

ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БИБЛИОТЕК SCOTCH И METIS ДЛЯ ДЕКОМПОЗИЦИИ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК В МЕТОДИКЕ «ТИМ»

Т. Н. Половникова, А. А. Воропинов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Методика ТИМ предназначена для решения двумерных и трехмерных задач механики сплошной среды на неструктурированных сетках. Работа посвящена использованию библиотек SCOTCH и MeTiS для декомпозиции неструктурированных сеток для обеспечения проведения расчетов в режиме мелкозернистого распараллеливания в методике ТИМ [1, 2]. Интерес к библиотеке SCOTCH обусловлен высоким качеством получаемых декомпозиций, возможностью использовать распараллеливание в модели общей и распределенной памяти.

Введение

Для повышения точности проводимых расчетов и более адекватного решения сложных задач необходимо производить численное моделирование на сетках с большим количеством ячеек (счетных точек). Проведение расчетов с большим количеством счетных точек требует значительного календарного времени. Один из путей сокращения сроков – проведение расчетов в параллельном режиме счета.

Эффективное исполнение счетных программ на параллельных машинах с распределенной памятью требует декомпозиции данных по процессам таким образом, чтобы распределение вычислительной нагрузки по процессам было равномерным, а количество обменов минимальным. Для сеточных методик задача декомпозиции, как правило, решается путем геометрического разделения области решения на фрагменты вдоль линий сетки. При этом требуется получение таких фрагментов, чтобы время расчета каждого из них было примерно одинаково. Это и является задачей декомпозиции. Получение качественной декомпозиции является актуальной проблемой, особенно для методик, использующих неструктурированные сетки.

Декомпозиция – задача равномерного распределения вычислений между процессорами, причем количество обменов (взаимодействий) между процессорами было минимальным.

Один из методов декомпозиции основан на разрезании графа на подграфы. В качестве исходных данных используется граф, отображающий структуру сетки.

В докладе приводятся декомпозиции, полученные с помощью библиотек SCOTCH [3] и MeTiS [4] в методике ТИМ. В качестве исходных данных

для библиотек используется граф, отображающий структуру сетки.

Библиотеки SCOTCH и MeTiS – это две свободные распространяемые библиотеки, реализующие этот метод:

- французская библиотека SCOTCH, разрабатываемая в университете Бордо, использует в качестве основного метода декомпозиции – многоуровневый диффузионный метод;

- американская библиотека MeTiS, разрабатываемая в университете Миннесоты, использует в качестве основного метода декомпозиции – метод многоуровневой декомпозиции по k направлениям.

Декомпозиции выполнялись на ряде типичных сеток методики ТИМ: в двумерном случае на четырехугольной, шестиугольной сетках и диаграмме Вороного, в трехмерном случае на шестигранной, восьмигранной сетках и диаграмме Вороного на сетках примерно в 1 млн ячеек.

Качество декомпозиции определяли с помощью следующих критериев качества:

1. Разбалансировка – отношение максимального количества точек (A_{\max}) на процессоре к среднему ($A_{\text{ср}}$). Коэффициент разбалансировки:

$$K = \left(\frac{A_{\max}}{A_{\text{ср}}} - 1 \right) \times 100\% .$$

2. Отношение количества разрезанных ребер ($L_{\text{разр}}$) между компактами (что соответствует обмену информации между соответствующими процессорами) к общему количеству ребер графа $L_{\text{общ}}$:

$$L = \frac{L_{\text{разр}}}{L_{\text{общ}}} \times 100\% .$$

Разрезанное ребро – ребро, соединяющее две вершины из разных компактов.

1. Декомпозиция в двумерном случае

В двумерном случае декомпозиция выполнялась на четырехугольной, шестиугольной сетках и сетке диаграммы Вороного (рис. 1):

