

## 500 запросов на решение задач и некоторые результаты



### 3 500 запросов на решение задач и некоторые результаты

Проект, инициированный Фондом инфраструктурных и образовательных программ (ФИОП) ОАО РОСНАНО, стартовал в июне 2010 года. Объем финансирования со стороны ФИОП составил приблизительно 140 млн рублей. Цель проекта — ускорение процесса внедрения суперкомпьютерного моделирования для разработки и производства новых высокотехнологичных продуктов на промышленных предприятиях и в коммерческих компаниях.

В течение года компанией «Т-Сервисы» было обработано более 500 запросов на решение задач в нанотехнологической отрасли и других отраслях промышленности. Все они прошли строжайший конкурентный отбор, и лишь 200 из них было представлено на рассмотрение экспертного совета ФИОП, который по результатам восьми заседаний утвердил 47 инновационных задач.

#### АВТОРЫ:

**А.В. Мурашов** – директор Центра вычислительной экспертизы ЗАО «Т-Сервисы»; НИИ Механики МГУ имени М.В. Ломоносова,  
e-mail: Alexander.Murashov@t-services.ru

**Д.Ш. Султанов** – директор по маркетингу ЗАО «Т-Сервисы»,  
e-mail: Damir.Sultanov@t-services.ru

**А.С. Поздняков** – ведущий инженер-расчетчик ЗАО «Т-Сервисы»,  
e-mail: Alexander.Pozdnyakov@t-services.ru

В России рынок высокопроизводительных вычислений слишком разрозненный, он только начинает приобретать системность и самостоятельность. За последние несколько лет суперкомпьютеры появились и в государственных, и в коммерческих организациях. Но это лишь незначительно приблизило развитие отрасли к желаемым результатам. Доступ к сфере высокопроизводительных вычислений, в том числе и вследствие их высокой стоимости, по-прежнему ограничен. Компаниям среднего и малого бизнеса, НИИ и другим организациям, не имеющим собственных вычислителей, специализированного программного обеспечения и профильных специалистов, все еще сложно воспользоваться имеющейся возможностью и на практике оценить все плюсы перехода к использованию и внедрению инновационных технологий.

На сегодняшний день существует ряд компаний, оказывающих услуги в сфере суперкомпьютинга. Все они, как правило, специализируются на чем-то одном, будь то поставка вычислительного оборудования или специализированного программного обеспечения, обучение инженеров-расчетчиков, осуществление суперкомпьютерных расчетов в определенных предметных областях или услуги аренды программно-аппаратного комплекса. К сожалению, ни одна из подобных компаний не предоставляет услуг в области высокопроизводительных вычислений в комплексе.

В результате совокупность всех аспектов, связанных с развертыванием собственного вычислительного центра, необходимость поддержки со стороны государства и отсутствие широкопрофильных компаний, оказывающих комплексные услуги в области высокопроизводительных вычислений, создают барьер доступности к НРС-ресурсам (High Performance Computing, высокопроизводительные вычисления). Возникает потребность в создании инструмента, который бы позволил сделать высокопроизводительные вычисления доступными.

Один из примеров создания подобного инструмента при участии государства — «Проект по анализу и формированию рынка высокопроизводительных вычислений в nanoиндустрии и других отраслях экономики», организованный при поддержке государственной корпорации «Роснотех», а ныне ОАО «РОСНАНО», и Фонда инфраструктурных и образовательных программ (далее — Фонд).

По результатам открытого конкурса исполнителем проекта стало ЗАО «Т-Сервисы», входящее в холдинг «Т-Платформы». Ключевой задачей «Т-Сервисы» было проведение тщательного анализа рынка и выявление существующих потребностей промышленности и науки в высокопроизводительных вычислениях как средств оптимизации процессов проектирования и создания инновационных и конкурентоспособных продуктов.



Проект предполагал конкурентный отбор задач по ряду критериев, среди которых: принадлежность задачи к нанотехнологиям или приоритетным отраслям; целесообразность решения задачи методами суперкомпьютерного моделирования; степень инновационности проекта; экономический эффект от решения задачи.

