



Четверушкин Б.Н., Гасилов В.А.,
Новиков В.Г., Ольховская О.Г.,
Дорофеева Е.Ю., Бойко И.М.

Проект NuFuSE и
разработка РМГД-методик
для предсказательного
моделирования процессов в
энергетических
термоядерных устройствах

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Проект NuFuSE и разработка РМГД-методик для предсказательного моделирования процессов в энергетических термоядерных устройствах / Б.Н.Четверушкин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2014. № 5. 24 с.
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-5>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

**Б. Н. Четверушкин, В. А. Гасилов, В. Г. Новиков,
О. Г. Ольховская, Е. Ю. Дорофеева, И. М. Бойко**

Проект NuFuSE
и разработка РМГД-методик
для предсказательного моделирования
процессов в энергетических
термоядерных устройствах

Москва — 2014

Б. Н. Четверушкин, В. А. Гасилов, В. Г. Новиков, О. Г. Ольховская, Е. Ю. Дорофеева, И. М. Бойко.

Проект NuFuSE и разработка РМГД-методик для предсказательного моделирования процессов в энергетических термоядерных устройствах

Международный проект NuFuSE ставит своей целью реализацию на петафлопных и перспективных эксафлопных вычислительных системах комплексных плазменных моделей, которые позволят проводить полномасштабное предсказательное моделирование проектируемых энергетических термоядерных устройств. В рамках этого проекта в ИПМ им. М. В. Келдыша создаются базовые компьютерные модели и алгоритмы для исследования гидродинамики и явлений переноса в диверторе Токамака с помощью высокопроизводительных вычислений. РМГД-код MARPLE дополнен полуэмпирической гибридной моделью турбулентности для расчета плазменных течений в диверторе, моделью переноса излучения с учетом угловой зависимости функции распределения фотонов на основе самосопряженного уравнения, двухтабличной интерполяцией свойств вещества для неравновесного излучения. 3D РМГД-код использовался для исследования масштабируемости и тестирования эффективности реализации сложных моделей мультифизики. Показана хорошая масштабируемость базовых алгоритмов при увеличении числа вычислительных ядер до $32 \cdot 10^3$, а размеров сетки – до $7,9 \cdot 10^8$ тетраэдральных ячеек.

Ключевые слова: эксафлопные вычислительные системы, ИТЕР, РМГД моделирование плазмы, масштабируемость

B. N. Chetverushkin, V. A. Gasilov, V. G. Novikov, O. G. Olkhovskaya, E. Yu. Dorofeeva, I. M. Boyko.

Exaflop computations and the fusion energy devices simulation prospects

Implementation of complex plasma models at multipetaflop and exaflop computing systems in the international NuFuSE project can provide full-scale predictive simulation of upcoming fusion energy devices. Keldysh team is developing and testing basic computer models and algorithms for hydrodynamics and energy transfer in the ITER divertor using high performance computing. The basic RMHD code MARPLE was enhanced with the semi-empirical hybrid turbulence model, the second-order self-adjoint equation for radiation transport, and plasma and radiation non-equilibrium accounted via two-tables interpolation of matter properties. 3D RMHD code was used for scalability studies and efficiency testing up to 32K computational cores on unstructured meshes up to $7.9 \cdot 10^8$ tetrahedral cells.

Key words: exaflop computing systems, ITER, RMHD plasma simulation, scalability

Оглавление

Введение	3
Разработка и усовершенствование основной гидродинамической модели	6
<i>Общее описание кода MARPLE</i>	6
<i>Методика магнитогидродинамического расчета, учитывающая ограничения на параметры дискретизации сплошной среды</i>	9
<i>Модель турбулентности</i>	11
<i>Модель излучения в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия</i>	15
<i>Самосопряженное уравнение переноса лучистой энергии</i>	16
Исследования эффективности и масштабируемости кода	19
Заключение	22
Литература	23

Введение

Основное внимание в исследованиях по ядерному синтезу в последние десятилетия уделяется токамакам – устройствам на основе магнитного удержания. Крупнейшим в мире действующим токамаком является британская установка JET, на которой в 1997 году была достигнута рекордная мощность управляемого термоядерного синтеза – 16 МВт. Проектная мощность сооружаемой в г. Кадараш (Франция) международной установки ITER [1] многократно выше – 500 МВт. Работы по строительству экспериментального комплекса ITER стартовали в 2010 году. Завершение сборки реактора планируется на 2019 год, на 2020 год намечено начало экспериментов с водородной плазмой, а на 2027 год – начало экспериментов с дейтерий-третиевой плазмой (по данным с www.iter.org). Год 2027 не представляется близким будущим, однако объем работ по строительству зданий, сооружению установки и подготовке ее к экспериментам столь велик, что опубликованный перспективный план подразумевает весьма напряженный рабочий график для участников проекта ITER.

Рассматривая компьютерное моделирование как средство поддержки строительства реактора Токамак, международное сообщество специалистов в области математического моделирования формирует проекты развития новых

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант No. 11-07-93939-ДЖИ8-а). Расчеты выполнены на суперкомпьютерах К-100 (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН), MBC-100K (МЦЦ РАН), ЛОМОНОСОВ (НИВЦ МГУ) и Helios (IFERC, EU(F4E) – Japan Broader Approach collaboration).

численных кодов. Установка ITER, как и ее многочисленные предшественники, нацелена на широкомасштабную научно-исследовательскую работу. Несмотря на то, что к началу строительства экспериментального комплекса собственно проектирование ITER полностью завершено и полным ходом развернуто изготовление его компонент, создание данного реактора рассматривается как принципиально необходимый шаг для последующего создания промышленного прототипа термоядерной электростанции. Таким образом, будет выдвинут ряд новых физических и инженерных проблем, для решения которых потребуются создание новых компьютерных моделей и численных кодов, способных обеспечить эффективное использование ЭВМ нового поколения мульти-петафлопного и эксафлопного уровней производительности, и, тем самым, способных поддерживать надежными прогнозами планируемые на Токамаках эксперименты.

Создание программного обеспечения для предсказательного моделирования процессов в Токамак-реакторе не будет успешным без решения серьезной проблемы обеспечения совместного изучения высокотемпературной плазмы и ее взаимодействия с конструкционными материалами реактора. Очевидно, здесь имеется обширное поле для развития комплексных численных моделей.

Эксперименты и расчеты показывают сложность задачи сдерживания тепловых потоков из объема плазмы на стенки термоядерного реактора на уровне 10 МВт/м^2 (что сравнимо с воздействием на носовую часть космического аппарата при спуске в атмосфере Земли). Состояние плазмы в диверторе Токамака (устройство для сбора отработанного топлива) прямо связано с плотностью и температурой пристеночной плазмы выше по потоку за счет быстрого переноса параллельно магнитному полю. Поэтому пристеночная область сильно влияет на производительность внутренней области термоядерного реактора.

Предсказательные расчеты движения пристеночной плазмы с согласованием решений для дивертора и средней части реактора остаются сложной задачей. Это объясняется многомасштабностью структур плазмы и магнитного поля, а также множеством разночастотных процессов: турбулентность, магнитогидродинамические волны, многокомпонентная газодинамика, лучистый теплообмен, перенос загрязнений, плазмохимические процессы. Столь широкий охват процессов станет реалистичным при использовании новых многомасштабных алгоритмов и эффективной эксплуатации высокопроизводительных компьютеров.

Реализация комплексных плазменных моделей на петафлопных вычислительных системах позволит получать высокоточное решение интегрированной задачи в масштабе ITER за несколько часов вместо 3-х месяцев в настоящее время. Поэтому важнейшей задачей сегодняшнего дня является критический анализ имеющихся вычислительных инструментов (алгоритмы, коды) в отношении возможности масштабирования на компьютеры новых поколений — мульти-петафлопные и эксафлопные. Масштабируемость

кодов, создаваемых для предсказательного моделирования экспериментов на системах термоядерного синтеза с магнитным удержанием, изучается в рамках международного проекта NuFuSE (Nuclear Fusion Simulations at Exascale) [2].

Многообразие плазменных процессов учитывается в интегрированных кодах сочетанием моделей “из первопринципов” с полуэмпирическими моделями. Так, в кодах для расчета пристеночной плазмы в области “выше по потоку” ранние модели переноса поперек поля заменяются кинетическими моделями турбулентности, а “ниже по потоку” используются модели химии пристеночной плазмы и табличные данные по свойствам материалов.

Учет всего многообразия процессов в центральной, пристеночной и диверторной частях плазмы станет возможным при сочетании новых надежных многомерных алгоритмов [3] с эффективным использованием высокопроизводительных компьютеров.