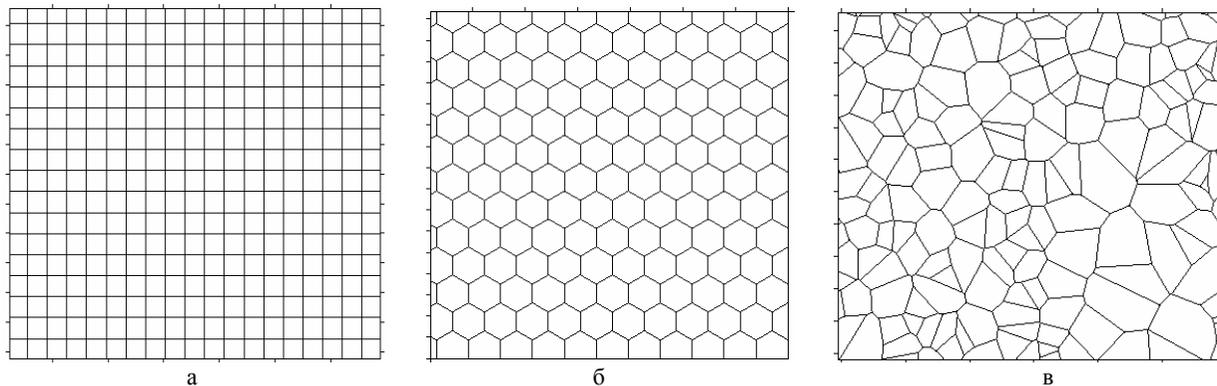


Рис. 1. Фрагменты сеток для тестирования декомпозиций: а – четырехугольная сетка; б – шестиугольная сетка; в – сетка диаграммы Вороного

Декомпозиции строились в основном на сетках примерно в 1 млн ячеек (табл. 1).

Характеристика использованных сеток Таблица 1

Тип сетки	Количество ячеек	Количество ребер	Количество узлов
Четырехугольная	1000000	2002000	1002001
Шестиугольная	1000500	3001501	2001002
Диаграмма Вороного	1000867	3002602	2001736

В двумерном случае коэффициенты разбалансировки при декомпозиции на разное количество компактов представлено в табл. 2.

Коэффициенты разбалансировки в зависимости от числа компактов Таблица 2

Количество компактов	Коэффициент разбалансировки SCOTCH	Коэффициент разбалансировки MeTiS
12	1,7 %	0,0 %
16	2 %	0,001 %
24	2,8 %	0,004 %
25	3,7 %	0,002 %
64	2,6 %	0,001 %
65	3,4 %	0,004 %
99	2,6 %	0,019 %
100	2,7 %	0,010 %
200	3 %	0,030 %
201	4,1 %	0,028 %
512	2,1 %	0,046 %
1024	3,2 %	0,097 %
2048	3,9 %	0,302 %

Декомпозиция с помощью библиотеки MeTiS выполнялась через три разные процедуры: METIS_PartGraphRecursive, METIS_PartGraphKway, METIS_PartGraphVKway. В результате получали три различных варианта декомпозиций (рис. 2).

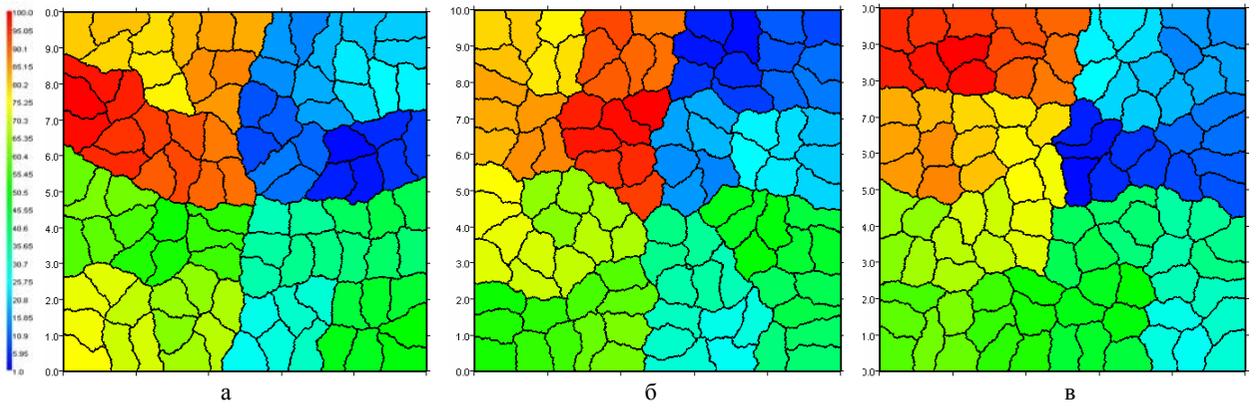


Рис. 2. Декомпозиция на 100 компактов сетки диаграммы Вороного через библиотеку совместности с MeTiS по различным процедурам: а – METIS_PartGraphRecursive; б – METIS_PartGraphKway; в – METIS_PartGraphVKway

