

4. Redmine – система управления программными проектами. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://www.redmine.org/>
5. BuildBot – система непрерывной интеграции. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://buildbot.net/>
6. FrogLogic Squish – автоматизированное тестирование графического интерфейса пользователя. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://www.froglogic.com/>
7. Python (x, y) – дистрибутив свободного научного и инженерного программного обеспечения для численных расчетов. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://python-xy.github.io/>
8. CppCheck – кроссплатформенный статический анализатор кода. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://cppcheck.sourceforge.net/>
9. Valgrind – инструментальное программное обеспечение, предназначенное для отладки использования памяти. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://www.valgrind.org/>
10. CMake – кроссплатформенная система автоматизации сборки программного обеспечения из исходного кода. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://cmake.org/>

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ НИМФА. СРЕДСТВА ПОСТРОЕНИЯ КОНЦЕПТУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ТЕРРИТОРИИ, СОДЕРЖАЩЕЙ ЯДЕРНЫЕ И РАДИАЦИОННО-ОПАСНЫЕ ОБЪЕКТЫ (ЯРОО). ОБРАБОТКА И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТА

М. Л. Сидоров, В. А. Пронин, Е. Н. Лысова, О. Р. Грахова, А. Д. Яруллин, Л. В. Гамов

Российский Федеральный Ядерный Центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Программный комплекс НИМФА представляет собой трехмерный компьютерный код, предназначенный для численного моделирования нестационарных трехмерных неизотермических геофильтрационных и геомиграционных потоков локального и регионального масштаба в напорных водоносных горизонтах, неоднородных по физическим свойствам.

При моделировании учитывается взаимодействие геофильтрационного и геомиграционного потоков с поверхностными водоемами и водотоками, а также опосредованно с атмосферными водными потоками (посредством задания на модели инфильтрационного питания и эвапотранспирации грунтовых вод).

Миграция растворенных радиоактивных и химических компонент (специй) рассматривается с учетом молекулярной диффузии, гидродинамической дисперсии, радиоактивного распада, а также задержки за счет обратимой сорбции на водовмещающих породах. При расчетах геофильтрации и геомиграции учитываются также плотностная дифференциация флюида в потоке, которая может быть обусловлена как тепловой, так и солевой конвекцией.

Программный комплекс НИМФА предназначен для проведения геофильтрационных и геомиграционных расчетов в геологической среде на участках размещения ЯРОО и прилегающих к ним территориях. Основными задачами численного моделирования, выполняемого с помощью программного комплекса НИМФА, являются

- расчет поля напоров, скоростей и траекторий геофильтрационного потока;
- расчет ореолов химического и радиоактивного загрязнения, распространяющегося в геофильтрационном потоке от ЯРОО, а также от других потенциальных источников загрязнения подземных вод (свалок ТБО, промышленных водоемов-накопителей, полей фильтрации и т. д.).

Источники загрязнения подземных вод и грунтов могут быть приурочены к разливам загрязняющих веществ на поверхность, к поверхностным водоемам и водотокам (в том числе технологическим), к нагнетательным скважинам и к участкам выщелачивания радиоактивных отходов из могильников и т. д.

Программный комплекс НИМФА не включает непосредственно модели источников загрязнения. Последние учитываются при моделировании как граничные условия и источники-стоки геофильтрационного и геомиграционного потоков и требуют специального обоснования при геофильтрационной и геомиграционной схематизации.

Программный комплекс НИМФА предназначен как для проектных, так и для эксплуатационных расчетов, а также может быть использован для обоснования безопасности ОИАЭ в документах, представляемых в Госатомнадзор России в рамках процедуры лицензирования ОИАЭ.

Программный комплекс НИМФА по погрешности расчетов заявляется к аттестации как средство инженерных расчетов.

Имеющийся на сегодняшний день опыт геофильтрационного и геомиграционного моделирования на объектах Госкорпорации «Росатом» свидетельствует, что программный комплекс НИМФА может быть использован для решения геоэкологических задач в широком диапазоне природно-техногенных условий.

На рис. 1 приведена блок-схема работы комплекса программ НИМФА. В препроцессоре пользователь задает все необходимые параметры задачи, описывает концептуальную модель объектов и т. п. На выходе из препроцессора генерируется файл-вариант формата XML, в который записываются все данные, заданные пользователем. Далее этот файл используется как файл входной информации для симулятора.

