

ЕВГЕНИЙ СТЁПИН: «НАША СПЕЦИАЛЬНОСТЬ – МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ С ЭКСТРЕМАЛЬНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ВЕЩЕСТВА»

2 октября 2024

Математическое моделирование с использованием высокопроизводительных расчетов сегодня стало неотъемлемой частью как фундаментальных научных исследований, так и разработок новых технологий. В МИФИ деятельность на этом фронте сосредоточена прежде всего в Центре инженерно-физических расчётов и суперкомпьютерного моделирования. В рубрике «Голос Науки» пресс-служба побеседовала с заместителем директора Суперкомпьютерного центра Евгением Стёпиным о развитии вычислительной инфраструктуры университета и о том, над какими проблемами сегодня работают сотрудники Центра.



Объединить инфраструктуру

- Евгений Викторович, можно ли сказать, что наш суперкомпьютерный центр отвечает за работоспособность суперкомпьютеров?

- Не совсем так. Суперкомпьютерные мощности размещаются в Управлении информатизации. У коллег есть соответствующий отдел, который отвечает за их работоспособность, за обновление системного и прикладного программного обеспечения, за модернизацию оборудования и самих вычислительных мощностей. А вот за математическое и численное моделирование различных

явлений и процессов с применением суперкомпьютерных технологий в МИФИ отвечает наш Центр. Вообще у МИФИ имеется целая серия вычислительных кластеров: с одной стороны, это общеуниверситетские кластеры, которыми могут пользоваться все сотрудники МИФИ, а также студенты и аспиранты для подготовки своих научно-исследовательских работ, а с другой стороны – специализированные расчеты проводятся на кластерах, которые принадлежат конкретным подразделениям. Например, у Центра суперкомпьютерного моделирования есть свой вычислительный кластер. То есть в университете существует сеть разрозненных кластеров, которые друг с другом не связаны, и они применяются для решения задач конкретных подразделений.

- А не надо их объединить?

- Да, есть стратегическое видение, что целесообразно объединить вычислительное оборудование университета в единую структуру, создать, возможно, центр коллективного пользования для того, чтобы не плодить дополнительные сущности, а именно развивать общую вычислительную инфраструктуру. Мы этот вопрос прорабатываем, в частности, в рамках «Программы развития НИЯУ МИФИ во взаимодействии с Госкорпорацией Росатом до 2030 года», в которую входит отдельный проект, связанный с суперкомпьютерным моделированием.

Вычислительная мощь регионов

- «Программа развития» должна помочь изменить нашу вычислительную инфраструктуру?

- Да, в рамках этой программы реализуется проект «Суперкомпьютерное моделирование» направления «Цифровой мир», связанный с созданием и развитием открытой экосистемы для решения кадровых и научно-технических задач в области отечественных цифровых решений и технологий суперкомпьютерного моделирования. В рамках этого проекта реализуется несколько крупных мероприятий, и одно из них – как раз модернизация инфраструктуры и вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра. Другое мероприятие нацелено на создание и развитие отделений Суперцентра в филиалах, и здесь ведущими площадками выступают СарФТИ и СФТИ. Таким образом наш суперкомпьютерный центр имеет распределенную структуру, а московская площадка является головной, выполняя координационную управленческую и интеграционную функцию по всей вычислительной тематике.

- Почему именно Саров и Снежинск?

