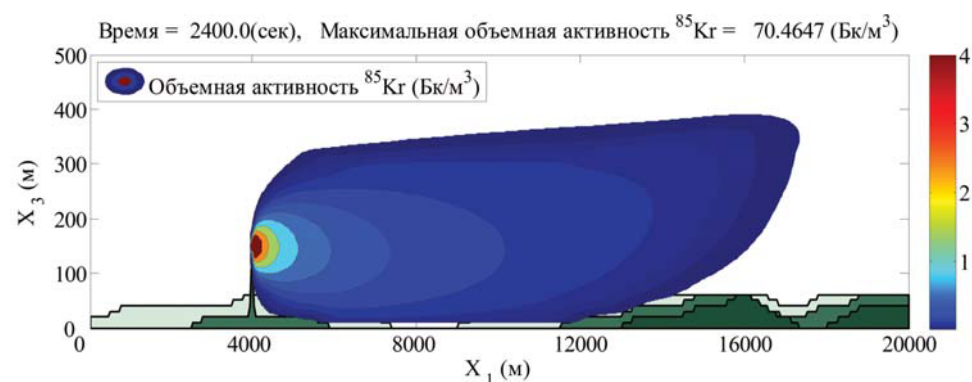
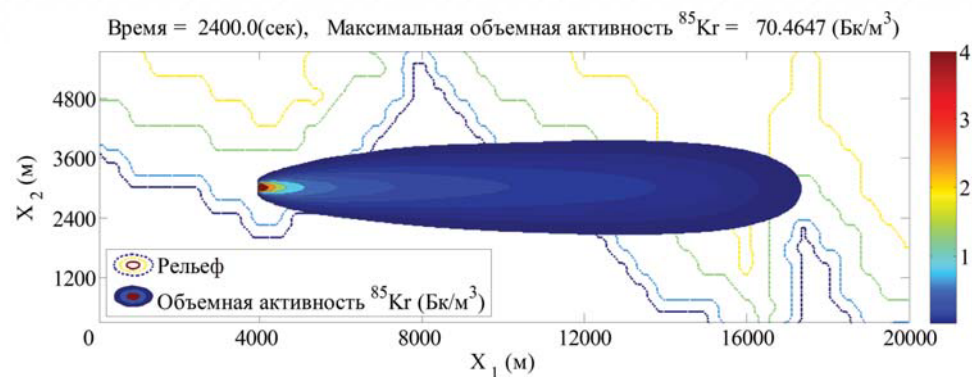
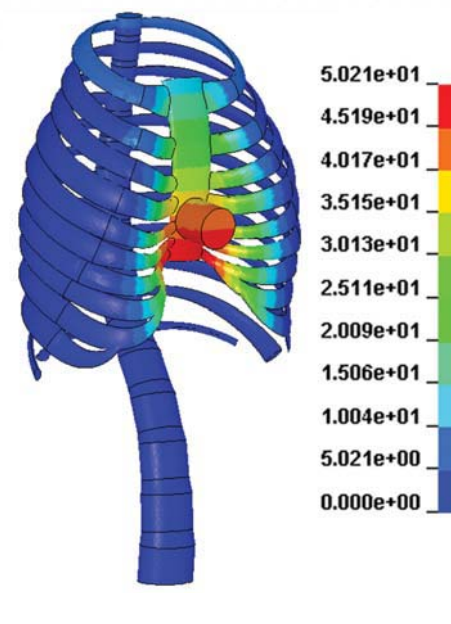


СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

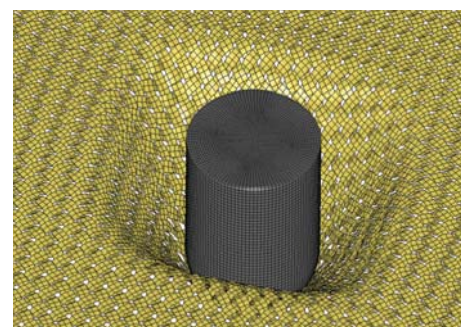


Развитие атомной энергетики определяет актуальность решения экологических проблем загрязнения воздушной среды в районах атомных электростанций. Необходимо уметь прогнозировать последствия различных нештатных ситуаций в работе АЭС с целью обеспечения первоочередными мерами по защите персонала станции и населения, проживающего вблизи атомной станции. Достижение этой цели можно с помощью моделирования процессов радиоактивного загрязнения воздушной среды и реализации созданных сложных математических моделей исследуемых процессов на высокопроизводительных вычислительных системах. Учеными ЮФУ создана математическая модель распространения радиационного загрязнения в районе Волгодонской атомной электростанции, которая программно реализована на суперкомпьютерной вычислительной системе (Крукиер Л.А., Муратова Г.В., Дацюк В.Н., Дацюк О.В., Зубов В.Н., Субботина Т.Н., (ЮФУ)).