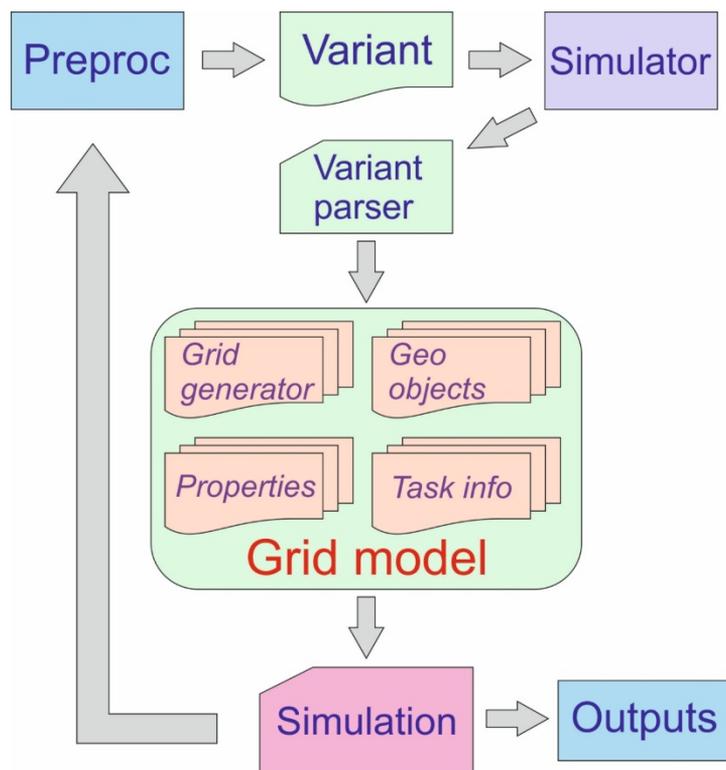


Рис. 1. Блок-схема комплекса программ НИМФА

В момент запуска симулятора, который может быть реализован как на локальной, так и на удаленной машине, файл-вариант разбирается с помощью парсера. В качестве основных составляющих при разборе файла-варианта можно выделить такие: информацию для сеточного генератора, описание геометрических объектов, описание свойств объектов и информацию о задаче. Из этих

составляющих формируется сеточная модель (на той машине, где реализуется счет задачи), и производятся вычисления на основе сеточной модели. В процессе счета формируются различные выходы о задаче и файлы-разрезы, которые можно использовать для анализа результатов счета в препроцессоре.

Используются трехмерные декартовы координаты (x, y, z) . Область моделирования – резервуар – многослойная. Геометрия каждого слоя пласта задается с помощью произвольного не самопересекающегося плоского контура и двух цифровых топографических карт – высот раздела пластов. Распределение свойств вмещающих пород задается в множестве ячеек, принадлежащих литологическим колонкам. Каждая колонка разбивается дополнительными поверхностями раздела на призмы с основанием, в общем случае многоугольным. Программа генерирует плановую и трехмерную сетку в начале расчета задачи [1]. Геометрическая модель геологических пластов предполагается постоянной по времени. Контрольными объемами для дискретизации уравнений служат ячейки построенной трехмерной сетки. Физические поля, такие как поле давления, концентрации и другие, представляются в центрах контрольных объемов. В одном объеме не может быть более одного набора фильтрационно-емкостных свойств.

В плоской двумерной ограничивающей резервуар области используется неструктурированная сетка из треугольников, четырехугольников или многоугольников. Двумерная сетка строится разными способами (шаблонный, фронтальный сферический метод). Образующиеся многоугольники не являются многоугольниками Вороного в общем случае.

Для дискретизации области используются следующие виды плановых сеток: регулярная четырехугольная (рис. 2,а), неструктурированная треугольная (рис. 2,б), неструктурированная многоугольная (рис. 2,в).