Пример двумерной декомпозиции сетки диаграммы Вороного с помощью библиотек SCOTCH и MeTiS приведен на рис. 3. Для сравнения с декомпозицией SCOTCH мы использовали декомпозицию MeTiS, полученную с помощью процедуры METIS_PartGraphKway, т. к. разработчики библиотеки MeTiS рекомендуют для выполнения декомпозиции именно эту процедуру.

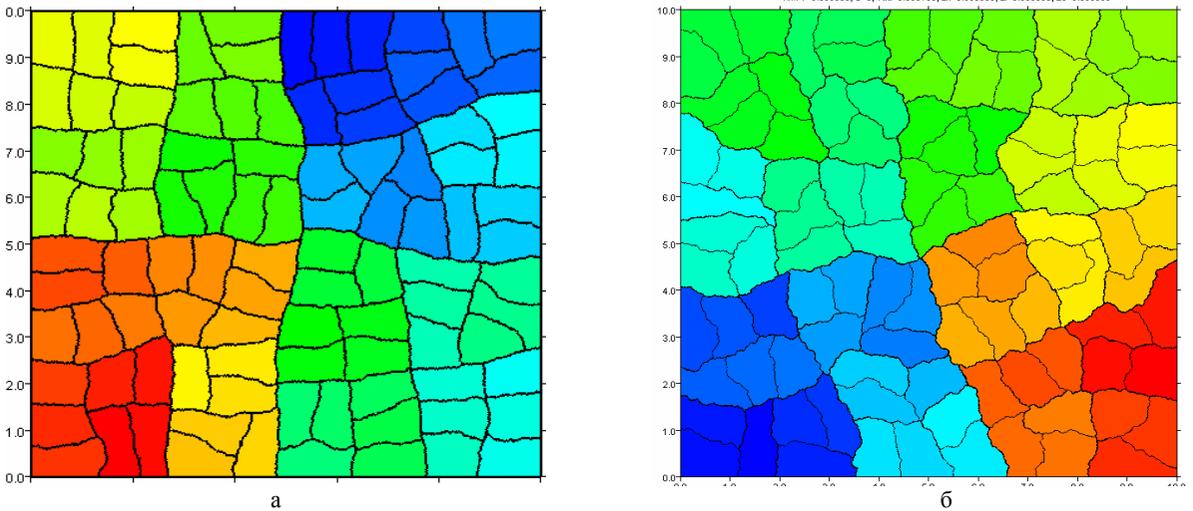


Рис. 3. Двумерная декомпозиция на 100 компактов сетки диаграммы Вороного, используя библиотеки: а – SCOTCH; б – MeTiS (процедура METIS_PartGraphKway)

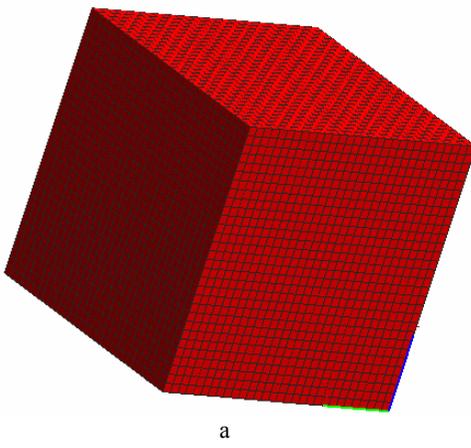
2. Выводы по тестированию в ТИМ-2D

- Декомпозиция SCOTCH достаточно высокого качества (коэффициент разбалансировки не превышает 4,1 %).
- Коэффициент разбалансировки MeTiS меньше, чем в SCOTCH.
- При декомпозиции SCOTCH на четное количество компактов коэффициент разбалансировки несколько меньше (~ 1 %).
- В SCOTCH более гладкие границы компактов по сравнению с декомпозициями MeTiS.

