

**Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова**

**Научная конференция
«ЛОМОНОСОВСКИЕ ЧТЕНИЯ»
15–25 апреля 2019 г.**

Секция высокопроизводительные вычисления

Тезисы докладов

**Межфакультетская кафедра
высокопроизводительных вычислений**

**Москва
2019**

Содержание

1. Программа заседаний	3
2. Ф.С. Зайцев, Ф.А. Анисеев. Суперкомпьютерное моделирование бутстреп-тока в плазме термоядерных реакторов JET и ITER	4
3. А.Г. Шишкин. Управление плотностями дейтерия и трития в термоядерном реакторе ITER	6
4. Е.П. Сучков. Применение среды EnetComposer для эффективного решения задачи о реконструкции равновесия плазмы в установке ITER	8
5. Ф.А. Анисеев. Разработка системы мониторинга и визуализации данных вычислительного эксперимента VShell на языке Python 3	9

ПРОГРАММА ЗАСЕДАНИЙ

СЕКЦИЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Межфакультетская кафедра высокопроизводительных вычислений

17 апреля, среда, 13.00

Учебный корпус, 4 этаж, ауд. 404

1. К 90-летию со дня рождения академика Д.П. Костомарова. Вступительное слово.
Доклад профессора Зайцева Ф.С.
2. Суперкомпьютерное моделирование бутстреп-тока в плазме термоядерных реакторов JET и ITER.
Доклад профессора Зайцева Ф.С., инженера Аникеева Ф.А.
3. Управление плотностями дейтерия и трития в термоядерном реакторе ITER.
Доклад доцента Шишкина А.Г.
4. Применение среды EnetComposer для эффективного решения задачи о реконструкции равновесия плазмы в установке ITER.
Доклад ассистента Сучкова Е.П.
5. Разработка системы мониторинга и визуализации данных вычислительного эксперимента VDSHELL на языке Python 3.
Доклад инженера Аникеева Ф.А.

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БУТСТРЕП-ТОКА В ПЛАЗМЕ ТЕРМОЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ JET И ITER

Ф.С. Зайцев^{1,2}, Ф.А. Аникеев^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
межфакультетская кафедра высокопроизводительных вычислений.

²Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва.
fza@mail.ru

Одним из приоритетов научно-технологического развития РФ является переход к экологически чистой и ресурсосберегающей энергетике. К перспективным направлениям относится производство энергии на основе управляемого термоядерного синтеза (УТС) в тороидальных системах с магнитным удержанием плазмы. С участием России строится международный экспериментальный термоядерный реактор ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor, www.iter.org), который призван показать целесообразность использования термоядерного синтеза в качестве источника энергии.

Важнейшая задача в УТС – разработка программных комплексов, позволяющих адекватно моделировать поведение плазмы. Развитые математические модели и вычислительный эксперимент открывают возможность глубокого изучения физических явлений, достоверного прогнозирования, уменьшения расходов на дорогостоящие эксперименты, решения задач оптимизации, что в результате приближает начало промышленного применения термоядерной энергетике.

Современные супер-ЭВМ и параллельные технологии позволяют перейти к математическому моделированию УТС с использованием исходных физических законов без вовлечения существенных упрощений и потери тонких, но значимых физических эффектов [1].

В тороидальной плазме присутствует целый ряд электрических токов различной природы. Важную роль играют токи, вызванные градиентом давления, в том числе так называемый бутстреп-ток, см. п. 4.1.5 в [1] и приведённую там библиографию. Значительный бутстреп-ток играет важную роль в осуществлении квазистационарных режимов и повышении эффективности термоядерного реактора. В ITER предполагаемая доля бутстреп-тока составляет более 30% полного тока плазмы. Поэтому детальное изучение бутстреп-тока, а также других электрических токов имеет принципиальное значение.

Ранее расчёт бутстреп-тока проводился аналитически или полуаналитически в так называемой неоклассической теории [2, 3], а также с помощью численного решения усреднённого трёхмерного (3D) кинетического уравнения [1]. Однако в таких подходах использовались упрощения, сужающие область применимости результатов.

В докладе сформулирована новая постановка задачи о вычислении электрического тока в тороидальной плазме, вызванного градиентом давления, в шестимерном (6D) фазовом пространстве с использованием полулагранжева подхода. Представлен новый эффективный параллельный алгоритм для численного решения системы нелинейных интегро-дифференциальных 6D-кинетических уравнений с оператором кулоновских столкновений, существенно использующий технологии MPI, OpenMP, OpenCL и возможности современных графических процессоров. Обсуждены результаты расчётов для параметров плазмы в реакторах JET и ITER по созданному авторами коду DiFF-SLPK (Distribution Function Finder – Semi-Lagrangian Particle Kinetics).