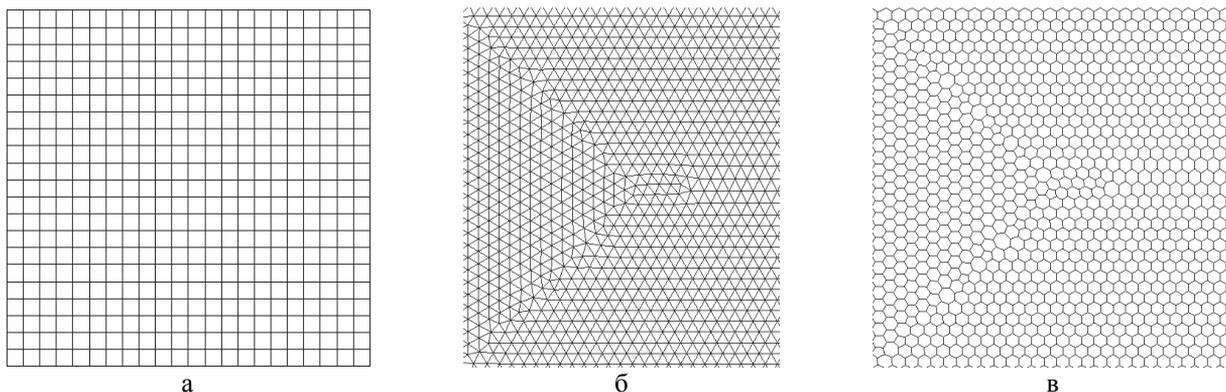


Рис. 2. Виды сеток, используемых в расчетах

Трехмерная сетка получается из двумерной с помощью нескольких преобразований – экструзии и опционального дробления. Ячейки первичной трехмерной сетки (в общем случае призмы с многоугольным основанием) являются конечными объемами, относительно которых записываются уравнения баланса.

История средств подготовки модели: GeoRND+RUM3D, NPP, NMC.

Среда разработки и инфраструктура проекта:

- Python >3.4 (язык разработки)
- Eclipse IDE Mars (среда разработки)
- PyDev (аналог WholeTomato Visual Assist для MS VS)
- Mercurial HG (распределенный репозиторий)
- Redmine (баг-трекер)
- Inkscape (работа с векторной графикой)
- NotePad++ (текстовый редактор)
- MikTeX (сборка PDF)
- Более 30 расширений Python

Подготовка модели

В препроцессоре готовится концептуальная модель территории (не сеточная!) Концептуальная Модель – модель высокого уровня, включающая в себя множество литографических структур с собственными геологическими объектами (геометрия и атрибуты)

Подготовка в стиле PMWIN (рис. 3).

- Создание слоев.
- Импорт карт поверхностей раздела (Surfer GRD)/Восстановление поверхностей по скважинным данным одним из реализованных методов.
- Импорт геологических объектов из (ESRI Shapefile, BLN)/Рисование своих объектов.
- Задание атрибутов объектов зависящих от времени, параметров расчета, фазовых свойств и т. д.

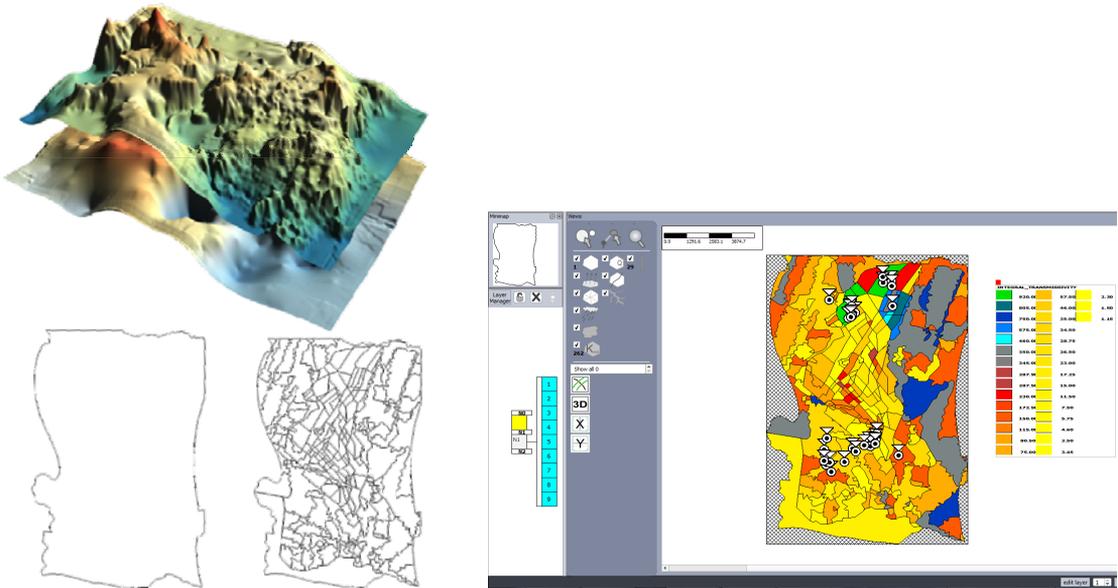


Рис. 3. Задание простым способом

Подготовка в стиле GMS (рис. 4).