Группа разработчиков из ИПМ им. М.В. Келдыша РАН в проекте NuFuSE занимается созданием базовых компьютерных моделей радиационной плазмодинамики и программных средств, которые, как предполагается, будут использоваться для численного анализа тепло- и массообмена в диверторе Токамака. Слово «базовый» означает, что модели создавались первоначально на основе известных и достаточно хорошо изученных постановок начально-краевых задач для уравнений математической физики. Содержание моделей будет развиваться по мере освоения конкретной физической информации, получаемой из экспериментов и теории. Полномасштабные модели диверторной плазмы, создаваемые на основе МГД-теории, впоследствии будут использоваться для интеграции с кодами, моделирующими пристеночную плазму и плазму центральной части Токамака. Разработка и тестирование этих моделей осуществляется с использованием программных средств разработанного в ИПМ РАН пакета прикладных программ MARPLE [4], предметной областью которого являются задачи динамики плазмы высокой плотности энергии. Основные направления исследований группы в рамках проекта NuFuSE в настоящее время таковы:

- разработка базовых компьютерных плазмодинамических моделей в рамках приближения магнитной гидродинамики с учетом эффектов неравновесности плазмы и излучения;
- разработка новых алгоритмов с высокими показателями масштабируемости для высокопроизводительной техники;
- тестирование программного обеспечения путем решения модельных задач по тепло-массопереносу плазмы с учетом геометрии дивертора на высокопроизводительной вычислительной технике;
- использование существующего трехмерного МГД кода для оценки перспектив применимости созданных методик на системах эксафлопной производительности: исследование масштабируемости и эффективности реализации комплексной мультифизической модели на 10^4 и более вычислительных ядер.

Разработка и усовершенствование основной гидродинамической модели

Общее описание кода MARPLE

Код MARPLE – полномасштабный исследовательский код, предназначенный для решения задач мультифизики и использующий как передовые знания по физике, математике и численным методам, так и функциональность современных высокопроизводительных вычислительных машин. Программный комплекс MARPLE состоит из вычислительной среды (инфраструктуры) для параллельного решения начально-краевых задач на неструктурированных сетках, и физических солверов, разработанных в этой среде.

В программном комплексе MARPLE реализованы следующие физические модели:

- одножидкостная двухтемпературная МГД модель, включающая электрон-ионный энергообмен и обобщенный закон Ома;
- анизотропная электро- и теплопроводность в магнитном поле;
- лучистый теплообмен: многогрупповая спектральная модель, диффузионная модель, Sn-метод (метод дискретных ординат);
- широкодиапазонные уравнения состояния вещества, транспортные коэффициенты и оптические свойства: аналитические или табличные – код TERMOS (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) [5];
- модель многокомпонентной конвекции-диффузии;
- полуэмпирическая модель турбулентности.

Основные численные методики, используемые в MARPLE:

- смешанные неструктурированные и блочные сетки: тетраэдральные, гексаэдральные, призматические элементы и их комбинации;
- конечно-объемные аппроксимации на основе TVD/ENO методик высокого разрешения для уравнений идеальной МГД, неявные схемы на основе оригинального варианта метода Галеркина с разрывными базисными функциями для диссипативных процессов;
- схема расщепления по физическим процессам для РМГД системы, обладающая свойствами суммарной аппроксимации и консервативности;
- схема интегрирования по времени “предиктор-корректор” второго порядка точности.

Основные принципы разработки программного пакета MARPLE:

- выполнение расчетов на высокопроизводительных массивно-параллельных системах с распределенной памятью на основе геометрического параллелизма (декомпозиции расчетной области), с применением технологии MPI;
- реализация большого числа сервисных функций (ввод-вывод данных, операции с расчетными сетками, поддержка параллельных вычислений) на уровне вычислительной инфраструктуры;

- динамическая работа с вычислительными объектами на уровне вычислительной среды, что позволяет создавать объекты физических солверов, аппроксимаций, граничных условий и любые иные вычислительные объекты с минимальными затратами ресурсов и обеспечивает унификацию их интерфейсов, а также автоматическое управление выделяемой памятью;
- иерархическая структура физических солверов; возможность проведения расчетов в нескольких физических подобластях, управляемых независимо; возможность внедрения новых физических и математических моделей;
- автоматическое создание резервных копий, возможность вручную задавать точки восстановления, гибкая система журналирования;
- объектно-ориентированное и обобщенное программирование на базе языка C++, современные технологии разработки программного обеспечения;
- кроссплатформенность.

Для подготовки расчетных областей с нетривиальной геометрией разработаны процедуры импорта расчетных сеток [6] из интегрированной CAD-CAE системы с открытым исходным кодом SALOME (<http://www.salome-platform.org/>). Подготовка данных включает описание геометрии, нанесение атрибутов (выделение подобластей и граничных элементов), генерацию и последующее улучшение расчетной сетки. Ниже показан общий вид дивертора ITER в целом (рисунок 1.1) и одна сменная кассета дивертора (рисунок 1.2). Рисунки 2.1 – 2.3 поэтапно иллюстрируют процесс подготовки расчетной области для численного моделирования течения плазмы в диверторе. На рисунке 2.3 показана первоначально построенная тетраэдральная сетка. В дальнейшем осуществляется измельчение этой сетки. Для изучения масштабируемости кода были построены сетки из 10^8 и более ячеек.