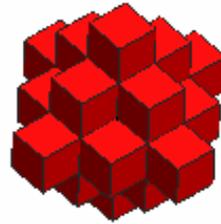
- В декомпозиции SCOTCH достаточно большое количество маленьких границ соприкосновения между компактами, состоящих всего из нескольких ребер.

3. Декомпозиция в трехмерном случае

- В трехмерном случае декомпозиции выполнялись на неструктурированных сетках трех типов:
1. Шестигранная сетка (рис. 4):



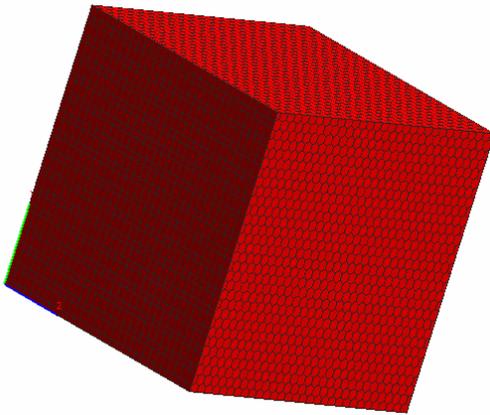
а



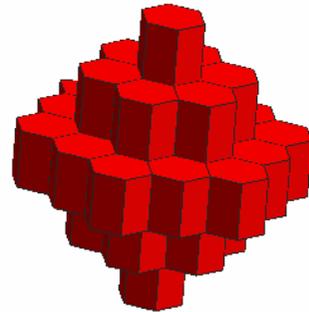
б

Рис. 4. Фрагмент шестигранной сетки (а); вид внутренней ячейки шестигранной сетки с тремя слоями соседей (б)

2. Восьмигранная сетка (рис. 5):



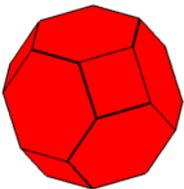
а



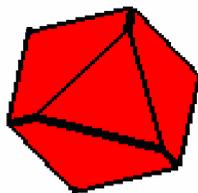
б

Рис. 5. Фрагмент восьмигранной сетки (а); вид внутренней ячейки восьмигранной сетки с тремя слоями соседей (б)

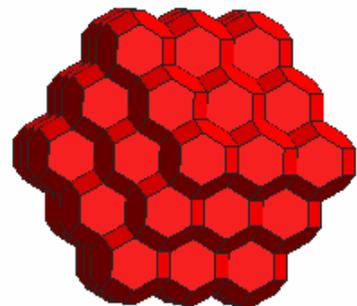
3. Сетка диаграммы Вороного (рис. 6):



а



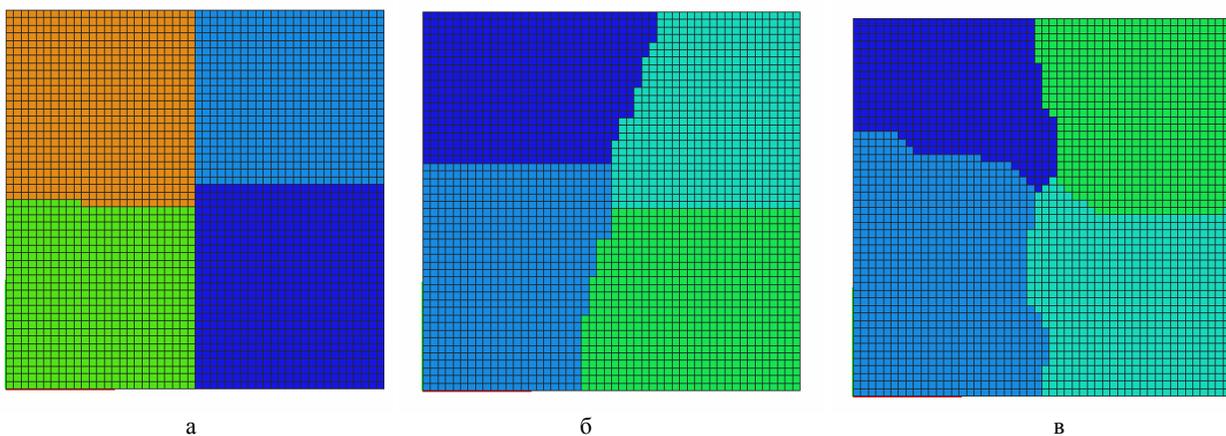
б



в

Рис. 6. Вид внутренней ячейки диаграммы Вороного (а); вид угловой ячейки диаграммы Вороного (б); вид внутренней ячейки с тремя слоями сетки диаграммы Вороного (в)