В итоге было обработано и рассмотрено более 500 запросов на решение задач для таких приоритетных отраслей, как нанотехнологии, фармацевтика, энергетическое машиностроение, химическая и нефтегазовая отрасли. Все запросы прошли строгий отбор, и лишь 200 из них было представлено на рассмотрение экспертного совета Фонда, который по результатам восьми заседаний утвердил 47 задач.

В долевым соотношении участники проекта, прошедшие отбор, расположились так: промышленные предприятия и коммерческие компании – 60 %, научные коллективы – 40 %. Иные распределения представлены на рис. 1. Процесс решения задач оказался непростым, поскольку требовался индивидуальный подход к постановке каждой задачи, подбору оптимальной программно-аппаратной конфигурации и т.д. И здесь оказалось возможным опробовать модель комплексного сервиса по предоставлению услуг высокопроизводительных вычислений широкого профиля.

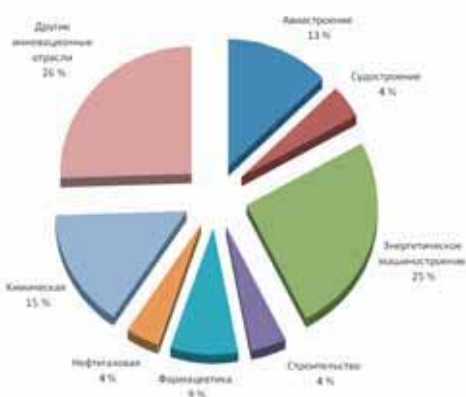


Рис. 1. Распределение решаемых задач по областям

двигалась с места. Эксперты относились к столь неординарному подходу крайне скептически, а модельные эксперименты, проведенные инициаторами разработки, не считались достаточным основанием для рассмотрения ее как перспективной

На сегодняшний день методы численного моделирования и используемые высокопроизводительные вычислительные ресурсы позволяют решать не просто практические задачи, а задачи, ранее относившиеся к неразрешимым из-за невозможности корректно осуществить их постановку или по причине отсутствия НРС-инструментов.

Одна из задач, решаемых в рамках проекта, – компьютерное моделирование обтекания гребного винта нового поколения (рис. 2). Три с лишним года разработка гребных винтов с нестандартным, волнистым типом профиля не



Рис. 2. Геометрии различных волнистых кромок гребных винтов, подлежавших расчету

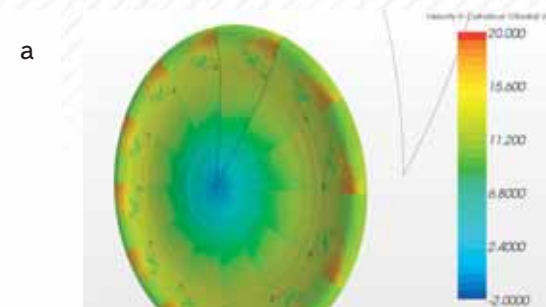


Рис. 3. Распределение радиальной скорости после воздействия лазера на каплю жидкого металла радиусом 10 мкм

и подлежащей последующему исследованию. Но проведенные в рамках проекта расчеты показали, что инновационный профиль работоспособен и имеет целый ряд преимуществ. В итоге разработчики получили одобрение на проведение дальнейших исследований, чтобы затем внедрить полученные результаты.

И это не единственный пример. В частности, моделирование задач нанолитографии позволит создать установку и методику производства полупроводниковых монокристаллов нового поколения. Важно ли это? Как известно, существующая ныне технология создания вычислительных процессоров не может преодолеть технологический барьер в 22 нанометра. Технология, для реализации которой были проведены расчеты (рис. 3), позволит перейти этот барьер и создать процессор с большим количеством транзисторов при лучших параметрах энергопотребления, тепловыделения и других характеристиках.