Рис. 1.1. Общий вид дивертора ITER

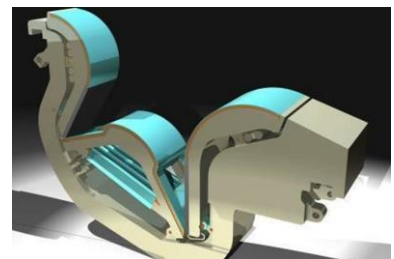


Рис. 1.2. Кассета дивертора

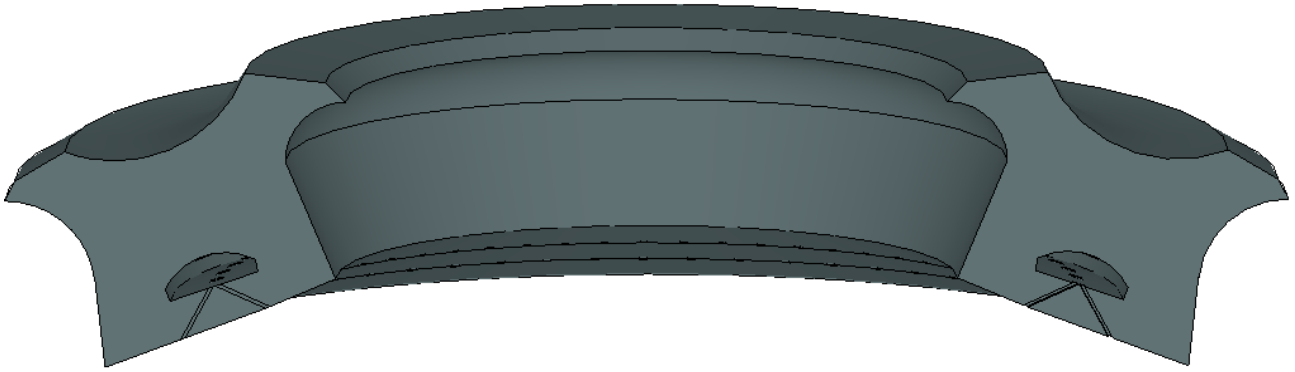


Рис. 2.1 CAD-модель дивертора

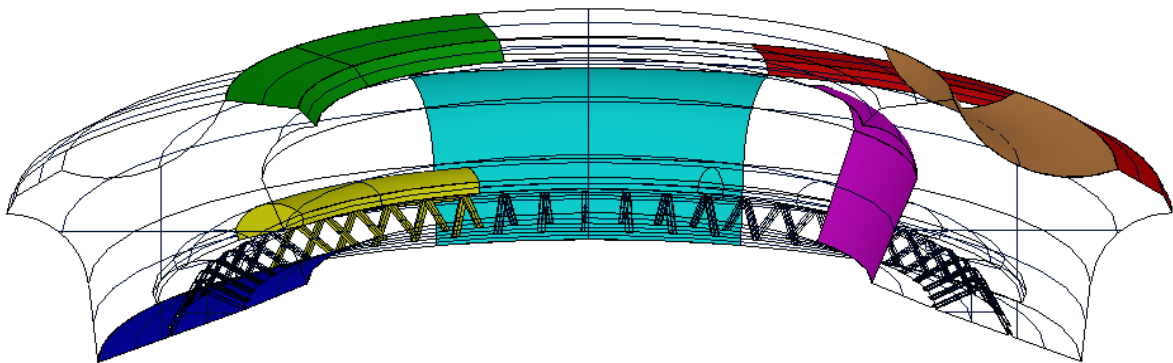


Рис. 2.2 Нанесение атрибутов — обозначение граничных областей

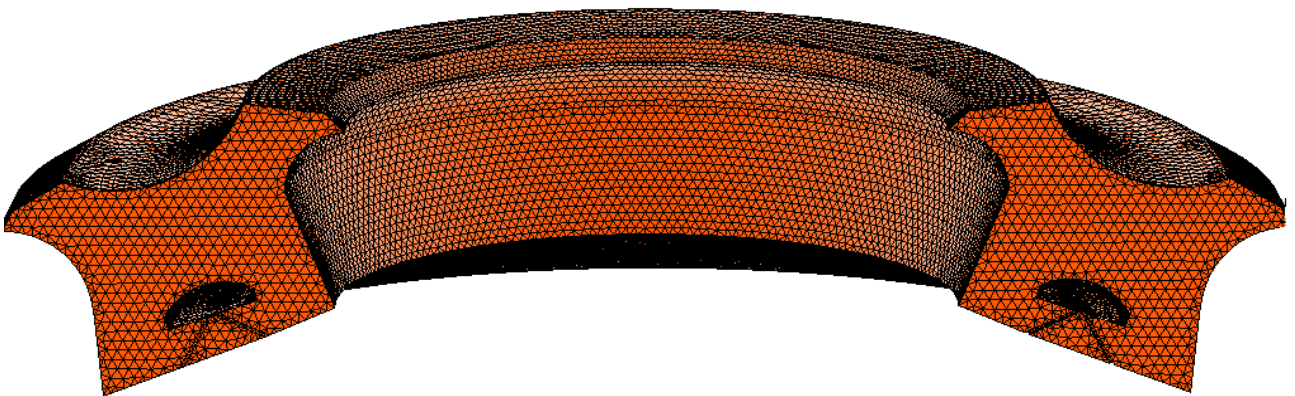


Рис. 2.3 Тетраэдральная расчетная сетка

Геометрическая модель дивертора была воспроизведена в соответствии с иллюстрациями (рисунки 1.1, 1.2) и описанием (далее по тексту), представленными на официальном сайте Организации ITER [1]. Дивертор является одним из ключевых компонентов токамака ITER. Он расположен вдоль нижней части вакуумной камеры и служит для приема потоков примесей и излучений из плазмы. В диверторе можно выделить два принципиальных блока: несущая конструкция, изготавливаемая из нержавеющей стали и компоненты, непосредственно контактирующие с плазмой. В машине ITER дивертор – это 54 дистанционно заменяемые кассеты, каждая из которых

содержит три основных компоненты, контактирующие с плазмой: диверторные пластины (внутренняя и внешняя) и купол (см. рисунок 1.2). Диверторные пластины расположены на пересечении силовых линий магнитного поля. Здесь потоки высокоэнергетичной плазмы врезаются в пластины. Их кинетическая энергия преобразуется в тепло, и тепловой поток, приходящийся на пластины, чрезвычайно интенсивен. В диверторных камерах удаётся смягчить нагрузку от плазмы на диверторные пластины за счёт дополнительного охлаждения.

Методика магнитогиродинамического расчета, учитывающая ограничения на параметры дискретизации сплошной среды

Разработка разностных схем и численных методик, перспективных для проведения расчетов на супер-ЭВМ петафлопного, а в будущем – эксафлопного уровня производительности, во многом зависит от успешного решения проблемы верификации данных высокопроизводительных вычислений. Эта проблема является наиболее острой и напрямую связана с корректностью вычислительных алгоритмов и положенных в их основу математических моделей. Предпосылки работы обусловлены новыми возможностями для математического моделирования, в том числе и для тех случаев, когда требуется подробное пространственно-временное описание физических процессов. Эти возможности открывают многопроцессорные вычислительные системы сверхвысокой производительности (1 Пфлоп/сек и выше). Мультимасштабное моделирование необходимо, например, для детального анализа различного рода физических неустойчивостей, которые во многих случаях имеют относительно небольшие масштабы, но развиваются на фоне иных, крупномасштабных процессов. Однако на пути реализации возможностей вычислительных систем применительно к рассматриваемым задачам имеется ряд серьезных трудностей.

Причина подобной ситуации вытекает из того, что высокопроизводительные системы, применяемые для моделирования различных физических неустойчивостей, дают возможность использовать пространственные сетки с числом узлов, достигающим десятка миллиардов. На таких сетках влияние «схемной» вязкости, стабилизирующей численное решение, а заодно и сглаживающей естественные неустойчивости, становится малым. При этом остаётся открытым вопрос, каков характер неустойчивостей, наблюдаемых в численном решении – естественный или искусственный, т.е. имеющий «счетное» происхождение. В этом плане важен также и вопрос не только об устойчивости вычислительного алгоритма, но и о корректности используемой в качестве основы моделирования математической модели. Поэтому совершенно не случаен всплеск интереса к исследованию, например, корректности базовых для многих научных и технических приложений уравнений Навье-Стокса.

Более 40 лет тому назад О. А. Ладыженской было проведено доказательство существования решения модифицированных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости. Эта модификация достигалась путем введения в правую часть уравнений дополнительных регуляризирующих членов, кубичных по скорости и имеющих физический смысл вязкости. В этом случае удастся доказать существование решения для любого момента времени. Заметим, что дополнительные члены появились в результате осреднения уравнений Навье-Стокса по конечному объему. Однако обоснования физического смысла подобной процедуры осреднения дано не было. В работе [3] на примере ряда задач механики сплошной среды показано, что построение таких сглаживающих членов вполне может быть произведено на основе простых физических соображений. Появление этих членов связано с существованием минимальных пространственных размеров, при искусственном уменьшении которых дальнейшая детализация решения уже не имеет смысла.

На основе принципа кинетического согласования получены новые типы стабилизирующих поправок для разностных схем гидро-газодинамики, позволяющих организовать эффективное решение соответствующих задач на высокопроизводительных вычислительных системах [7]. Выполнен теоретический анализ постановок ряда классических задач механики сплошной среды, в котором учтено существование физических ограничений на детализацию описания структуры среды. По сравнению с традиционными подходами к аппроксимации "непосредственно уравнений механики" вновь предложенный подход требует включить дополнительные члены (регуляризаторы) в уравнения балансов массы, импульса и энергии. Показано, что данный метод позволяет построить эффективные алгоритмы решения задач механики сплошной среды на высокопроизводительных компьютерах. Перечислим их некоторые существенные преимущества предложенного в [7] подхода сравнительно с традиционными численными методиками:

- возможность расчета уравнений параболического типа по явным схемам с условием устойчивости, аналогичным условию Куранта ($\tau \sim h$);
- работоспособность при аппроксимации уравнений на неструктурированных сетках различных типов;
- корректное сглаживание на масштабе длины свободного пробега, что существенно важно для моделирования различных гидродинамически неустойчивых течений.

Разработанный метод использован для построения новой разностной схемы магнитной гидродинамики, которая в численных экспериментах показала высокую точность воспроизведения течений с ударными волнами высокой интенсивности, а также совокупности МГД-процессов, характеризующихся весьма большой разномасштабностью [8].

Модель турбулентности

В энергетических термоядерных устройствах турбулентность является важнейшим механизмом проникновения частиц через удерживающее магнитное поле. Хорошо известно, что защита от тепловых нагрузок на пластины дивертора в проектируемых токамаках "реакторного" масштаба, как например, ITER, представляет собой серьезную научно-инженерную проблему. Наряду с разработкой собственно конструкции стенок, способных противостоять сверхвысоким тепловым нагрузкам, рассматриваются различные возможности управления энергопотоками, поступающими в пристеночный слой из основного объема плазмы. Теплоотвод из пристеночного слоя возможен за счет излучения частиц примесей к основной компоненте плазмы (Пост, 1995, и др.). Другой механизм теплоотвода связан с рекомбинацией плазмы в области дивертора (Крашенинников, Пигаров, 1987, и др.). В результате рекомбинации между пластинами дивертора и пристеночной плазмой формируется "бланкет" нейтрального (или слабоионизованного) газа. Наличие такого эффекта имеет теоретические и экспериментальные подтверждения и дает основания рассчитывать на снижение тепловых нагрузок на пластины. Данный механизм ограничения тепловых потоков обсуждался в [9], он обусловлен взаимодействием плазмы с относительно низкотемпературным газом blankets.