- Комплексный подход к заданию стратиграфии (слои).
- Полуавтоматический метод создания моделей осадочных тел (в которых задаются геофильтрационные свойства) на основании данных в скважинах.
- Применения операций над множествами к полученным телам и учет специальных правил.
- Задание объектов, атрибутов (подобно PMWIN).

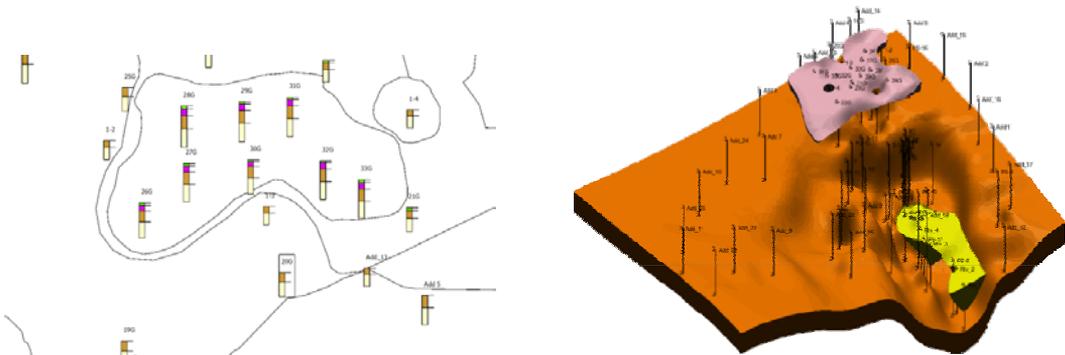


Рис. 4. Задание сложным способом

Анализ результатов расчета

- 3d нерегулярно распределенные точки в пространстве.
- 3d распределенные двоичные разрезы в специализированном виде.
- 3d ореолы загрязнений.
- Агрегированные данные по измерительным скважинам-экранам (CSV).
- Агрегированные данные по статьям водного баланса (CSV).

1D визуализация (рис. 5).

- Диаграммы рассеивания (данные и измерения).
- Статьи водного баланса по выделенным зонам.
- Временные ряды по скважинам и точкам в пространстве.

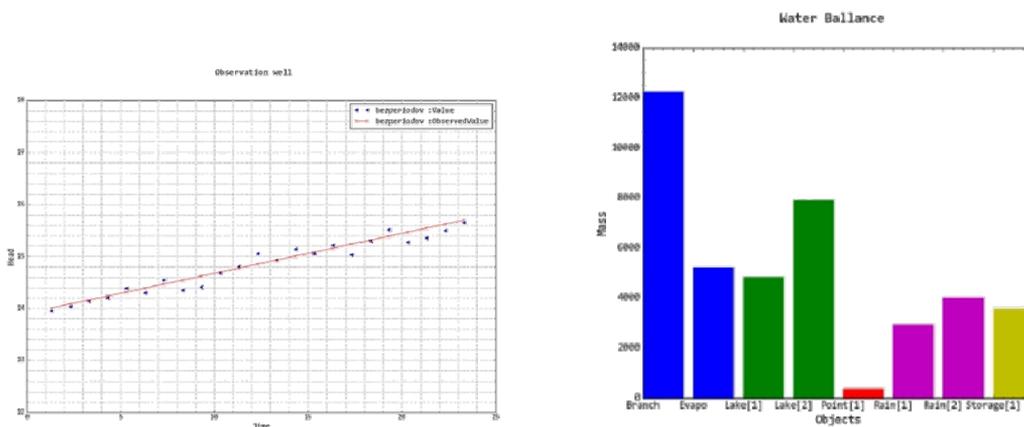


Рис. 5. 1d визуализация

3D визуализация (рис. 6).