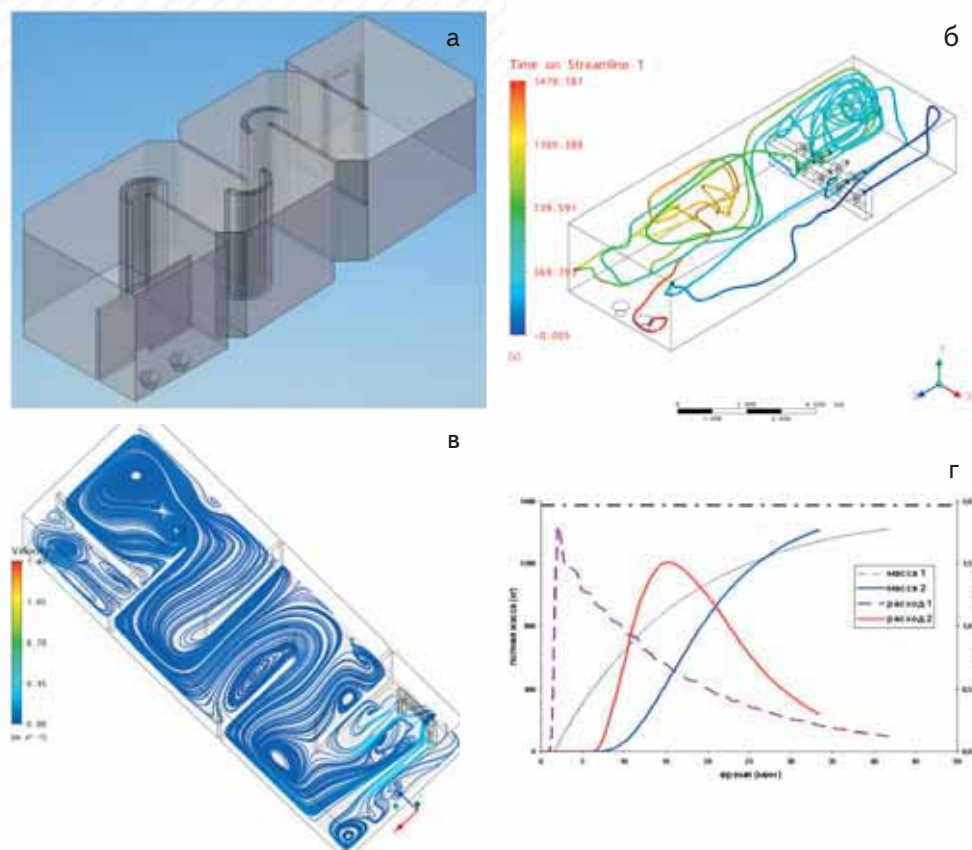


Рис. 4. Контактный резервуар: (а) геометрия разработанного КР; (б) линии тока для базового КР с цветовой шкалой оценки времени нахождения; (в) линии тока в простой асимметричной конструкции КР; (г) зависимость расхода и полной массы примеси на выходе из резервуара для двух вариантов конструкции

Или другая задача: моделирование течения в контактных резервуарах (КР). В коммунальном хозяйстве подавляющее большинство технологий водоподготовки для целей очистки и обеззараживания воды предусматривают использование химических реагентов и соблюдение временных норм их действия. Отклонение от этих норм (рис. 4) может стать средством массового поражения. Целью моделирования было получение оптимальной конфигурации контактного резервуара.

Участие в данном проекте позволило научным и производственным организациям воспользоваться всем комплексом услуг по численному моделированию

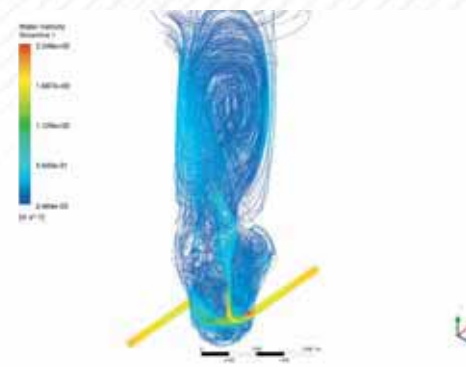


Рис. 5. Вихреобразование в реакторе

с использованием суперкомпьютеров. Полученные ими результаты расчетов могут быть применены при оптимизации существующих собственных разработок и технологий, как, например, течение водных взвесей в гидродинамических вихревых реакторах, или для получения данных о структурных и механических свойствах пенных пленок.