Показано хорошее соответствие численного решения модельных задач известным ранее предельным случаям. Однако в реальных условиях зависимость бутстреп-тока от радиуса существенно отличается от предсказанной упрощёнными методами. Максимум бутстреп-тока в установках JET и ITER оказывается существенно смещён к границе плазмы.

Предложенная методика может быть применена для высокоточного решения на минисупер-ЭВМ и суперкомпьютерах петафлопного класса НИИСИ РАН большого класса задач физики высокотемпературной плазмы сложной геометрии, изучение которых затруднено в рамках существующих подходов. К таким задачам относится, например, вычисление бутстреп-тока альфа-частиц – продукта термоядерного синтеза, расчёт электрического тока, создаваемого инжектированными в плазму нейтралами, моделирование радиальных электрических полей и неустойчивостей плазмы.

Работа выполнена при поддержке по программе фундаментальных исследований № I.2.П27 Президиума РАН.

Литература.

1. F.S. Zaitsev. Mathematical modeling of toroidal plasma evolution. English edition. - MAKS Press, 2014, 688 p.
2. Галеев А.А., Сагдеев Р.З. «Неоклассическая» теория диффузии. Вопросы теории плазмы. - М.: Атомиздат, 1973, вып. 7, с. 205-245.
3. Sauter O., Angioni C., Lin-Liu Y.R. Neoclassical conductivity and bootstrap current formulas for general axisymmetric equilibria and arbitrary collisionality regime // Physics of Plasmas, Vol. 6, No. 7, 1999. pp. 2834-2839. Sauter O., Angioni C., Lin-Liu Y.R. ERRATUM. // Physics of Plasmas, Vol. 9, No. 12, 2002. P. 5140.

УПРАВЛЕНИЕ ПЛОТНОСТЬЮ ДЕЙТЕРИЯ И ТРИТИЯ В ТЕРМОЯДЕРНОМ РЕАКТОРЕ ITER

А.Г. Шишкин^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
межфакультетская кафедра высокопроизводительных вычислений.

²Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва.
fza@mail.ru

Одними из наиболее важных и в то же время сложных задач, возникающих при математическом моделировании высокотемпературной плазмы в устройствах токамак, являются задачи автоматического управления высокотемпературной плазмой тороидальной конфигурации [1, 2]. В данной работе предложен алгоритм системы автоматического управления с обратной связью изотопным составом термоядерного топлива в плазме строящегося международного токамака-реактора ITER. Алгоритм не имеет аналогов.

В отличие от традиционных подходов в УТС (управляемый термоядерный синтез) алгоритм построен на базе методов, позволяющих синтезировать контроллер динамически в реальном времени на основе данных о состоянии плазмы в предыдущие моменты времени, в том числе, данных диагностики NPA [3].

В дейтерий-тритиевой смеси может протекать целый ряд различных ядерных реакций. Для моделирования процесса управления составом дейтериево-тритиевой плазмы выбраны несколько из них, представляющих основной интерес с точки зрения выделения энергии при термоядерном горении. Управление составом плазмы осуществляется с помощью построения контроллера LQR на каждом шаге расчета эволюции плазмы.

Адекватность разработанной модели была проверена с помощью её реализации в аппаратно-программном комплексе моделирования и управления плазмой HASP CS [4], создаваемом в НИИСИ РАН. При проведении вычислительных экспериментов выбирались параметры плазмы, соответствующие Сценарию 2 режима работы термоядерного реактора ITER. Отметим, что дополнительную сложность задаче придаёт тот факт, что из-за особенностей построения LQR контроллера, система получается чрезвычайно плохо обусловленной с числом обусловленности матриц порядка 1020. Для решения этой проблемы за основу был взят подход, заключающийся в специальном выборе весовых матриц алгоритма LQR.

Как показывают проведенные вычислительные эксперименты, разработанный метод управления плазмой с обратной связью позволяет с высокой точностью удерживать требуемые параметры плазмы в заданных пределах.

На примере модельной задачи продемонстрирована возможность эффективного управления процентным составом термоядерного D-T топлива в ITER. В ходе суперкомпьютерных экспериментов на супер-ЭВМ НИИСИ РАН сформулированы рекомендации для инженерного исполнения систем управлений плазмой в ITER.

Работа выполнена при поддержке по программе фундаментальных исследований № I.2.П27 Президиума РАН.

Литература.