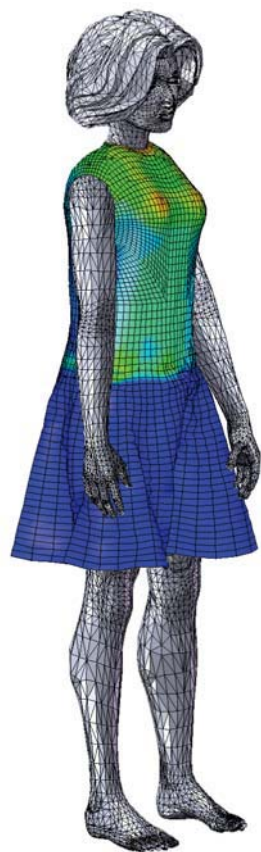
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



Основной задачей при проектировании бронезилетов является минимизация их массы при сохранении заданного уровня защиты. Для этого при производстве современных бронезилетов используются высокопрочные баллистические ткани. Тканевый бронезилет значительно легче и незаметнее в ношении по сравнению с бронезилетом на металлической основе. Экспериментальный путь оптимизации конструкции тканевого бронезилета позволяет достаточно быстро определить оптимальное число тканевых слоев и их структуру, однако этот метод является весьма затратным. Поэтому на базе пакета ANSYS Mechanical был создан РаВИС, моделирующий удар пули в баллистическую ткань и удар индентора в грудную клетку человека. Использование этого РаВИС позволило значительно сократить затраты на натурные эксперименты при разработке новых перспективных бронезилетов на тканевой основе (Долганина Н.Ю., Сапожников С.Б. (ЮУрГУ)).



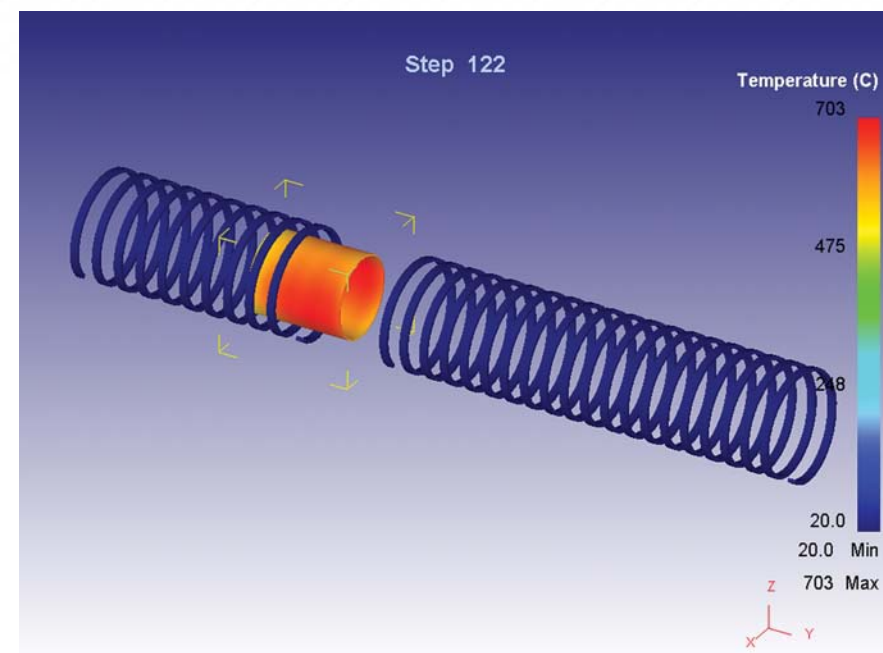
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



3.202e+04
2.882e+04
2.562e+04
2.242e+04
1.921e+04
1.601e+04
1.281e+04
9.607e+03
6.404e+03
3.202e+03
6.923e-02

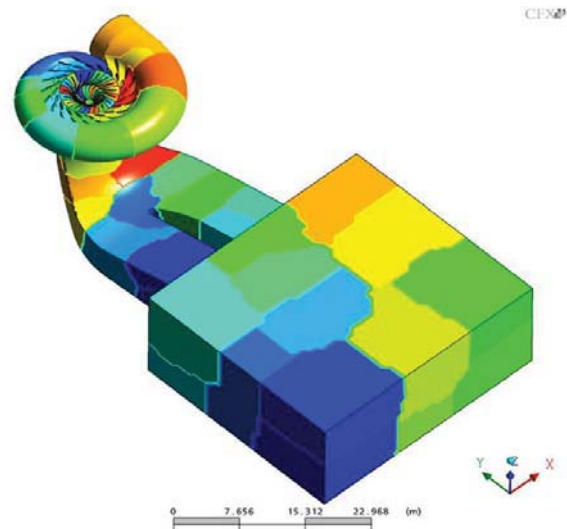
Одной из актуальных задач при проектировании швейно-трикотажных изделий является разработка новых методик конструирования одежды, учитывающих свойства ткани: волокнистый состав, виды переплетений, плотность полотна, способы отделки, анизотропию свойств. Для решения этой задачи на основе пакета LS-DYNA был создан РаВИС, позволяющий конструировать и исследовать на суперкомпьютере виртуальные платья из различных видов трикотажа. Задав свойства ткани, с помощью суперкомпьютера можно предсказать, как новое трикотажное изделие будет сидеть на фигуре женщины и насколько оно будет удобным в использовании (Долганина Н.Ю., Персидская А.Ю., Усенко И.Н.(ЮУрГУ)).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