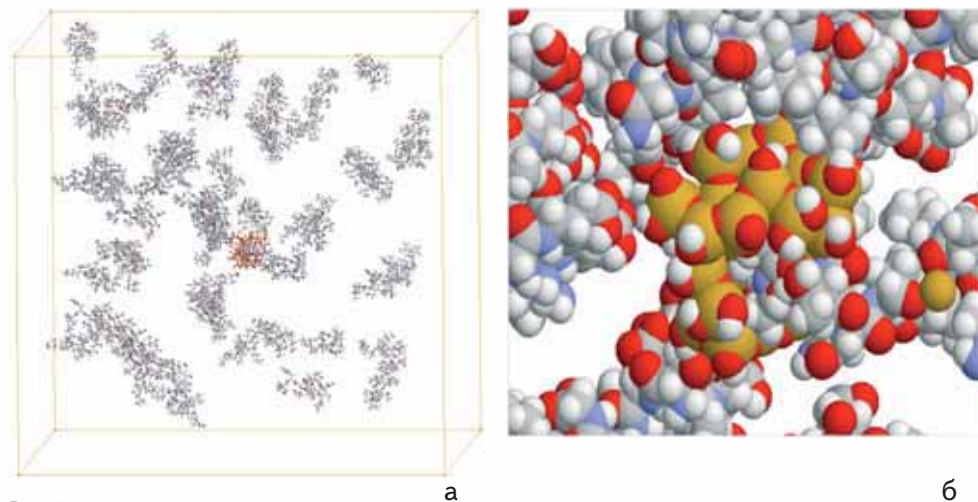
В первом случае речь идет о гидродинамическом вихревом реакторе (рис. 5). Применение гидродинамических реакторов для умягчения воды в хозяйственно-питьевом водоснабжении — наиболее массовое и экономически значимое применение данных реакторов, так как более трети запасов подземных вод России, используемых для питьевого водоснабжения населения, имеют жесткость, превышающую санитарные нормы. Удаление из воды избытков кальция (Ca) и магния (Mg) (умягчение) актуально для коммунального водоснабжения целого ряда регионов России. Удаление (Ca) также актуально и в химводоподготовке котельных, в атомной промышленности, при утилизации концентрата установок обратного осмоса и нанофильтрации, а также в ряде других промышленных процессов.

В ходе решения задачи в рамках реализуемого нами проекта было определено, что изначально предложенная разработчиками оптимизация конструкции гидродинамического вихревого реактора малоэффективна, так как по результатам проведенных расчетов большая часть реагента будет скапливаться в нижней области реактора и не будет участвовать в очистке воды. Анализ полученных результатов позволил разработчикам успешно оптимизировать геометрические параметры конструкции реакторов различной производительности; определить дисперсный состав, концентрацию и порядок ввода кристаллизирующей загрузки, а также оптимальные технологические режимы (скорость, расходы, введение реагента).

Для производства пенобетона наилучшего качества необходимо использовать стабилизатор пены — пленки зелей. Однако, ввиду малой толщины самой пленки, не прибегая к суперкомпьютерным расчетам, невозможно получить данные о структурных и механических свойствах пенных пленок экспериментальным способом. Знание таких характеристик позволяют определить