1. F.S. Zaitsev. Mathematical modeling of toroidal plasma evolution. English edition. - MAKS Press, 2014, 688 p.

2. Ф.С. Зайцев, А.Г. Шишкин, А.А. Лукьяница, Е.П. Сучков, С.В. Степанов, Ф.А. Аникеев. Базовые компоненты аппаратно-программного комплекса моделирования и управления тороидальной плазмой методом эpsilon-сетей на гетерогенных мини-суперкомпьютерах // Труды НИИСИ РАН. - 2016. - Т. 6. - №1 - С. 36-49.
3. M.I. Mironov, F.S. Zaitsev, N.N. Gorelenkov, V.I. Afanasyev, F.V. Chernyshev, V.G. Nesenevich and M.P. Petrov. Sawtooth mixing of alphas, knock-on D, and T ions, and its influence on NPA spectra in ITER plasma. // Nucl. Fusion. 2018, v. 58, ref. 082030, 9 p.
4. F.S. Zaitsev, A.G. Shishkin, A.A. Lukianitsa, E.P. Suchkov, S.V. Stepanov and F.A. Anikeev. The Basic Components of Software-Hardware System for Modeling and Control of the Toroidal Plasma by Epsilon-Nets on Heterogeneous Mini-Supercomputers // Communications in Computational Physics, vol. 24, №1, pp. 1-26, 2018.

ПРИМЕНЕНИЕ СРЕДЫ ENETCOMPOSER ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О РЕКОНСТРУКЦИИ РАВНОВЕСИЯ ПЛАЗМЫ В УСТАНОВКЕ ITER

Е.П. Сучков^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
межфакультетская кафедра высокопроизводительных вычислений.

²Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва.
suchkov.egor@cs.msu.su

Важным направлением термоядерных исследований является реконструкция равновесия плазмы по измерениям. Одним из эффективных способов решения данной задачи является применение методики эpsilon-сетей [1, 2]. При решении задачи с помощью данной методики обычно приходится иметь дело с большим количеством входных элементов эpsilon-сетей, а также большим набором полученных решений, для анализа которых требуется значительное количество времени. Поэтому очень важно иметь инструмент, позволяющий легко модифицировать исходный набор сетей, а также автоматически отбирать наиболее интересные решения.

В докладе пойдет речь о разработанном на языке Python графическом интерфейсе EnetComposer, позволяющем решать обозначенные задачи. Представлено описание особенностей использования библиотек Python для достижения поставленных целей, а также детально изложены подходы к использованию интерфейса для работы с инфраструктурой хранения экспериментальных и вычислительных данных строящегося международного токамака-реактора ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor).

Будут представлены детали взаимодействия с модулем построения эpsilon-сетей и кодом SDSS [1-4], решающим методом эpsilon-сетей некорректные обратные задачи о восстановлении по измерениям внутреннего состояния плазмы, ее формы и положения.

Работа выполнена при поддержке по программе фундаментальных исследований № I.2.П27 Президиума РАН.

Литература.

1. Ф.С. Зайцев. Математическое моделирование эволюции тороидальной плазмы. 2-е издание. – Москва: МАКС Пресс, 2011, 640 с.
2. Zaitsev F.S. Mathematical modeling of toroidal plasma evolution. English edition. – Moscow: MAKS Press, 2014, 688 p.
3. R. Coelho, S. Matejčík, P. McCarthy, E.P. Suchkov, F.S. Zaitsev, EU-IM Team, ASDEX Upgrade Team. Evaluation of epsilon-net calculated equilibrium reconstruction error bars in the European integrated modeling platform. // Fusion Sci. Technol. 2016, v. 69, N 3, p. 611-619.
4. R. Coelho, W. Zwingmann, B. Faugeras, E. Giovannozzi, P. McCarthy, E.P. Suchkov, F.S. Zaitsev, J. Hollocombe, N. Hawkes, G. Szepesi, D. Terranova and JET contributors and EUROfusion-IM Team. Plasma equilibrium reconstruction of JET discharges using the IMAS modelling infrastructure. // 27th IAEA Fusion Energy Conference - IAEA CN-258, India, 22-27 October 2018, 2p. Paper.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ МОНИТОРИНГА И ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДАННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА VDSHELL НА ЯЗЫКЕ PYTHON 3

Ф.А. Аникеев^{1,2}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, межфакультетская кафедра высокопроизводительных вычислений.

²Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва.
snowfed@gmail.com

Продвинутое научные программные комплексы генерируют сотни и даже тысячи выходных файлов [1]. Для корректного анализа и визуализации этих файлов необходимо учитывать формат данных, а также их физические характеристики: единицы измерения, названия координатных осей и т.п. Такая ситуация типична для программного обеспечения в области управляемого термоядерного синтеза (УТС). Для эффективной работы с объёмными выходными данными необходимо иметь удобный инструмент для их мониторинга и визуализации.