Декомпозиция трехмерной сетки с помощью библиотеки MeTiS тоже выполнялась через три различные процедуры (рис. 7):



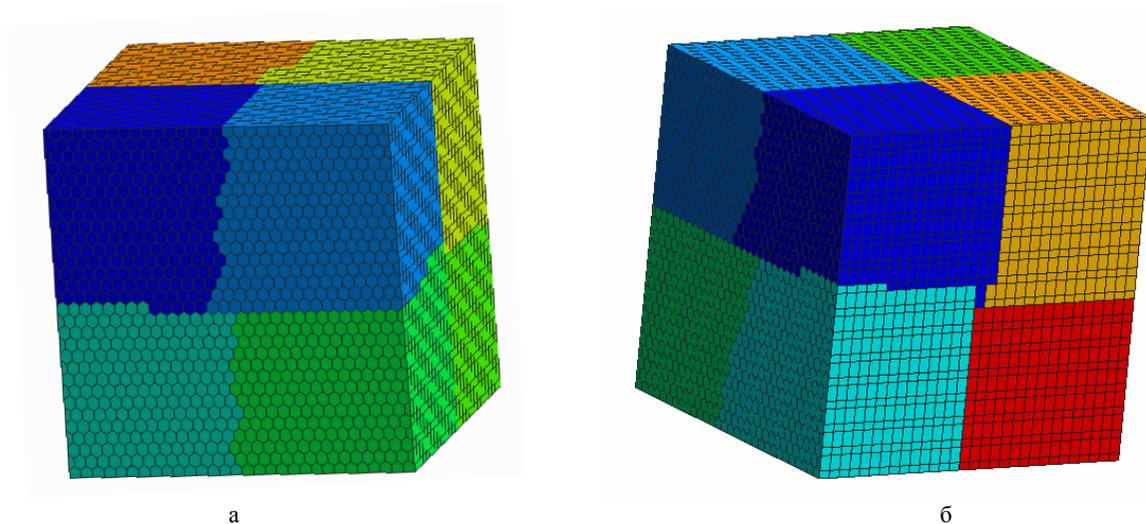
а

б

в

Рис. 7. Сечение плоскостью Z декомпозиций шестигранной сетки (1005000 ячеек) на 8 компактов через библиотеку MeTiS по различным процедурам: а – METIS_PartGraphRecursive; б – METIS_PartGraphKway; в – METIS_PartGraphVKway

Пример трехмерной декомпозиции восьмигранной сетки на 8 компактов с помощью библиотек SCOTCH и MeTiS приведен на рис. 8:



а

б

Рис. 8. Трехмерная декомпозиция восьмигранной сетки, используя библиотеки: а – SCOTCH; б – MeTiS (процедура METIS_PartGraphKway)

При выполнении декомпозиции MeTiS было возможно получение компактов с дефектом в виде наличия выступающего слоя шириной в одну ячейку (рис. 9):