Вследствие рекомбинации плазмы, и, соответственно, нагрева пристеночного газа в области дивертора формируются интенсивные потоки плазмы к стенке и встречные потоки слабоионизованного газа. Высокотемпературная плазма Токамака движется преимущественно вдоль магнитных силовых линий, в тороидальном направлении. Газовый пристеночный слой слабо или практически вовсе не взаимодействует с магнитным полем, однако плазменное течение за счет вязкости обменивается импульсом с газовым слоем и также разгоняет его в тороидальном направлении. Иницируемая таким образом скорость газа оказывается достаточно высокой. Число Маха в потоке может превышать единицу, при этом число Рейнольдса достигает тысячи и более (Knoll et al., 1996, Kapat et. al. 1994, и др.). См. также [10]. Поток с такими свойствами завихряется, входя в проточную часть дивертора, имеющую достаточно сложную геометрию. Все эти факторы вызывают турбулизацию потока пристеночного газа. Как следствие, в этом слабоионизованном пристеночном слое усиливаются процессы переноса, и тепловые потоки перераспределяются, перенося часть тепловой нагрузки с пластин дивертора на тороидальные стенки. Этот механизм снижения тепловых нагрузок в диверторе исследовался численно в [9] в упрощенной геометрии. Было показано, что турбулентное перемешивание может примерно на порядок увеличить тепловые потоки на тороидальные стенки, соответственно снижая потоки на пластины дивертора.

Проведенные исследования показывают необходимость учета влияния турбулентности в комплексной модели газоплазменного потока в диверторе. По

сравнению с работой [9] в нашем случае имеется возможность моделирования турбулентного тепло-массопереноса в расчетной области более реалистической формы, геометрическая модель которой может быть построена так, чтобы более полно учесть геометрические свойства проточной части дивертора. Учитывая относительно слабое влияние магнитного поля в этой области течения, на первом этапе моделирования можно ограничиться расчетами на основе какой-либо полуэмпирической модели турбулентности газового потока, не учитывая эффекты замагниченности. Отметим также, что турбулизация газа и плазмы приводит к аномальному росту сопротивления среды (это может быть учтено соответствующей коррекцией коэффициента проводимости – А. С. Чуватин, 2013, частное сообщение, см. также [11]), что дополнительно ослабляет воздействие поля на газоплазменный пристеночный поток. В работе [9] расчеты были выполнены на основе двухпараметрической $k-\varepsilon$ модели. Наша компьютерная модель включает систему уравнений в модели Спаларта-Альмареса, которая более подходит к ситуации, когда надо моделировать поток в области с сильно меняющимися геометрическими характеристиками. Основной целью расчетов является выяснение влияния геометрии проточной части дивертора на распределения плотности, температуры и тепловых потоков. В дальнейшем предполагается выполнение расчетов на основе моделей, расширенных с целью уточнения описания турбулентных процессов в течении плазмы, которая примыкает к пристеночному газовому слою, и за счет более высокой температуры и проводимости активно взаимодействует с магнитным полем. Это можно сделать, например, на основе магнитогидродинамических моделей турбулентности типа LES [14-17].

В качестве первого шага к полномасштабному моделированию турбулентных течений в плазме дивертора нами была использована полуэмпирическая гибридная модель турбулентности. Турбулентный перенос учитывается при решении осредненного по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса (модели турбулентности RANS – Reynolds Averaged Navier-Stokes), включающего эффективный параметр – турбулентную вязкость. Замагниченность при этом не учитывается. Такой подход допустим, по крайней мере, для качественной оценки, поскольку в диверторе плазма значительно холоднее и менее подвержена воздействию магнитного поля, чем в центральной части токамака. Алгоритм расчета гидродинамики с учетом турбулентных течений реализован в программном комплексе MARPLE для расчета плазменных течений в диверторе токамака. Солвер турбулентности включает два взаимодополняющих метода вычисления турбулентной вязкости, используемой при решении модифицированного уравнения Навье-Стокса.

Первый метод основан на модели турбулентности Спаларта-Альмареса [12, 13] – однопараметрической RANS-модели, дающей результаты, схожие с получаемыми с помощью более сложной двухпараметрической модели $k-\varepsilon$. Одним из важных свойств модели Спаларта-Альмареса является высокая надежность в части сходимости решения, в связи с чем она и была выбрана для реализации в программном комплексе. Данная модель является

низкорейнольдсовой, поэтому ламинарный подслой моделируется непосредственно на расчетной сетке с соответствующим разрешением.

В модели Спаларта-Альмареса решается уравнение переноса и диффузии для рабочей переменной $\tilde{\nu}$, являющейся аналогом кинематической турбулентной вязкости

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \tilde{\nu}}{\partial t} + w_j \frac{\partial \rho \tilde{\nu}}{\partial x_j}}_{\text{перенос}} = \underbrace{c_{b1} \tilde{S} \rho \tilde{\nu}}_{\text{производство}} + \underbrace{\frac{1}{\sigma} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \rho \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right) + c_{b2} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \frac{\partial \rho \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right]}_{\text{диффузия}} - \underbrace{\rho c_{w1} f_w \left(\frac{\tilde{\nu}}{d} \right)^2}_{\text{диссипация}} \quad (1)$$

Дополнительная турбулентная вязкость определяется по формуле $\mu_t = \rho \tilde{\nu} f_{v1}$. Для корректного поведения рабочей переменной в логарифмическом вязком подслое вводится демпфирующая функция f_{v1} .

Слагаемые источникового типа в уравнении (1) учитывают производство и диссипацию турбулентного потока в областях с завихренностью векторного поля и вблизи стенок. Следует обратить внимание на то, что источниковые члены в уравнении для турбулентной вязкости зависят от расстояния до ближайшей стенки d , а также от градиента турбулентной вязкости.

Для реализации второго метода вычисления турбулентной вязкости рассматривался другой класс моделей турбулентности – модели крупных вихрей LES (Large Eddy Simulation). За основу взята модель Смагоринского (Smagorinsky model) [18] – одна из первых моделей, предложенных для расчета подсеточной вихревой вязкости. В модели Спаларта-Альмареса используется расстояние от центра контрольного объема до ближайшей стенки d , играющее важную роль в определении уровня производства и диссипации турбулентной вязкости. В модели Смагоринского расстояние до стенки d заменяется новым масштабом $\tilde{d}$, который находится из соотношения $\tilde{d} = \min\{d, C_{des} \Delta\}$, где $C_{des} = 0.65$, Δ – ширина фильтра. Для структурированной сетки ширина фильтра выбирается как максимальное значение из шагов сетки в различных координатных направлениях $\Delta = \max\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\}$. В случае неструктурированной сетки в качестве Δ выбирается максимальная длина грани среди всех граней, связанных с узлом сетки. Вихревая вязкость считается пропорциональной ширине фильтра $\nu_t = (C_s \Delta)^2 (2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij})^{1/2}$, где $C_s = 1.3 \div 1.8$ – постоянная Смагоринского, $\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{w}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{w}_j}{\partial x_i} \right)$.

Для устранения недостатков модели Смагоринского (локальность, необходимость подбора модельного параметра, диссипативность, некорректность предсказания вихревой вязкости в ламинарной области и около стенки) в каждом узле сетки вихревая вязкость рассчитывается дважды [19], используя LES (модель Смагоринского) и RANS (модель Спаларта-Альмареса) подходы. В качестве вихревой вязкости выбирается минимальное значение из двух величин $\nu_t = \min\{\nu_{RANS}, \nu_{LES}\}$. В ламинарной области модель Смагоринского дает некорректное значение вихревой вязкости, и вихревая вязкость

рассчитывается при помощи модели Спаларта-Альмареса. Вдали от стенки величина Δ становится пропорциональной размеру наименьших вихрей, разрешаемых на данной сетке, а вихревая вязкость рассчитывается при помощи модели Смагоринского. По мере приближения к стенке размер вихрей уменьшается, а величина вихревой вязкости определяется моделью Спаларта-Альмареса.

Так как в недиссипативном гидродинамическом солвере учитываются все физические процессы из уравнения Навье-Стокса, кроме последнего слагаемого, учитывающего вязкость, то во вспомогательном солвере вязкости учитывается только влияние вязкости на скорость потока:

$$\frac{\partial w_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial w_k}{\partial x_i} + \frac{\partial w_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} \delta_{i,k} \frac{\partial w_l}{\partial x_l} \right) \right] \quad (2)$$

Для замыкания задачи вводятся граничные условия. В постановке используются три типа граничных условий:

- условие на стенке;
- условие на бесконечности;
- условие симметрии.