Существует ряд графических пакетов общего назначения, которые позволяют визуализировать сложнейшие данные разных размерностей, см., например, ParaView [2] и VisIt [3]. Однако применение подобных пакетов существенно осложняется тем, что выходные данные, сгенерированные кодами в своём формате, необходимо вручную приводить к некоторому стандартному формату сложной структуры, или, если графический пакет позволяет, писать пользовательский plugin для такого преобразования. Кроме того, пользователь обычно ограничен стандартным функционалом графического пакета и не имеет возможности существенно расширить его. Инструменты общего назначения хороши для одноразовой визуализации фиксированного набора данных, но обычно не эффективны при мониторинге результатов работы физических кодов и многократной визуализации данных, специфических для конкретного программного комплекса.

Для эффективной визуализации выходных данных ряда плазменных кодов, в том числе кода SCoPE, разработан инструмент SCoPEShell [4]. Впоследствии на его основе создан значительно более совершенный пакет VDSHELL [5], также написанный на Java.

У языка Java есть несомненные достоинства по сравнению с Python 3 (далее Python), в частности, производительность, поскольку Java-код, как правило, предварительно компилируется в бинарный, в то время как для Python стандартной является компиляция на этапе исполнения (runtime). Тем не менее у Python есть два существенных преимущества в применении к рассматриваемой задаче: краткость и простота написания кода и удобный и надёжный модуль визуализации данных Matplotlib [6]. Кроме того, у новых выпусков Java наблюдаются проблемы с поддержкой программ, использующих библиотеки предыдущих выпусков.

В рассматриваемой задаче мониторинга и визуализации данных производительность самого языка Python оказывается не критичной, потому что основная нагрузка ложится на хорошо оптимизированные модули NumPy [7] (работа с численными данными) и Matplotlib. Поэтому, с учётом отмеченных преимуществ языка Python, а также не всегда положительного опыта использования Java, возникла задача о переносе VDSHELL на Python.

Для разработки удобного графического интерфейса пользователя применён эффективный кроссплатформенный фреймворк Qt5 (PyQt5) [8].

В докладе будут представлены особенности реализации кроссплатформенной системы VDSHELL на Python, показаны новые функциональные возможности по сравнению

с предшествующей Java-версией, в частности, синхронная анимация нескольких независимых двумерных и трёхмерных графиков. На примере визуализации сечения плазмы будет продемонстрировано преимущество разработки собственной системы по сравнению с использованием программных пакетов общего назначения. Кроме того, будут изложены особенности внедрения VShell в комплекс моделирования и управления плазмой HASP CS [5], разрабатываемый в НИИСИ РАН.

Работа выполнена при поддержке по программе фундаментальных исследований № 1.33П Президиума РАН.

Литература.

1. Ф.С. Зайцев. Математическое моделирование эволюции тороидальной плазмы. 2-е издание. – Москва: МАКС Пресс, 2011, 640 с. Zaitsev F.S. Mathematical modeling of toroidal plasma evolution. English edition. – Moscow: MAKS Press, 2014, 688 p.
2. U. Ayachit. The ParaView Guide: A Parallel Visualization Application - Kitware, 2015. P. 276.
3. H. Childs et. al. VisIt: An End-User Tool for Visualizing and Analyzing Very Large Data // High Performance Visualization-Enabling Extreme-Scale Scientific Insight, 2012, P. 357-372.
4. D.P. Kostomarov, F.S. Zaitsev, A.G. Shishkin, and S.V. Stepanov The ScopeShell Graphic Interface: Support for Computational Experiments and Data Visualization // Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics, vol. 34, № 4, 2010, P. 191–197.
5. F.S. Zaitsev, A.G. Shishkin, A.A. Lukianitsa, E.P. Suchkov, S.V. Stepanov and F.A. Anikeev The Basic Components of Software-Hardware System for Modeling and Control of the Toroidal Plasma by Epsilon-Nets on Heterogeneous Mini-Supercomputers // Communications in Computational Physics, vol. 24, № 1, 2018, P. 1-26.
6. J.D. Hunter. Matplotlib: A 2D graphics environment // Computing in Science & Engineering, vol. 9, № 3, 2007, P. 90-95.
7. S. Walt, S.C. Colbert, G. Varoquaux. The NumPy Array: A Structure for Efficient Numerical Computation // Computing in Science & Engineering, vol. 13, № 2, 2011, P. 22-30.
8. Официальная страница PyQt5:
<https://www.riverbankcomputing.com/software/pyqt>