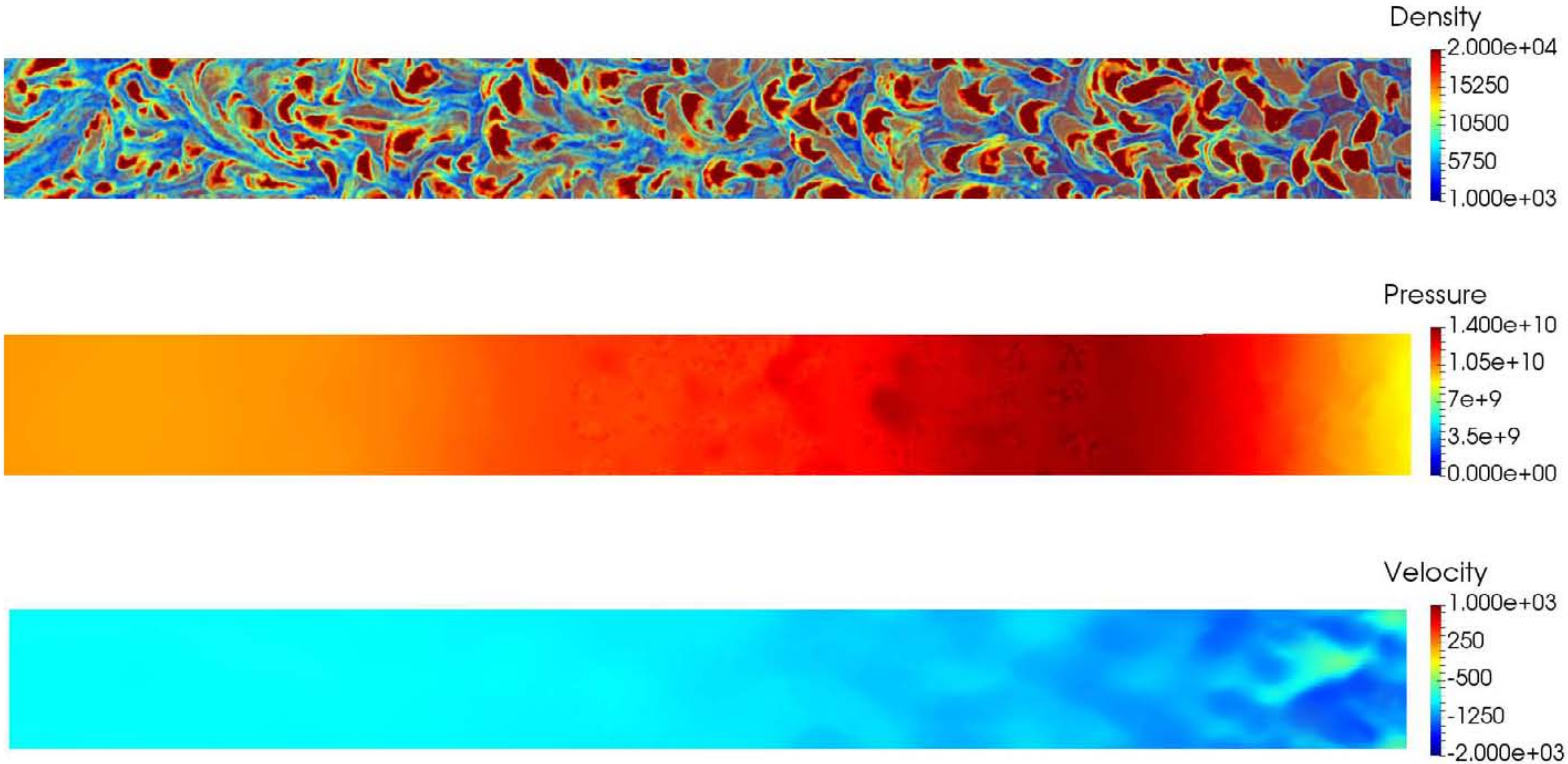
- Процесс продолжается

Прохождение УВ через взвесь



- Процесс продолжается

Прохождение УВ через взвесь



- Процесс продолжается
- Расчет 25 млн. частиц на 512 CPU-ядрах сутки (вся задача) до 150 нс

Заключение

Особенности кода

- Динамическая декомпозиция расчетной области между процессами на ячейки Вороного с локальной автоматической балансировкой нагрузки (только между соседними ячейками)
- Вывод данных через мастер-процесс
- Параллелизация с помощью MPI внутри и между узлами
- Язык программы: Fortran2003 (30000 строк)
- Входные данные: структурированный текстовый файл
- Форматы данных собственной разработки:

  1D профили, 2D карты сечений, частицы

Заключение

- Нами реализован алгоритм автобалансирующей декомпозиции по Вороному VD^3 для гидродинамических SPH расчетов.
- Тест на статической задаче показывает быстрое уменьшение времени ожидания коммуникаций за счёт алгоритма автоматической балансировки нагрузки.
- Наблюдается почти идеальная сильная масштабируемость: ускорение для сбалансированной системы из 50 млн SPH частиц растет с 128 до 1024 процессов почти линейно.
- Тесты на динамических задачах показывают ускорение расчета в разы (в зависимости от неоднородности распределения частиц) при использовании VD^3 по сравнению со статической декомпозицией. Автобалансировка позволяет поддерживать хорошую загрузку процессов в течение всего расчета.

Заключение

- Представленный алгоритм VD^3 подходит для любого метода частиц с коротким радиусом взаимодействия.
- Использование CSPH&VD^3 позволяет получать качественно новые результаты в силу расширения приложений метода сглаженных частиц на более сложные задачи.
- Получены качественно новые решения задач пыления, прохождения ударной волны через слой баллистически упакованных частиц, разрушения керамик и т.д.


СПАСИБО!