Для реализации модели Спаларта-Альмареса применялась полуневная схема. Источниковые члены, отвечающие за производство и диссипацию, рассчитывались со старого временного слоя. Оператор Лапласа, отвечающий за диффузию турбулентного параметра, рассчитывался с нового временного слоя по неявной схеме. Турбулентная вязкость в модели Смагоринского вычислялась по скорости, взятой с текущего временного слоя гидродинамического солвера, но без учета вязкости. Для решения модифицированного уравнения Навье-Стокса с дополнительной турбулентной вязкостью использовалась консервативная неявная схема. Величина турбулентной вязкости в комбинированной модели находится как минимальное из значений, полученных в моделях Смагоринского и Спаларта-Альмареса: $\mu_t = \min\{\mu_{SA}; \mu_{LES}\}$. Пространственная дискретизация вязких членов выполнялась методом Галеркина с разрывными базисными функциями.

Описанная модель использовалась для расчета турбулентных плазменных потоков в диверторе проектируемого токамака ITER (рисунки 1, 2). Решалась полная РМГД-система с учетом диссипативных процессов и турбулентной вязкости с использованием табличных уравнений состояния, коэффициентов излучения и поглощения [5]. Вычисления проводились на суперкомпьютере Helios (IFERC, Rokkasho, Japan) [20].

Результаты моделирования представлены на рисунке 3: фрагмент расчетной области (вверху), поперечное сечение тетраэдральной сетки со сгущением в районе купола дивертора (внизу слева) и полностью установившиеся турбулентные течения и поле температур (внизу справа). Масштабируемость кода MARPLE была изучена на примере данной задачи.

Данная постановка задачи включает все элементы полномасштабного моделирования дивертора: создание CAD-модели, повторяющей фактическую

геометрию, использование неструктурированных сеток, исчерпывающую физическую модель и реалистичные уравнения состояния.

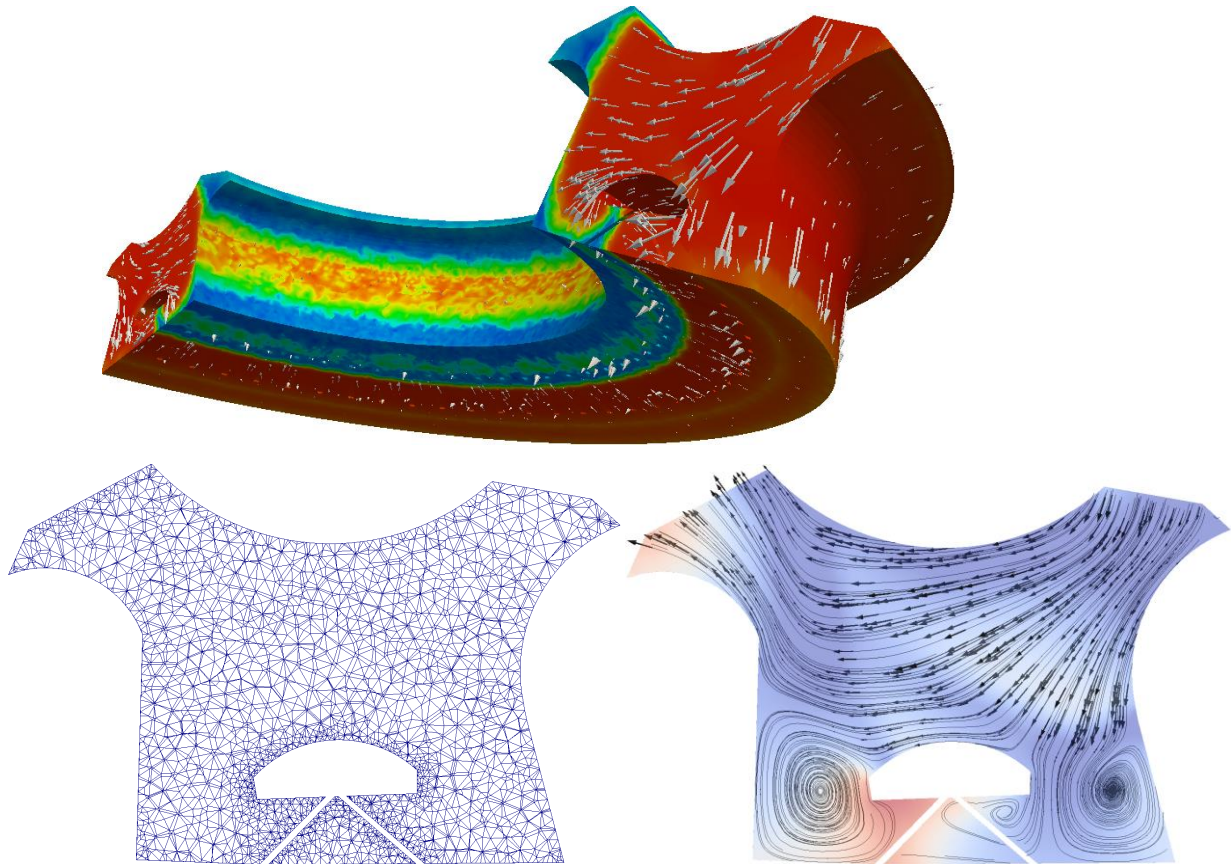


Рис. 3 Результаты моделирования газоплазменного течения в диверторе токамака ITER: фрагмент расчетной области (вверху), поперечное сечение тетраэдральной сетки (внизу слева), линии тока и поле температур (внизу справа)

Модель излучения в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия

Расчет течений в диверторе токамака не будет верным без учета излучения, т.к. одна из основных функций дивертора – именно прием потоков излучений из плазмы центральной части реактора. Точное описание переноса излучения очень важно для верного расчета энергообмена в плазме дивертора, а современные высокопроизводительные системы позволят воссоздать трехмерное поле излучения с желаемой точностью.

Распространение пучка фотонов в среде в направлении Ω описывается уравнением переноса:

$$\partial I_v / \partial s = \Omega \operatorname{grad} I_v = \kappa_v (J_v - I_v) \quad (3)$$

Здесь I_v – спектральная интенсивность излучения, т. е. количество лучистой энергии, протекающей в единицу времени через поверхность единичной площади, расположенную перпендикулярно направлению Ω , в спектральном

интервале $[v, v+dv]$ и телесном угле $d\Omega$. $\partial/\partial s$ обозначена пространственная производная вдоль направления пучка (вектора Ω).

Уменьшение энергии в пучке характеризуется коэффициентом поглощения κ , подправленным на вынужденное испускание. В общем случае этот коэффициент имеет форму $\chi = \kappa + \sigma$ и включает поглощение лучистой энергии веществом κ и рассеяние лучистой энергии из пучка σ . В принятой модели рассеяние не учитывается. Производство лучистой энергии веществом описывается излучательной способностью J . Оптические свойства вещества сильно зависят от его температуры $T(\mathbf{r})$ и плотности $\rho(\mathbf{r})$, а также от частоты фотонов v .

В приближении локального термодинамического равновесия (ЛТР) согласно закону Кирхгофа отношение коэффициента излучения к коэффициенту поглощения есть функция температуры и частоты (функция Планка). Коэффициент излучения в этом случае может быть представлен в виде $\kappa_\nu J_{\nu p}$, где $J_{\nu p}$ – интенсивность равновесного излучения. Закон Кирхгофа применим и для неравновесных систем, когда излучение не находится в равновесии с веществом и распределение по частотам существенно отличается от планковского. При этом часто предположение о локальном термодинамическом равновесии между частицами излучающего вещества оказывается хорошим приближением. Учет неравновесности плазмы и излучения осуществляется коррекцией свойств вещества с помощью табличных функций. Физический код TERMOS [5] генерирует набор из двух таблиц для изучаемого вещества – для равновесного и неравновесного состояния. Широкодиапазонные уравнения состояния, транспортные и кинетические коэффициенты и оптические свойства вещества интерполируются по этим двум таблицам с учетом коэффициента равновесия ξ : $f = \xi \cdot f_E + (1 - \xi) \cdot f_N$. Здесь f – искомая функция состояния, f_E находится в таблице для равновесного состояния, f_N – для неравновесного, и $0 \leq \xi \leq 1$. Коэффициент равновесия ξ вычисляется в каждой ячейке расчетной сетки как $\xi = \frac{Q_R}{Q_E}$, где Q_R – вычисленная локальная плотность лучистой энергии, а Q_E – равновесная плотность лучистой энергии, взятая из соответствующей таблицы.