Одной из серьезных проблем, возникающих при производстве труб для нефтепроводов, является эффект овализации концов труб при их закалке в процессе производства. Трубы с овальными концами нельзя сварить в единый трубопровод, и поэтому такие трубы приходится править на специальном прессе. Основными факторами, вызывающими овализацию трубы, являются неравномерность прогрева в индукционных установках и, как следствие, образование неравномерных температурных полей, а так же неравномерность последующего охлаждения водой в спрейере. Данные факторы можно устранить, изменив технологический процесс. С помощью РаВИС, моделирующего термическую обработку трубы, инженер имеет возможность задавать различные комбинации параметров: количество индукторов, длину каждого индуктора, силу и плотность тока в индукторе, геометрию обмотки индуктора, температуру и расход воды в спрейере. На основе полученных результатов инженер может определить оптимальную комбинацию параметров электромагнитных индукторов и спрейера, позволяющих минимизировать эффект овализации концов труб при закалке (Дорохов В.А.(ООО «Урал-Грид»), Иванов В.С. (ООО «Урал-Грид»)).

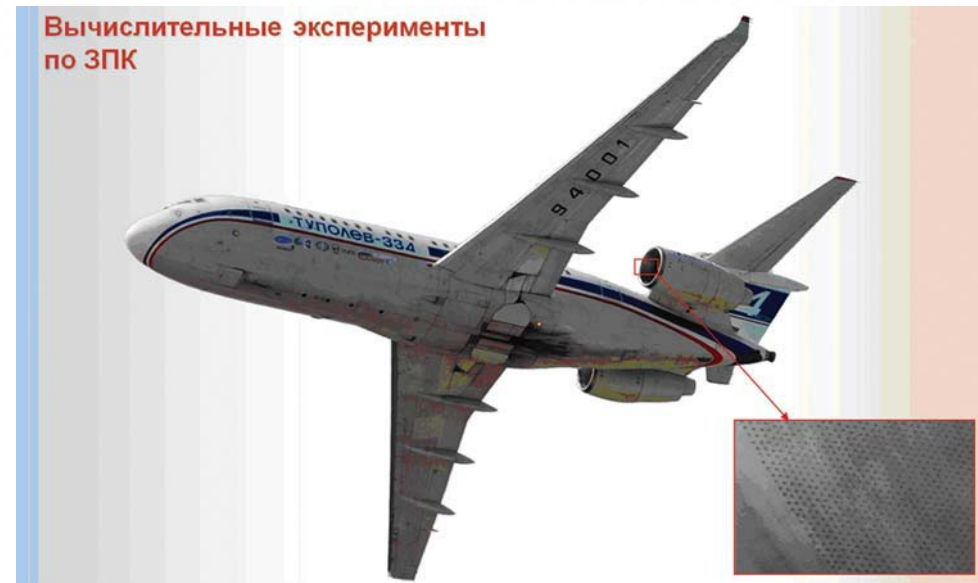
СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



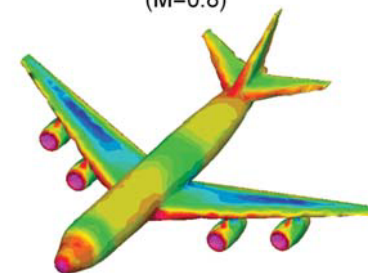
■ Центр коллективного пользования Санкт-Петербургского государственного политехнического университета развивает работы во многих направлениях. В частности, занимается решением ряда вычислительно ресурсоемких задач для ОАО «Силловые машины» — «ЛМЗ». На данном рисунке показана расчетная область проточной гидротурбины. (Федоров М.П., Болдырев Ю.Я., Шабров Н.Н. (СПбГПУ)).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