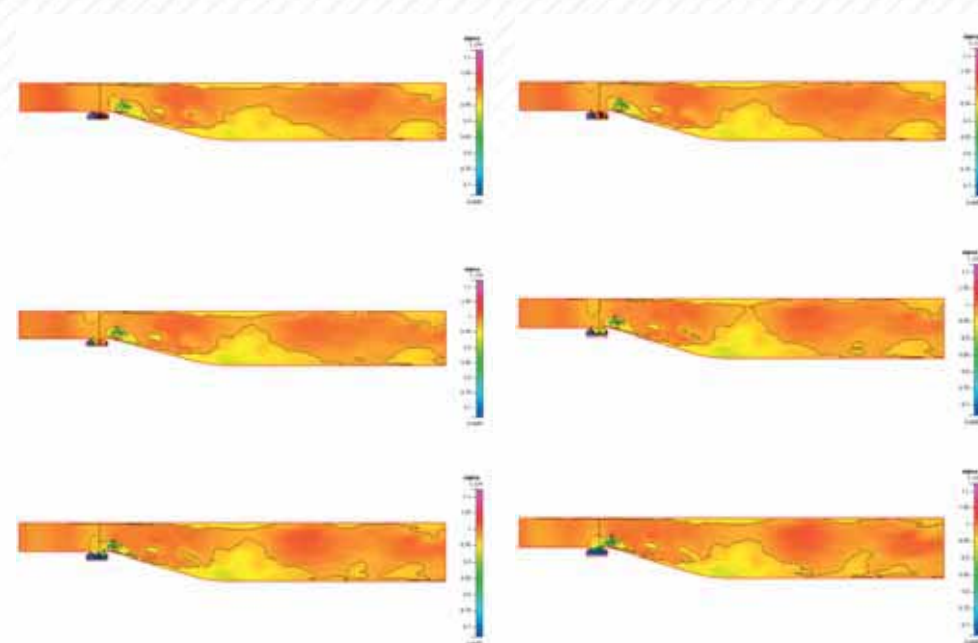
оптимальные технологии производства пенобетонов, например, выяснить целесообразность применения золь размерами порядка 1 нм (рис. 6). В результате анализа механизма взаимодействия рассматриваемых веществ удалось определить параметры различных добавок, повышающих качественные характеристики бетонов.



**Рис. 6.** Структура кремнепротеинового комплекса с концентрацией протеина 4 % в расчетной ячейке (а) и частица кремнезема с адсорбированными на ней цепочками протеина и при большем увеличении (б)

Или еще один пример — задача по анализу турбулентных течений в воздухозаборниках и диффузорах авиационных двигателей (рис. 7), которую решал ЦИАМ им. П.И. Баранова для собственных нужд. Только развитие методов прямого численного моделирования позволило рассчитать все интересующие процессы управления течением в каналах двигателей с помощью пассивных и активных средств. Оптимизированные устройства управления позволяют уменьшить газодинамические потери в каналах двигателей в 2–3 раза, что приводит к уменьшению удельного расхода топлива, улучшению экологических характеристик и повышает надежность двигателей.

Разрабатываемые установки могут быть применены в наземных энергоустановках и газо- и нефтеперекачивающих станциях, судовых и локомотивных энергоустановках, поэтому подобная высокоэффективная технология управления потоком в каналах газотурбинных силовых установок относится к критическим технологиям федерального уровня в области, применение ко-



**Рис. 7.** Последовательность срезов по времени коэффициента полного давления в продольном сечении канала турбины имеет и государственное значение в части экологической безопасности и ресурсосбережения.

Непосредственно для компании-исполнителя одним из главных моментов участия в проекте стало то, что на протяжении всего времени, пока шла реализация проекта, вокруг компании аккумулировались экспертные знания и опыт в области высокопроизводительных вычислений. В проект были вовлечены профильные специалисты, инженеры-расчетчики из совершенно разных предметных областей, включая биотехнологию, фармакологию и молекулярную физику. Крайне важно их взаимодействие и обмен опытом. Хорошо еще и то, что появляется возможность расширить круг вовлеченных в отрасль специалистов разных профилей и возрастов.

В результате, если реализация такого проекта даст возможность хотя бы небольшой части государственных и коммерческих предприятий опробовать современные подходы к развитию собственного производства, можно считать его успешным шагом на пути к формированию и стандартизации важного, специфического и наукоемкого рынка высокопроизводительных вычислений.