Самосопряженное уравнение переноса лучистой энергии

Зависимость интенсивности излучения от углового направления может быть эффективно учтена при использовании самосопряженной формы уравнения переноса. Данный подход для решения уравнения переноса нейтронов был разработан и всесторонне исследован В. С. Владимировым в работе [21], где был обоснован новый вариационный принцип для односкоростного уравнения переноса и выведены соответствующие граничные условия. Б. Н. Четверушкиным [22] было предложено использовать самосопряженное уравнение для нахождения поля излучения. Им было показано, что в этом случае, верно воспроизводя угловое распределение

интенсивности излучения, можно избежать появления т.н. «эффекта луча», т.е. потери информации от источника излучения малого размера. Аналогичные приемы расчета переноса нейтронов и поля излучения несколько позже рассматривались американскими авторами [23] и [24]. Данный подход реализован в коде SEPTRE Сандийской национальной лаборатории (США) [25], предназначенном для расчета наведенного электромагнитного импульса в устройствах и кабельных линиях.

Самосопряженное уравнение (4) может быть получено заменой переменной в уравнении (3) $I(\vec{r}, \Omega) = \varphi(\vec{r}, \Omega) - \ell(\vec{r})(\Omega \nabla) \varphi(\vec{r}, \Omega)$, где $\ell = l/\kappa$ – длина свободного пробега фотона (обратная величина к коэффициенту поглощения). Вспомогательная функция φ симметрична $\varphi(x, -\Omega) = \varphi(x, \Omega)$ и удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\text{div}(\ell(\vec{r}) \mathbf{D}(\Omega) \text{grad} \varphi(\vec{r}, \Omega)) + \frac{1}{\ell(\vec{r})} \varphi(\vec{r}, \Omega) = \frac{1}{\ell(\vec{r})} J(\vec{r}), \quad (4)$$

$$\mathbf{D}(\Omega) = \Omega \otimes \Omega \quad (D_{ij} = \Omega_i \Omega_j).$$

Граничные условия для вспомогательной функции φ имеют вид: $n\ell(\vec{r}) \mathbf{D}(\Omega) \text{grad} \varphi(\vec{r}, \Omega) - (\Omega \mathbf{n}) \varphi(\vec{r}, \Omega) = 0$, когда $(\Omega \mathbf{n}) < 0$ ($\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к границе).

Для дискретизации в пространстве угловых переменных используется метод дискретных ординат. Сетка дискретных ординат $\{\omega_k\}_{k=1}^N$ представляет собой набор угловых направлений в квадратурной формуле на сфере с весовыми множителями α_k . В частности, могут быть использованы квадратуры на сфере В. И. Лебедева [26-27] или S_n метод. В простейшем случае внутри каждого телесного угла, полученного в результате такого разбиения, мы полагаем φ не зависящей от угловой переменной. Таким образом мы получаем N самосопряженных уравнений для N переменных φ_k со своим тензором $\mathbf{D}(\omega_k)$ для каждой квадратурной точки ω_k .

Интегрированием по этим точкам может быть получена удельная энергия излучения $U(\vec{r}) = \sum_{k=1}^N \alpha_k \varphi_k(\vec{r}) \approx \int_{4\pi} I(\vec{r}, \Omega) d\Omega$ и поток излучения

$$\vec{W} = \sum_{k=1}^N w_k \omega_k \frac{I(\vec{r}, \omega_k) - I(\vec{r}, -\omega_k)}{2} = -\ell(\vec{r}) \sum_{k=1}^N \alpha_k \mathbf{D}(\omega_k) \text{grad} \varphi_k(\vec{r}) \approx \int_{4\pi} \Omega I(x, \Omega) d\Omega.$$

Затем источник в уравнении баланса энергии можно находить из уравнения (4), не прибегая к численному дифференцированию:

$$Q_{\text{Rad}} = -\text{div} \vec{W} = \frac{1}{\ell(\vec{r})} (J(\vec{r}) - U(\vec{r})).$$

Кроме того, данная модель позволяет при

необходимости вычислять интенсивность излучения в выбранном направлении:

$$I(\vec{r}, \omega_k) = \varphi_k(\vec{r}) - \ell(\vec{r}) \omega_k \text{grad} \varphi_k(\vec{r}).$$

Для численной реализации рассмотренной модели необходимо решать $(M \times N)$ независимых уравнений эллиптического типа (M – количество спектральных групп, N – количество квадратурных точек на сфере), что открывает хорошие возможности для организации параллельных вычислений различного типа, в том числе гибридных с применением графических ускорителей. Следует иметь в виду, что для обеспечения адекватной точности вычислений значение как M , так и N может составить несколько десятков или даже сотен. В результате пространственной дискретизации уравнения (4) методом Галеркина с разрывными базисными функциями получается система линейных уравнений с симметричной положительноопределенной матрицей, что позволяет использовать для ее решения эффективные методы на базе подпространств Крылова или итерации Чебышева.

Этот численный метод был реализован на гибридном вычислительном кластере К-100 [28] (ИПМ им. М.В.Келдыша РАН). Кластер К-100 (рисунок 4) занимает 20 место в списке Top50 Российских суперкомпьютеров (<http://top50.supercomputers.ru/?page=rating>), имея 128 CPU/3456 ядер и пиковую производительность порядка 107 Тфлопс/сек, и является прототипом будущего петафлопного кластера. При реализации использовался гибридный параллелизм системы К-100. Определенное ускорение было достигнуто благодаря решению систем линейных уравнений на GPU с применением CUDA.

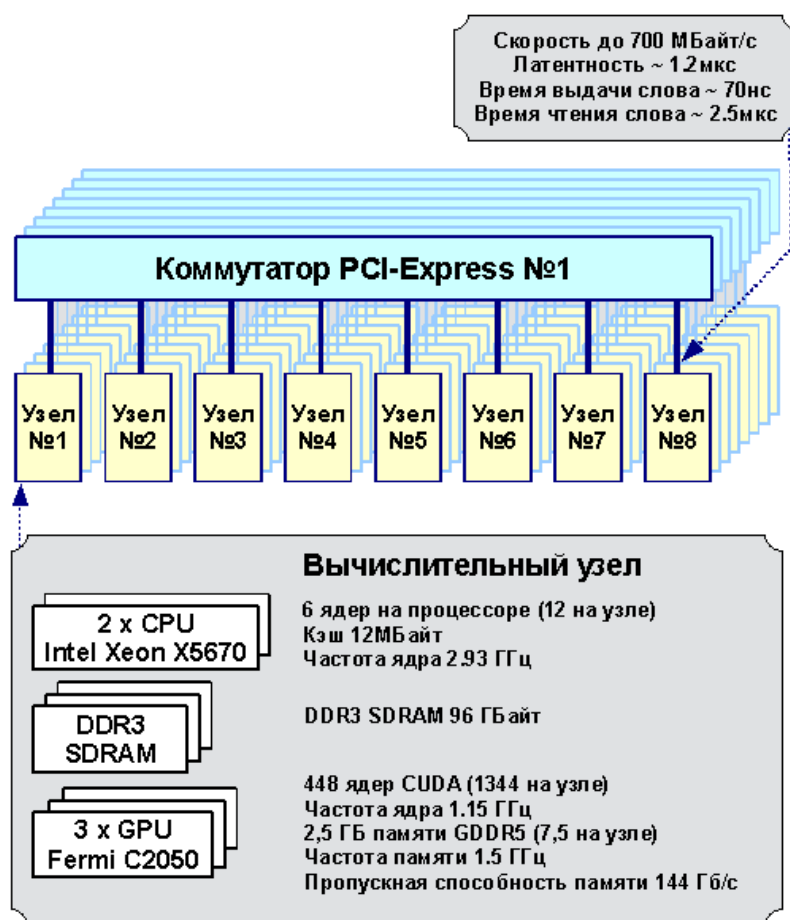


Рис. 4. Структурная схема кластера К-100

Исследования эффективности и масштабируемости кода

Реализация модели мультифизики требует вычисления десятков физических величин в каждой ячейке расчетной сетки на каждом шаге по времени. Для моделирования существенно трехмерных явлений с учетом реальной геометрии устройств нужны сетки, содержащие от нескольких миллионов до нескольких сотен миллионов ячеек. Решение подобных задач возможно только с использованием распределенных вычислений, проводимых на современных высокопроизводительных компьютерах. Код MARPLE является MPI-приложением и может быть запущен на компьютерах с общей или распределенной памятью. Для разбиения расчетной области в коде MARPLE используется библиотека METIS (ParMETIS). Библиотека METIS позволяет получить хорошо сбалансированное разбиение в том смысле, что все подобласти будут содержать примерно одинаковое количество расчетных ячеек и граничных элементов. Однако, при решении реальных задач, в которых может быть существенная пространственная неоднородность по моделируемым физическим явлениям, баланс нагрузки между вычислительными ядрами может быть нарушен, и эффективность приложения будет низкой. Теоретическая оценка производительности сложных программных комплексов, численные модели которых включают большое количество различных физических явлений, а используемые сетки имеют нерегулярную структуру, затруднена. Исследование масштабируемости подобных приложений возможно только в процессе решения реальных задач на суперкомпьютерах.