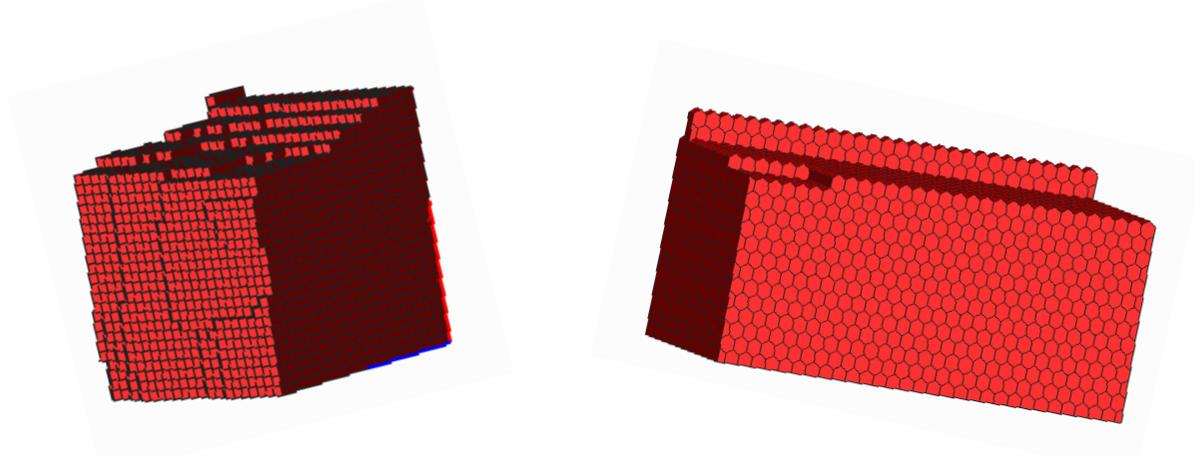


Рис. 9. Выступающий слой шириной в одну ячейку (трехмерная декомпозиция с помощью библиотеки MeTiS)

При выполнении декомпозиции с помощью библиотеки SCOTCH возможно получение маленькой поверхности соприкосновения между компактами (рис. 10), но так как методика ТИМ считает в параллельном режиме и без наложения, то такая ситуация не является для нас критичной.

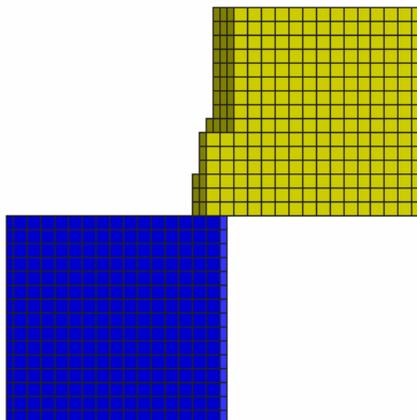


Рис. 10. Маленькая поверхность соприкосновения (трехмерная декомпозиция с помощью библиотеки SCOTCH)

В табл. 3 и 4 представлены результаты декомпозиций больших сеток на МП-30 на 100 компактов.

Таблица 3

Декомпозиции шестигранных сеток больших размеров на МП-30

Количество ячеек	Время декомпозиции MeTiS (с)	Время декомпозиции SCOTCH (с)
10 000 000	42	210
20 000 000	83	374
22 520 000	93	423
62 000 000	–	959

Таблица 4

Декомпозиции восьмигранных сеток больших размеров на МП-30

Количество ячеек	Время декомпозиции MeTiS (с)	Время декомпозиции SCOTCH (с)
5 000 000	27	119
10 000 000	53	219
16 500 000	70	355
54 000 000	–	906

4. Выводы по тестированию в ТИМ-3D

- По интегральным характеристикам (разбалансировка, количество разрезанных ребер) качество декомпозиции оказывается близким.

- При декомпозиции SCOTCH компакты имеют геометрически более правильную форму.

- В декомпозиции MeTiS в ряде случаев возникают особенности, выражающиеся в появлении тонких выдающихся слоев в одну ячейку. При такой декомпозиции значительно возрастает вероятность «перебития» параобластей.

- SCOTCH требует примерно в 3 раза меньше оперативной памяти.

На основе проведенного тестирования в методике ТИМ-3D для задач газодинамики и упругопла-

стичности по умолчанию установлена декомпозиция SCOTCH.

Литература

1. Соколов С. С., Панов А. И., Воропин А. А., и др. Методика ТИМ расчета трехмерных задач механики сплошных сред на неструктурированных много-гранных лагранжевых сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 3. С. 37 – 52.
2. Соколов С. С., Воропин А. А., Новиков И. Г. и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Там же. 2006. Вып. 4. С. 29 – 43.
3. Pellegrini F. SCOTCH: Static Mapping, Graph, Mesh and Hypergraph Partitioning, and Parallel and Sequential Sparse Matrix Ordering Package. <http://www.labri.fr/personnel/pellegrin/scotch/>.
4. ParMETIS – Parallel Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering [gkhome/ http://glaros.dtc.umn.edu/~metis/parmetis/overview](http://glaros.dtc.umn.edu/~metis/parmetis/overview).