Вычислительные эксперименты по ЗПК

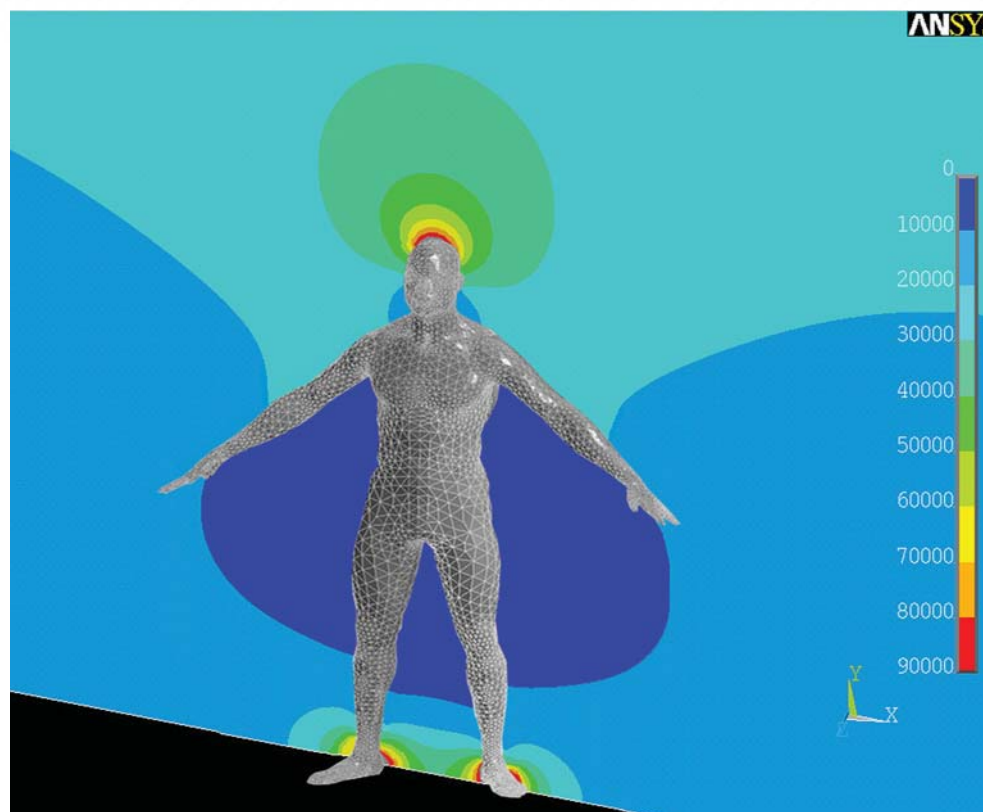


Давление на поверхности самолёта ($M=0.8$)



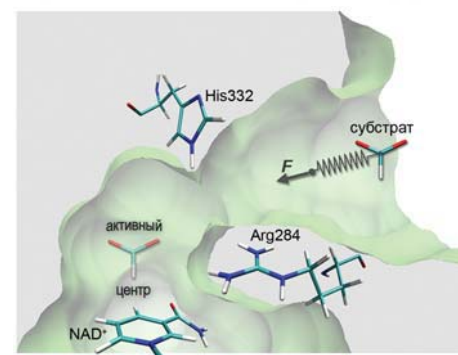
■ На рисунках представлены результаты моделирования звукопоглощающих конструкций для авиационной техники (ИММ РАН).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



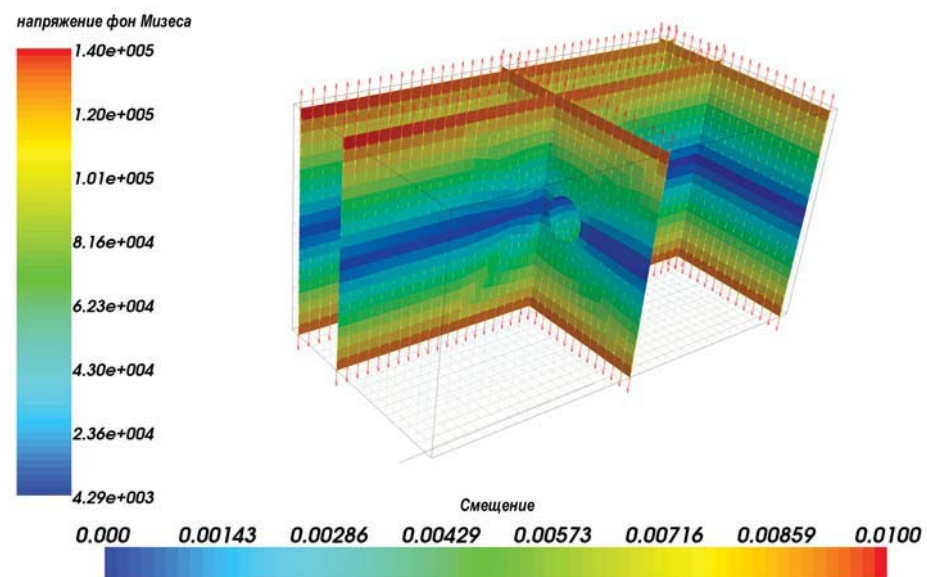
При обслуживании электрических подстанций возникает проблема негативного воздействия сильных электрических полей на человека. В ЮУрГУ был разработан РаВИС, позволяющий моделировать искажение электрического поля телом человека в зависимости от индивидуальных антропометрических характеристик. Полученные данные используются для разработки спецодежды, защищающей обслуживающий персонал от воздействия сильных электромагнитных полей, а также для создания специальных устройств индивидуального пользования, предупреждающих человека, что он находится в опасной зоне (Важинская Н.В., Украинская И.С., Сидоров А.И. (ЮУрГУ)).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