Для исследования масштабируемости применялось два подхода. Так называемое «слабое» масштабирование показывает, как меняется время решения задачи с увеличением количества вычислительных ядер при неизменном объеме задачи для каждого ядра. «Сильное» масштабирование показывает, как меняется время решения задачи с увеличением количества вычислительных ядер при неизменном общем объеме задачи (при фиксированном размере расчетной сетки).

Сильное масштабирование исследовалось на суперкомпьютерах Ломоносов [29] (№37 в списке Top500 на ноябрь 2013, общее количество ядер 78660, пиковая производительность 1,7 Пфлоп/сек) и MBC-100K [28] (№487 в списке Top500 на ноябрь 2013, общее количество ядер 13004, пиковая производительность 228 Гфлоп/сек). Были измерены ускорение, эффективность и стоимость вычислений с целью оценки перспектив применимости созданных численных методик и программных средств на перспективных экзафлопных системах.

Производительность кода MARPLE была изучена на двух задачах: тестовой задаче нелинейной теплопроводности (до 128 ядер, сетка до 1М ячеек) и задаче моделирования РМГД-течения в плазме (до 1024 ядер, сетка 4М ячеек). Практически линейное ускорение было получено на обеих задачах, что является многообещающим результатом.

Исследование коэффициентов ускорения, эффективности и стоимости вычислений позволяет проанализировать масштабируемость реализованных в коде параллельных алгоритмов и определить ряд их особенностей:

- Можно выделить один ресурсоемкий, но хорошо масштабируемый этап подготовки данных ("первый шаг"), типичный для большинства алгоритмов на нерегулярных сетках. Существование подобного этапа в начале вычислений делает непрактичным решение сложных задач на больших сетках с использованием малого числа вычислительных ядер.

- Солверы различных физических явлений масштабируются по-разному, что необходимо учитывать для создания хорошо масштабируемых алгоритмов.

- Определен показатель практически приемлемой производительности – оптимальный размер сетки в подобласти, обрабатываемой одним MPI-процессом (вычислительным ядром). Значение этого показателя лежит в пределах от 10 до 50 тысяч ячеек на ядро.

На рисунке 5 приведены результаты измерения ускорения для задачи плазмодинамики. Слева – ускорение при расчете шага по времени, справа – ускорение при начальной подготовке данных.

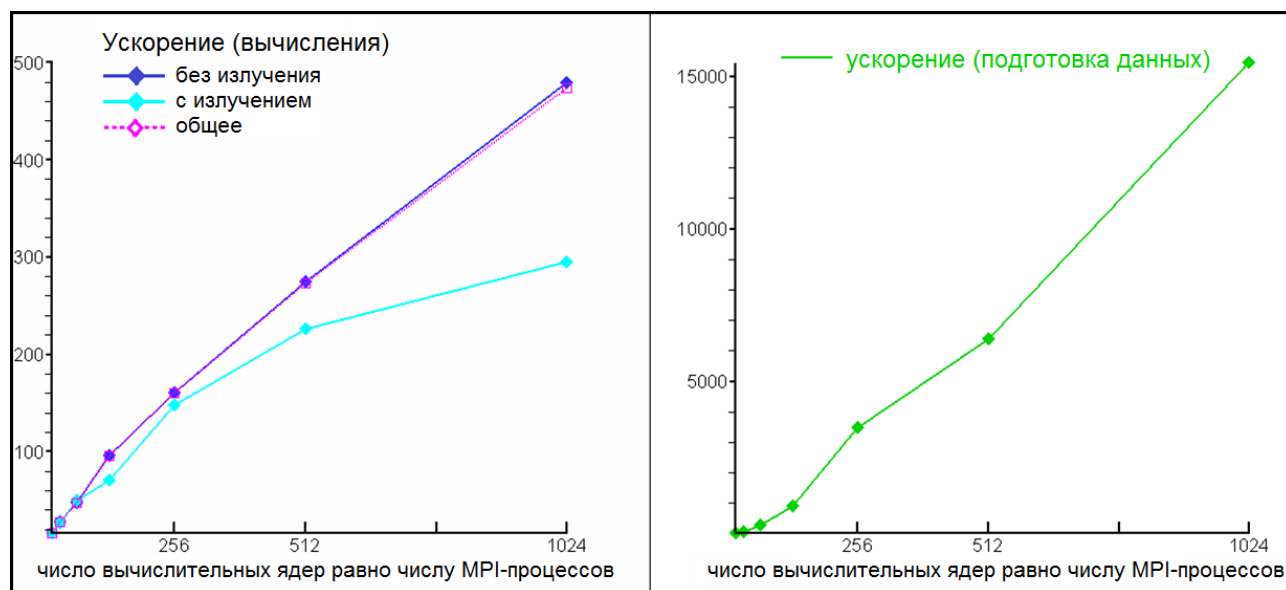


Рис. 5. Результаты оценки сильного масштабирования для задачи моделирования РМГД-течения плазмы на суперкомпьютере Ломоносов.

Для первичной подготовки данных имеет место сверхлинейное (почти квадратичное) ускорение, что соответствует квадратичной зависимости времени обработки сеточных данных от размера сетки на вычислительном узле. Ускорение для временных шагов существенно зависит от того, выполняется ли расчет переноса излучения: без переноса излучения (синий график слева на рисунке 5) ускорение на всем исследованном диапазоне остается линейным и приблизительно в 2 раза меньше максимально возможного; ускорение расчета переноса излучения (голубой график слева на рисунке 5) еще меньше и его рост заметно замедляется с увеличением числа MPI процессов. В рассматриваемой

задаче оказалось возможным использовать схему дробных шагов, которая позволила существенно увеличить скорость и масштабируемость расчета в целом. Ускорение данного алгоритма показано слева на рисунке 5 сиреневой пунктирной линией, практически совпадающей с синим графиком "без излучения".

Полученные результаты верны как для тестовой задачи (нелинейная теплопроводность), так и для типичной задачи плазменной физики, что свидетельствует об их применимости и для других задач, решаемых с помощью кода MARPLE. Выявленные особенности позволяют проводить априорный анализ эффективности решения задач на высокопроизводительных многоядерных системах. Используемая методика измерения и анализа производительности и масштабируемости может быть применена и к другим научным кодам, предназначенным для проведения высокопроизводительных вычислений.

Слабая масштабируемость исследовалась на суперкомпьютере Helios [20] (№24 в списке Top500 на ноябрь 2013, общее количество ядер 70560, пиковая производительность 1,5 Пфлоп/сек). Турбулентное течение плазмы в диверторе ITER, описанное в предыдущем разделе, изучалось на неструктурированных сетках, содержащих от $3,6 \cdot 10^6$ до $7,9 \cdot 10^8$ тетраэдральных ячеек, с использованием до 32768 вычислительных ядер. Согласно полученному выше критерию, в расчетах на ядро приходилось 14 и 27 тысяч ячеек. На рисунке 6 показаны времена выполнения первого этапа (подготовки данных) и усредненного шага по времени. Видно, что основной этап вычисления очень хорошо масштабируется.

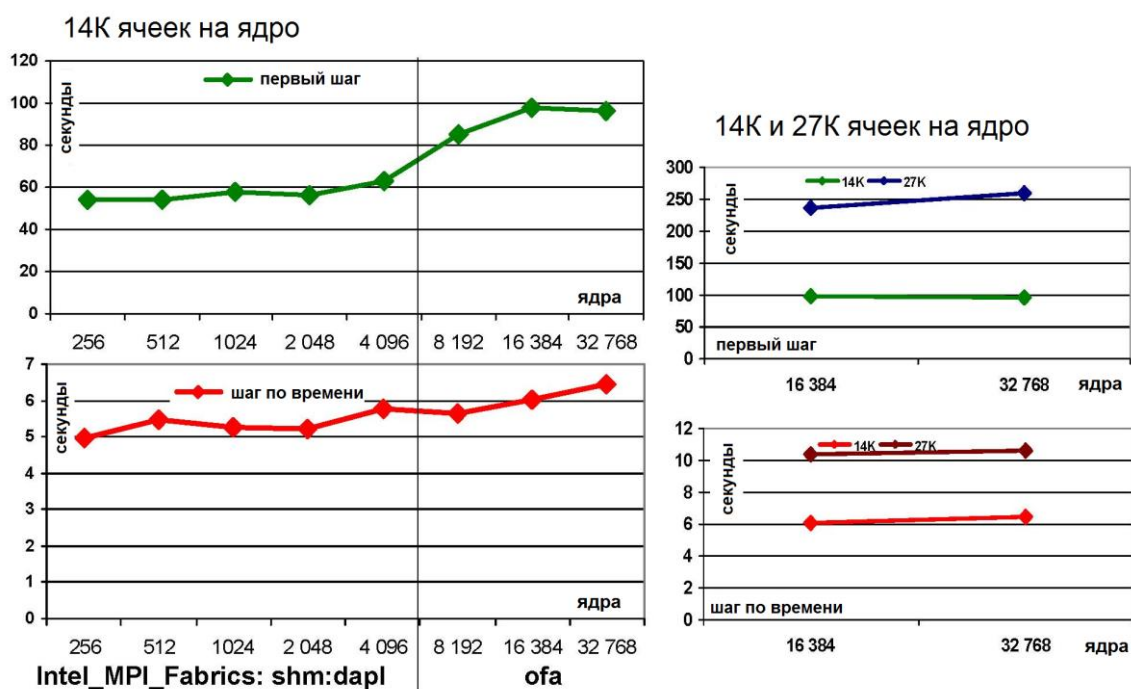


Рис. 6. Результаты оценки слабого масштабирования на суперкомпьютере Helios. 32768 ядер – это почти половина ядер на Helios'e.