- Слоеое представление данных (Полная трехмерность нужна в основном для показухи; для документов принимаются 2d данные по слоям).
- Максимальное использование Cython и Numpy в процедурах обработки (сечения, изолинии).
- Использование многопроцессорной обработки распределенных данных (multiprocessing).
- Дополнительное использование предвычисленных сечений, изолиний в процессе счета.

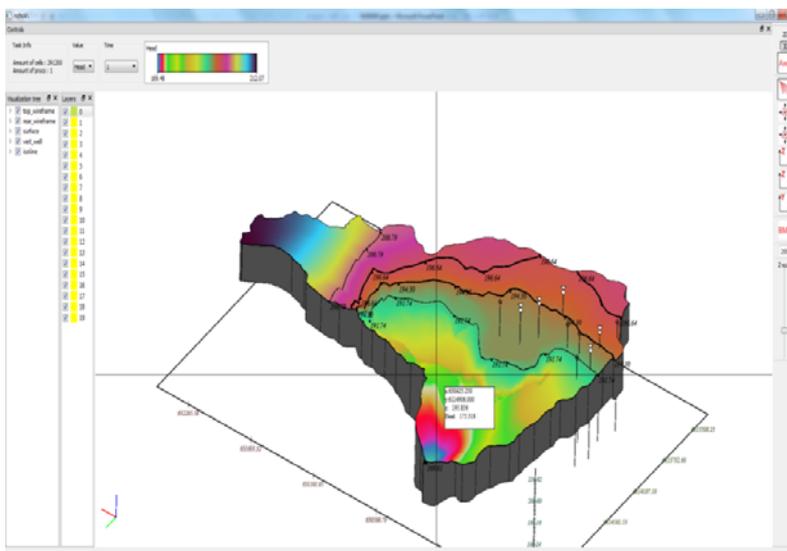


Рис. 6. 3d визуализация

Документирование проекта

- Руководство пользователя и разработчика создается с помощью SPHINX

Заключение

Для комплекса НИМФА реализовано программное средство NMC, предназначенное для подготовки концептуальной модели и просмотра результатов расчета в параллельном режиме.

ТЕХНОЛОГИЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ НА СУПЕР-ЭВМ

А. В. Снытников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск

Для решения в рамках кинетического подхода актуальных задач физики плазмы, таких как моделирование плазменно-пучкового взаимодействия, моделирование взаимодействия лазерного импульса с плазмой, солнечные вспышки II и III типа и др. была создана суперкомпьютерная технология для решения задач физики плазмы. Основными элементами технологии являются эйлерово-лагранжева декомпозиция расчетной области, реализация наиболее трудоемких расчетных процедур на ускорителях вычислений, параметризованная форма реализации метода частиц в ячейках и методика межархитектурного переноса программ.

Актуальность

Суперкомпьютерное моделирование в последнее время является важным инструментом проведения научных исследований в таких, например, областях науки, как астрофизика, физика плазмы, разработка новых материалов или новых лекарств. СуперЭВМ даже называют «третьей равноправной компонентой научной технологии» наряду с теорией и экспериментом. Приложения математического моделирования на суперЭВМ не ограничиваются собственно научными вопросами, а наоборот, включают в себя множество промышленных и оборонных задач. Это видно по зарубежной статистике использования наиболее крупных вычислительных машин: около половины (46 %) из них работают на промышленных предприятиях.

В последние годы (с 2010 по 2016 год) было опубликовано достаточно много статей (более 300) в различных международных журналах по тематике «эксафлопсные вычисления» (т. е. вычисления на перспективных суперЭВМ производительностью порядка 10^{18} операций с плавающей точкой в секунду), из них около трети посвящены решению различных прикладных задач. Среди множества прикладных задач, решаемых на суперЭВМ, задачи физики плазмы представляют большой интерес как с точки зрения выбора и обоснования модели (равновесная плазма или неравновесная, устойчивая или неустойчивая, магнитогидродинамическое описание или кинетика), так и с точки зрения вычислительных методов (решение уравнения Пуассона или уравнений Максвелла, выбор одного из многих вариантов решения кинетического уравнения или уравнений МГД) и, в особенности, с точки зрения разработки и программной реализации вычислительных алгоритмов (различные варианты декомпозиции расчетной области, организации межпроцессорных обменов, достижения оптимальной производительности).