- Исторически, еще в 2019 году, когда наш центр создавался, мы инициировали деятельность Центра именно вместе с Саровом. Саровский физико-технический институт активно развивает эту тематику, ведь он является основным источником высококвалифицированных кадров для РФЯЦ-ВНИИЭФ, в контур которого входит

Институт теоретической и математической физики. Как раз ИТМФ разработал и сейчас развивает программный пакет «Логос» – отечественную CAD/CAE-систему для математического моделирования и инженерного анализа с использованием суперкомпьютерных технологий. В свою очередь, снежинский филиал взаимодействует со вторым в нашей стране ядерным центром РФЯЦ-ВНИИТФ, для которого также существует острая потребность в специалистах в области высокопроизводительных расчетов. Но наши планы не ограничиваются двумя филиалами. Мы хотим развивать эту деятельность и в других обособленных структурных подразделениях. В частности, в рамках «Программы развития» один из наших ключевых показателей – это дальнейшее внедрение программного пакета в контур университета: так, к 2030-му году мы планируем внедрить «Логос» в образовательную, научно-исследовательскую и, возможно, коммерческую деятельность всех филиалов, попутно создавая отделения нашего Суперцентра там, где это будет актуально. Важно, что МИФИ как высшее учебное заведение может получать программный пакет «Логос» на безвозмездной основе для реализации образовательного процесса, в том числе в рамках основных образовательных программ и дополнительного профессионального образования. Ряд других наших филиалов либо запросили, либо уже имеют программный пакет: например, это институты в Балаково, Трёхгорном и Лесном.



Что может моделирование

- В первую очередь – для чего нужно численное моделирование и, в частности, пакет «Логос»?
- Это инструмент для проведения наукоемких расчетов в интересах высокотехнологичных предприятий, в том числе предприятий реального сектора экономики. На самом деле, если взять любое направление разработки новой

техники или технологии, любое исследование явлений природы, от взаимодействия элементарных частиц и до макромасштабных астрофизических явлений, то математическое моделирование и вычислительные эксперименты выступают здесь весомым подспорьем в изучении этих процессов. Зная физические законы, вы записываете их на математическом языке в виде уравнений и их систем. Эти системы уравнений могут быть и простыми, и сложными – в зависимости от сложности изучаемого явления и тех приближений и упрощений, которые мы на него накладываем. Если мы говорим о мультифизических процессах, то это совокупность систем уравнений, каждая из которых описывает тот или иной физический аспект происходящего процесса. Возьмем самый тривиальный пример — движение автомобиля по дорожному полотну. Несмотря на обыденность этого процесса, его моделирование и расчет может представлять из себя весьма трудоемкую задачу, если делать это «с нуля»: необходимо будет сначала разработать, а затем численно реализовать в программном коде физико-математическую модель, которая учитывала бы, в частности, обтекание автомобиля потоком набегающего воздуха, сцепление его колес с дорогой, динамику его подвески и, например, тепловыделение от двигателя. Чтобы этот путь не проходить каждый раз заново, как раз и используются готовые пакеты для инженерно-физического моделирования – в частности, пакет «Логос».

- А вы сами в этой связи чем занимаетесь?

- Лично моя научная работа связана с моделированием процессов в плазменных двигателях для космических аппаратов, а также магнитных ловушек для управляемого термоядерного синтеза. Если говорить о двигателях, то на горизонте до 2030-го года есть серия проектов по разработке и вводе в эксплуатацию подобных устройств, и для их эффективного математического и численного моделирования предпочтительнее двигаться от простого к сложному. То есть сначала создаются очень простые математические модели, которые описывают только часть каких-то явлений, сопутствующих исследуемой технологии. И эти математические модели могут описывать процесс даже не очень точно с точки зрения чисел, но, тем не менее, они дают очень важные качественные результаты и какие-то основные закономерности.

Например, если мы говорим о геометрии плазменного двигателя, то, проведя с помощью простой математической модели вычислительный эксперимент, в котором поменяем геометрию одного из электродов, мы сразу получим качественный результат – какая геометрия лучше. А когда мы получим набор таких прикладных выводов в терминах простых моделей, то уже можем сделать более сложную и высокоточную модель.

Что умеет суперкомпьютерный центр

- Создание таких моделей – главная задача вашего центра?

- У нас несколько направлений деятельности. Во-первых, мы разрабатываем физико-математические модели различных процессов и явлений в природе и технике. Во-вторых, мы пишем собственные программные коды и программные комплексы для решения широкого круга вычислительных задач. Наконец, мы имеем уникальные компетенции и опыт использования сложного прикладного программного обеспечения, включая пакет «Логос», для реализации вычислительных экспериментов.