Существенным для производительности и масштабируемости кода оказалось значение параметра библиотеки Intel ® MPI Library, отвечающего за межпроцессорные обмены – I_MPI_FABRICS. При I_MPI_FABRICS=shm:dapl (значение по умолчанию для суперкомпьютера Helios) была продемонстрирована прекрасная масштабируемость на всех этапах расчета при увеличении числа вычислительных ядер до 4096. Но при попытке запуска на 6000 и более ядрах возникли ошибки доступа к памяти. В связи с этим при дальнейшем увеличении объема задачи и числа используемых процессоров использовалась MPI-фабрика I_MPI_FABRICS=ofa, позволившая включать в расчет вплоть до 32768 ядер. Использование этого параметра, однако, привело к падению эффективности подготовки данных на большом количестве ядер.

Заключение

Участие ИПМ им. М.В.Келдыша в международном проекте NuFuSE привело к созданию базовых компьютерных моделей и алгоритмов, необходимых для исследования гидродинамики и явлений переноса в диверторе Токамака с помощью высокопроизводительных вычислений. Интеграция разрабатываемой модели тепло-массообмена в диверторе с моделями пристеночной плазмы и моделями, используемыми для плазмы в центральной части токамака, приведет к созданию полномасштабной физической модели плазмы в Токамаке.

С целью проверки основных алгоритмов применительно к плазме дивертора и реализации новых возможностей для полномасштабного высокопроизводительного моделирования, РМГД код MARPLE был расширен полуэмпирической гибридной моделью турбулентности, необходимой для моделирования плазмы в диверторе. Реализовано самосопряженное уравнение переноса излучения второго порядка, что позволило учесть зависимость интенсивности излучения от углового направления. Неравновесность плазмы и излучения учитывается с помощью двухтабличной интерполяции свойств вещества.

Существующий 3D РМГД-код использовался для исследования масштабируемости и тестирования эффективности реализации сложных моделей мультифизики. Была показана хорошая масштабируемость вплоть до 32К вычислительных ядер на неструктурированных сетках, содержащих до 790М тетраэдральных ячеек.

Авторы выражают благодарность за интересные и полезные дискуссии С. И. Крашенинникову (обсуждение общих проблем вычислительной физики плазмы, обсуждение моделей взаимодействия плазмы с пристеночным газом в диверторе) и А. С. Чуватину (обсуждение эффекта аномального сопротивления в турбулизованной плазме). Авторы благодарят И. В. Цыбулина за участие в тестировании методики расчета лучистого переноса энергии на основе самосопряженного уравнения переноса излучения.

Литература

1. ITER – the way to new energy. – URL: <http://www.iter.org/>
2. Nuclear Fusion Simulations at Exascale – NuFuSE. – URL: <http://www.nu-fuse.com/>
3. Четверушкин, Б. Н. Пределы детализации и формулировка моделей уравнений сплошных сред / Б. Н. Четверушкин // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 1. – С. 33–52.
4. Гасилов, В. А. Пакет прикладных программ MARPLE3D для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы / В. А. Гасилов [и др.] // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 1. – С. 55–87.
5. Никифоров, А. Ф. Квантово-статистические модели высоко-температурной плазмы / А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров. — М.: Физматлит. – 2000. – 400 с.
6. Дьяченко С. В., Гасилова И. В., Дорофеева Е. Ю. Разработка конвертера данных из интегрированной CAD-CAE системы Salome в прикладной код для численного решения начально-краевых задач методом сеток // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 36. 25 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-36>
7. B.N.Chetverushkin. Resolution Limits of Continuous Media Models and their Mathematical Formulations. Mathematical Models and Computer Simulations. 2013. V. 5, No 3, pp. 266-279.
8. B. N. Chetverushkin. Resolution limits of continuous media models and their mathematical formulations. EASC2013 [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://www.easc2013.org.uk/sites/default/files/Pdfs/ParallelSession5a/Boris-Exascale%20-Edinburg%202013.pdf>
9. G.Vahala, L.Vahala, J.Morrison, S.Krashenninnikov, and D.Sigmar. K-ε compressible 3D neutral fluid turbulence modeling of the effect of toroidal cavities on flame-front propagation in the gas-blanket regime for tokamak divertors. J. Plasma Physics, 1997, vol.57, part 1, pp. 155-173.
10. Robert E. H. Clark, Detlev Reiter (Eds). Nuclear Fusion Research: Understanding Plasma-Surface Interactions. Springer Series in Chemical Physics, 2005.
11. Theobald, M., Fox, P., and Sofia, S. (1994). A subgrid-scale resistivity for magnetohydrodynamics. Phys. Plasmas, 1(9), 3016 – 3032)
12. Wilcox, D. C. Turbulence Modeling for CFD – 2 rev. ed. / D. C. Wilcox – DCW Industries. – 1998.
13. Spalart, P. R. A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows / P. R. Spalart, S. R. Allmaras // AIAA 92-0439. – 1992.
14. Gomez, T., Sagaut, P., Schilling, O., and Zhou, Y. (2007). Large-eddy simulation of very large kinetic and magnetic reynolds number isotropic

magnetohydrodynamic turbulence using a spectral subgrid model. *Phys. Fluids*, 19(4), 032304.

15. Knaepen, B. and Moin, P. (2004). Large-eddy simulation of conductive flows at low magnetic reynolds number. *Phys. Fluids*, 16(5), 1255–1261.

16. Chernyshov, A. A., Karelsky, K. V., and Petrosyan, A. S. (2006a). Large-eddy simulation of magnetohydrodynamic turbulence in compressible fluid. *Phys. Plasmas*, 13(3), 032304.

17. Chernyshov, A. A., Karelsky, K. V., and Petrosyan, A. S. (2006c). Subgrid-scale modelling in large-eddy simulations of compressible magnetohydrodynamic turbulence. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 21(1), 1–20.

18. Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations // *Monthly Weather Review*. – 1963. – V. 91, No. 3. – P. 99-165.

19. Волков, К. Н. Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений./К. Н. Волков, В. Н. Емельянов. – М.: Физматлит. – 2008.

20. http://www.iferc.org/csc/csc_for_researchers/csc_hpc_information.html

21. Владимиров В. С. Математические задачи односкоростной теории переноса частиц // *Труды Математического института*. – 1961. – Т. 61. – С. 158.

22. Четверушкин, Б. Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. – М.: Наука. – 1985.

23. Lewis, E E Computational methods of neutron transport / E E Lewis; W F Miller // La Grange Park, Ill., USA: American Nuclear Society. – 1993.

24. Balsara, D. // *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* – 2001 – V. 69 – P. 671-707.

25. Liscum-Powell, J. L. Application of the Ceptre Code to Cable SGEMP Problems / J. L. Liscum-Powell et al // *Proceedings of 5LC*. – 2005. <http://www.sandia.gov/ASC/>

26. Лебедев, В. И. Значения узлов и весов квадратурных формул типа Гаусса-Маркова для сферы от 9-го до 17-го порядка точности, инвариантных относительно группы октаэдра с инверсией // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. – 1975 – Т. 15, № 1 – С. 48–54.

27. Лебедев, В. И. О квадратурах на сфере // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. – 1976 – Т. 16, № 2 – С. 293–306.

28. <http://www.kiam.ru/MVS/resources/k100.html>

29. <http://www.parallel.ru/cluster/superinfo>

30. <http://www.jscc.ru/hard/mvs100k.shtml>