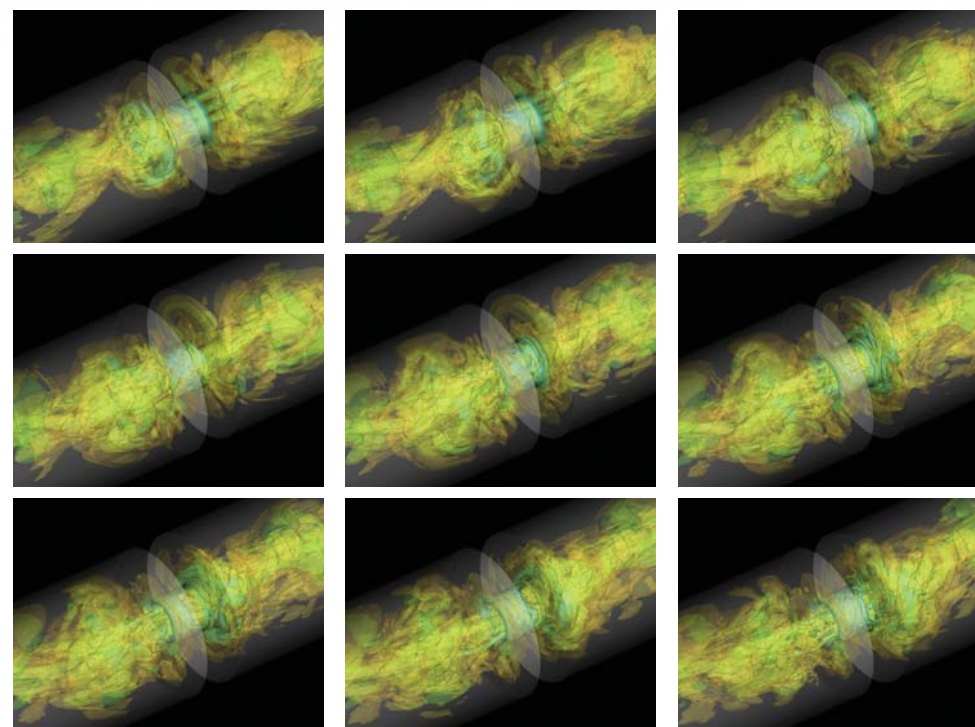
Традиционная молекулярная динамика позволяет моделировать траектории движения белков продолжительностью около сотни наносекунд. Тем не менее этого времени недостаточно, чтобы «увидеть» проникновение субстрата в активный центр фермента. Однако проблема может быть решена методом управляемой молекулярной динамики. Для ускорения взаимодействия при моделировании к субстрату прикладывается внешняя сила, способствующая движению молекулы в нужном направлении. Формиатдегидрогеназа используется в биокатализе для регенерации кофакторов. С помощью метода управляемой динамики удалось смоделировать транспорт субстрата через субстратный канал и выяснить роль аминокислотных остатков активного центра фермента в этом процессе (Нилов Д.К., Швьядас В.К. (факультет биоинженерии и биоинформатики МГУ имени М.В. Ломоносова), Шабалин И.Г., Попов В.О. (ИБ имени А.Н. Баха РАН)).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