- Вы можете назвать сильные стороны коллектива центра?

- Основная специализация нашего Суперцентра и ниша, которую мы сегодня уверенно занимаем в стране и мире – это суперкомпьютерное моделирование процессов в природе и технике с экстремальным состоянием вещества, то есть состоянием, отличным от привычного нам в обыденной жизни – и по температуре, и по скоростям, и по ряду других параметров. Например, это плазма и плазменная техника, это взаимодействие лазерного излучения с веществом, это молекулярное и квантово-молекулярное моделирование, это быстропротекающие процессы. Мы участвуем в исследованиях по таким темам как плазменные двигатели, управляемый термоядерный синтез, взаимодействие плазмы с поверхностью, сверхпроводимость, детонация, горение, взрыв.

- Давайте остановимся на конкретном примере – на плазменных двигателях.

- Это одно из ключевых направлений работы нашего суперкомпьютерного центра, и на этом примере хорошо понятно, как должен вычислительный эксперимент встраиваться в разработку реальной технологии. Здесь нам удалось создать взаимосвязь между инженерно-экспериментальной лабораторией – лабораторией плазменных ракетных двигателей Института ЛаПлаз – и нашими расчетными и теоретическими компетенциями в сфере моделирования процессов, которые происходят в том числе и в тех устройствах, которые в этой лаборатории создаются. В частности, мы занимаемся физико-математическим моделированием процессов в абляционном импульсном плазменном двигателе VERA для малых спутников-кубсатов, и к настоящему времени получили первые результаты в терминах «нуль-мерной интегральной» модели и сейчас занимаемся разработкой более точных моделей этого устройства. Другая задача – это моделирование процессов в магнитоплазодинамическом (МПД) двигателе, который предназначен для осуществления маршевого движения уже крупных космических аппаратов. Мы занимаемся и расчетами выходящего из плазменных ракетных двигателей плазменного потока и тем, как этот плазменный поток взаимодействует со стенками вакуумной камеры, где происходит отработка таких устройств в условиях, приближенных к космическому вакууму, а также диагностическими приборами, которые в ней располагаются. Для этих задач мы активно подключаем наших студентов и аспирантов, взаимодействуем с наши

друзьями и партнерами из внешних организаций – например, из Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.

От простого к сложному

- Можно несколько слов о тех моделях, которые вы при этом используете?

- Есть модели, основанные на уравнениях магнитной газодинамики, которая рассматривает плазму как сплошную среду. А есть модели, которые рассматривают плазму в терминах кинетической теории, и основным объектом исследования здесь является функция распределения частиц в фазовом пространстве времени и импульса. Также есть гибридные модели, когда одна компонента плазмы рассматривается в гидродинамическом приближении, а другая – описывается кинетическими уравнениями. Кинетическая модель более сложная, и она очень требовательна к вычислительным ресурсам. Модель на основе механики сплошной среды – магнитной газодинамики – более проста, но может давать менее точные результаты. Поэтому всё зависит от постановки задачи и точности, которую мы хотим получить.

- Разные проекты двигателей конкурируют между собой?

- Если говорить в контексте математических расчетов, то озвученные выше примеры скорее дополняют друг друга, позволяя при исследовании разных технологий создавать, а затем обрабатывать и усовершенствовать используемые нами подходы. Инструменты инженерного анализа и суперкомпьютерного моделирования играют одну из главных ролей в современном цикле разработки, проектирования и ввода в эксплуатацию высокотехнологичной продукции, поэтому наша деятельность актуальна и крайне востребована.

Беседовала Ксения Ерохина, пресс-служба МИФИ

Источник: официальный сайт НИЯУ МИФИ 2 октября 2024 года

<https://mephi.ru/press/news/23496>