

Использование параллельных распределенных вычислений для моделирования процессов получения наноматериалов

Кржижановская В.В., Корхов В.В., Затевахин М.А., Горбачев Ю.Е.

Моделирование физико-химических процессов получения наноматериалов находится на грани современных вычислительных возможностей ввиду необходимости учета огромного количества взаимосвязанных процессов, действующих в широком диапазоне временных и пространственных масштабов. Высокие требования к однородности и качеству получаемых материалов обуславливают необходимость решать трехмерные задачи расчета течения химически реагирующей газовой смеси, плазменного разряда и гетерогенных процессов на поверхности раздела фаз. Для получения результатов на реальных временах такие расчеты должны опираться на технологии высокопроизводительных вычислений. Авторы доклада принимали участие в разработке пакета программ "Виртуальный реактор" для моделирования плазмохимических реакторов, используемых для производства наноматериалов. Этот пакет включает различные модули, которые могут быть эффективно использованы в распределенной системе вычислительных ресурсов Grid. Различные модели реализованы как самостоятельные параллельные MPI программы и комбинируются в зависимости от поставленной задачи. Эти модули обмениваются небольшим объемом информации и запускаются на удаленных слабосвязанных ресурсах. Для эффективного использования динамически меняющихся Grid ресурсов авторами был разработан метод автоматической балансировки нагрузки, а также предложен интегрированный подход Grid планировщика пользовательского уровня с оптимизацией набора вычислительных ресурсов и адаптивной балансировкой распределения нагрузки. В докладе будут представлены результаты по развитию Grid-версии пакета "Виртуальный реактор", а также некоторые результаты численного моделирования процессов, протекающих в плазмохимических реакторах.