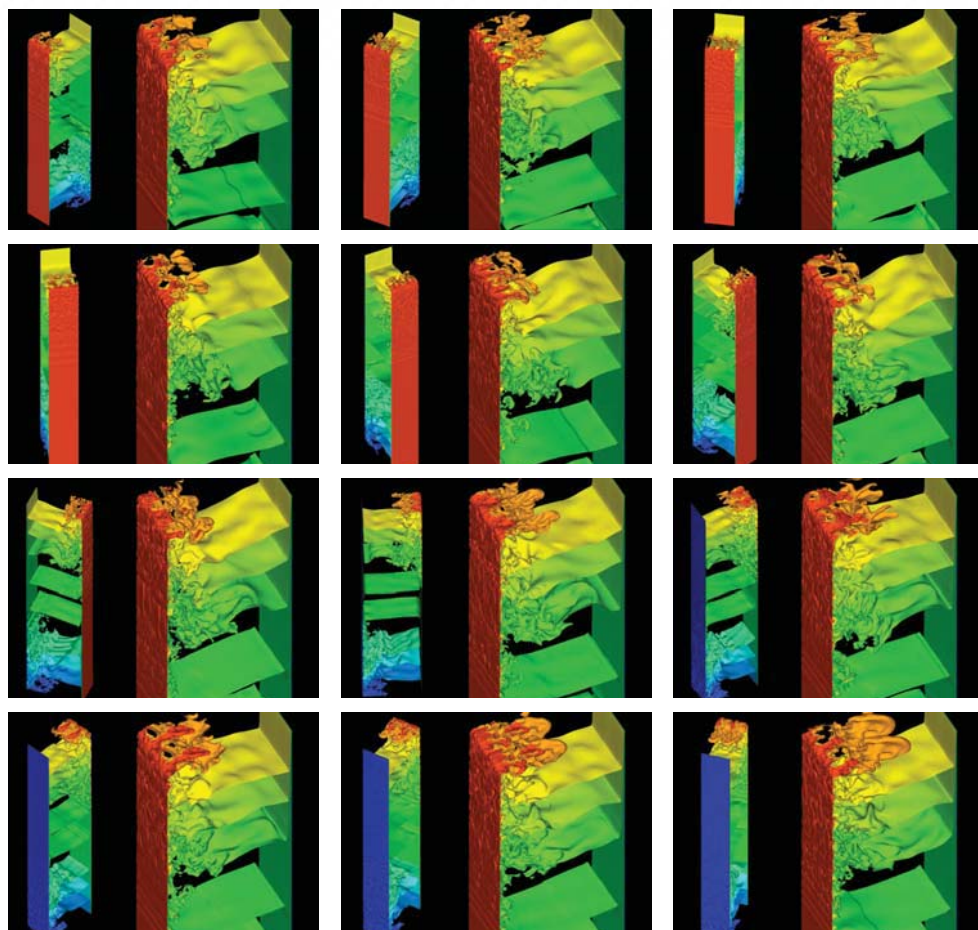
■ Проектирование новых классов микросхем со сверхплотной упаковкой большого числа элементов вызывает необходимость расчета механических напряжений, связанных с тепловым расширением сложных гетерогенных структур. При этом для хранения и обработки данных уже недостаточно памяти обычных компьютеров. Решение подобных задач оказывается возможным лишь с применением параллельных вычислительных систем (А.В.Позднеев, ВМК МГУ).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



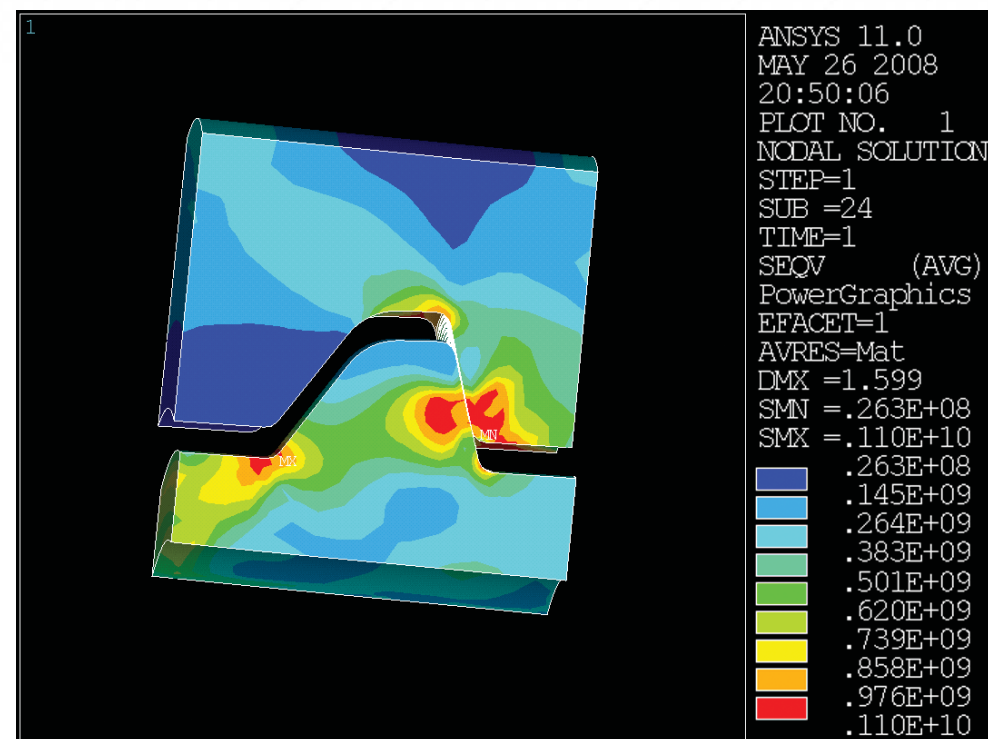
■ Изоповерхности плотности. Прямое моделирование течения в горле резонатора импедансной трубы с использованием тетраэдральной сетки, содержащей 7×10^6 тетраэдров. Расчет выполнялся на 500 ядрах суперкомпьютера с использованием гибридной модели вычислений. Основная цель расчетов — изучение свойств звукопоглощающих покрытий авиационных двигателей (ИММ РАН).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



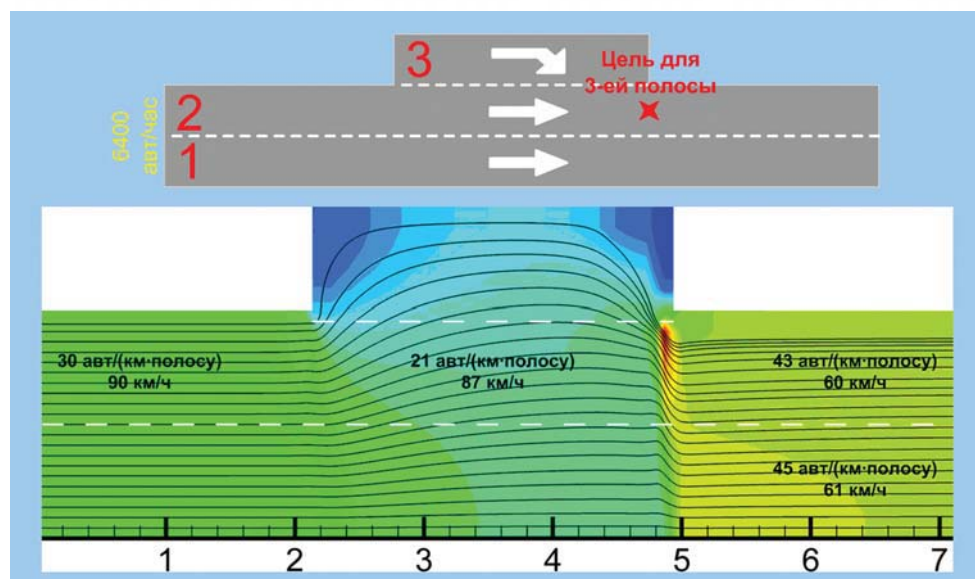
■ Задача о естественной конвекции в пассивном теплообменнике. Расчет выполняется на основе уравнений несжимаемости Навье—Стокса. Число Релея $Ra = 10^{11}$. Число точек 111×10^6 . Расчет выполнялся на 512 ядрах и носит рекордный характер, как с точки зрения числа используемых ядер суперкомпьютера, так и с точки зрения параметров моделируемого течения. С его помощью получено эталонное решение, применимое для последующей верификации алгоритмов (ИММ РАН).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



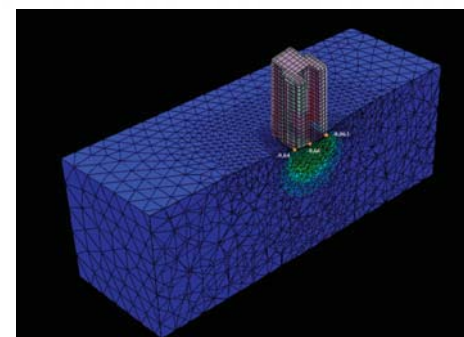
■ Актуальной задачей инженерного моделирования и анализа, решаемой для нужд нефтяной промышленности, является задача разработки новых видов резьбовых соединений для обсадных и насосно-компрессорных труб. Необходимо подобрать параметры резьбы, при которых обсадные колонны не разрывались, а насосно-компрессорные трубы допускали не менее пяти циклов свинчивания-развинчивания. Для решения этой задачи был создан PaBIC, реализующий параметризованную модель резьбового соединения в инженерном пакете ANSYS Mechanical, с помощью которого можно смоделировать приложение нагрузки на это соединение и изучить его поведение (Чернявский А.О.(ЮрГУ), Юрков В.В.(ООО «Урал-Грид»)).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



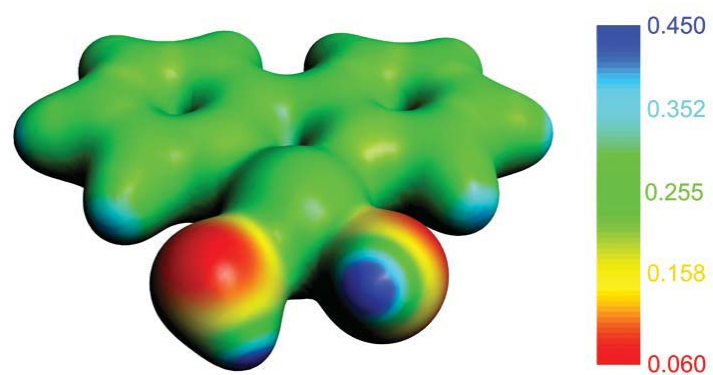
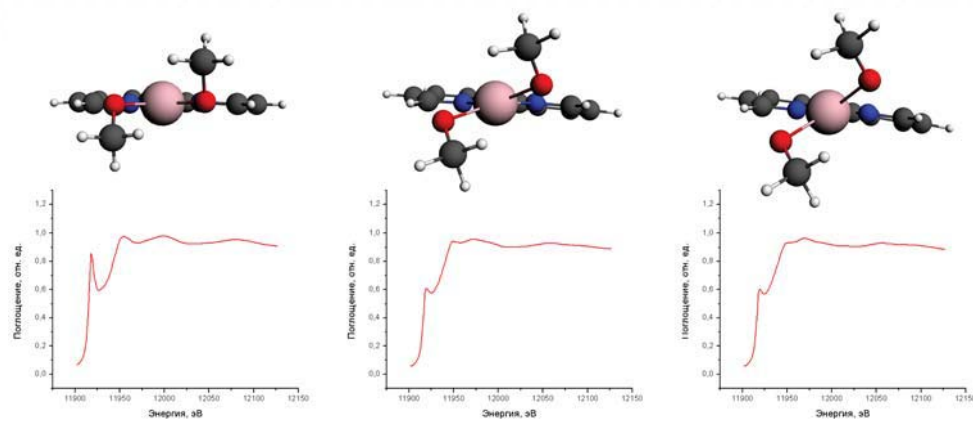
Использование высокопроизводительных систем для моделирования транспортной ситуации на улицах городов и магистралях. Разработаны оригинальные математические модели и методы, позволяющие учитывать двумерный характер дорог с учетом описания съездов, въездов, расширения и сужения магистрали. На рисунке показано моделирование временного расширения дороги при интенсивном движении. Заметим, что такая ситуация встречается, когда недисциплинированные водители выезжают на встречную полосу, а потом возвращаются в основной поток. Показано, что при интенсивном движении такая ситуация приводит к общему снижению пропускной способности магистрали (ИММ РАН).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



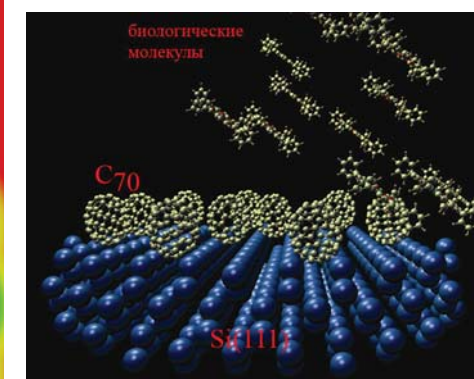
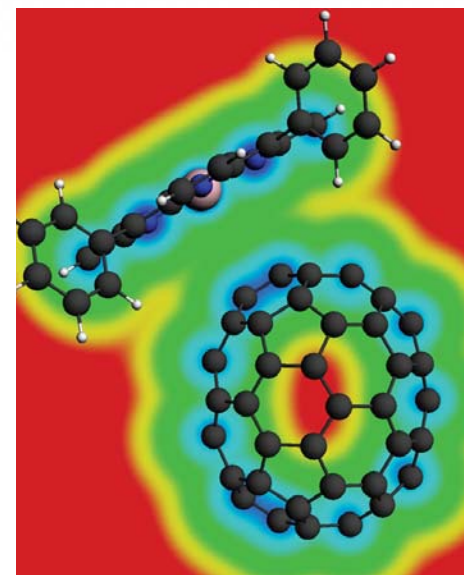
Одной из серьезных проблем при проектировании высотных зданий и сооружений является опасность неравномерной осадки здания и возникновения грунтовых деформаций, приводящих к разрушению соседних зданий. Поэтому критически важным является выбор правильного конструктивного решения фундамента здания: тип, ширина подошвы и глубина его заложения, — которое обеспечило бы равномерную осадку грунта и не оказывало бы негативного влияния на окружающие здания и сооружения. Для решения этой задачи на базе пакета ABAQUS был создан РаВИС, позволяющий исследовать различные проектные решения с учетом большого количества факторов: вид грунта, нагрузка от снега, давление ветра, сложная геометрия участка строительства, взаимное влияние фундаментов близко расположенных зданий. Созданный РаВИС помогает предотвратить неравномерную осадку здания, приводящую к образованию трещин и других более значительных дефектов (Репина К.В. (ЮУрГУ)).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



Теоретические спектры рентгеновского поглощения молекулы диметоксибипиридила золота, рассчитанные для различных возможных конфигураций молекулы. Распределение потенциала по изоповерхности электронной плотности (А.В.Солдатов, С.А.Сучкова, М.А.Солдатов, В.Н.Дацюк, ЮФУ).

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ



На основании многомасштабного компьютерного моделирования и квантово-механического анализа "из первых принципов" спектров рентгеновского поглощения определена локальная геометрия нового поколения биоорганических преобразователей солнечной энергии. На рисунках показаны распределение электронной плотности молекул (слева) и модель процесса формирования пленки из биологических молекул (справа) для солнечных элементов (А.В.Солдатов, С.А.Сучкова, М.А.Солдатов, В.Н.Дацюк, ЮФУ).