

# РЕАЛИЗАЦИЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО ФОРМАТА ХРАНЕНИЯ МАТРИЦ СЛАУ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ НА ЭВМ С ГИБРИДНОЙ АРХИТЕКТУРОЙ

*В. П. Девятайкин, А. С. Козелков, С. В. Лашкин, А. В. Ялозо, В. В. Курулин*

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

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации НШ-6637.2016.5, а также при финансовой поддержке РФФИ – проект № 16-01-00267.*

Данная работа выполнена в рамках программного комплекса ЛОГОС [1], предназначенного для решения связанных и сопряженных задач тепло-массо-переноса и прочности на параллельных ЭВМ.

В настоящее время для ускорения вычислений начали активно использоваться гибридные (гетерогенные) вычислительные системы, в которых наряду с процессорами традиционной архитектуры используются массивно-параллельные сопроцессоры. Их использование предполагает адаптацию и оптимизацию всех вычислительных циклов программных модулей, а зачастую и полное их переписывание.

Современные задачи инженерного анализа основаны на численном моделировании различных гидродинамических процессов. К таким задачам можно отнести задачи атомной, автомобильной, космической промышленности и др. Важным аспектом численного эксперимента является скорость получения результатов, которая зависит от эффективности программной реализации и используемых вычислительных систем. Наиболее затратным этапом является получение численного решения.

Одним из численных алгоритмов, используемых для получения численного решения, является полуневявный итерационный алгоритм SIMPLE [2–4], реализованный в пакете программ ЛОГОС, предназначенный в первую очередь для решения задач несжимаемых и слабосжимаемых течений с возможностью расширения на транс-, сверхзвуковые течения с произвольными числами Маха.

В результате дискретизации уравнений Навье – Стокса с применением алгоритма SIMPLE получается четыре СЛАУ с разреженными матрицами: три системы для каждой из компонент скоростей и одна для коррекции давления. Практика показывает, что наиболее затратным по времени является решение матрицы давления, которое при использовании классических итерационных методов занимает около 90 % вычислительного времени расчетного шага. Таким образом, эффективность SIMPLE напрямую зависит от эффективности реализации решателя СЛАУ.

Разреженные матрицы требуют специальных форматов хранения, которые позволяют значительно сократить требования к объему памяти и исключить избыточные вычисления с использованием нулевых элементов. Для ЭВМ с гибридной архитектурой разработаны особые форматы хранения разреженных матриц, которые позволяют более эффективно использовать их вычислительный потенциал.

Таким образом, целью работы является реализация специализированного формата хранения матриц СЛАУ для ускорения вычислений задач гидродинамики на ЭВМ с гибридной архитектурой. На основе этого формата необходимо реализовать итерационные методы решения СЛАУ и сравнить эффективность решения практических задач на ЭВМ с гибридной архитектурой с текущей реализацией.

Рассмотрим форматы хранения разреженных матриц. В текущей реализации ЛОГОС используются CSR и LDU [5]. Формат ELLPACK является специализированным форматом, предназначенным для использования на гибридных архитектурах. Идея данного формата заключается в том, чтобы хранить одинаковое количество элементов из каждой строки, в числе которых могут быть и нулевые, равное максимальному количеству ненулевых элементов на строку во всей матрице.

Стоит отметить, что с точки зрения потребления памяти формат ELLPACK может быть эффективен для матриц, содержащих близкое количество ненулевых элементов во всех строках. Иначе, возникает необходимость хранения большого числа нулевых элементов. ELLPACK является более предпочтительным, так как, во-первых, он создаёт выровненную структуру хранения данных в памяти [6]. Это требуется, потому что центральные процессоры в качестве основной единицы обмена с памятью используют «большое» машинное слово (cacheline), размер которого для процессоров и сопроцессоров Intel, используемых для счёта, составляет 512 бит. При сохранении какого-то объекта в памяти может случиться, что некое поле, состоящее из нескольких байтов, пересечёт «естественную границу» слов в памяти, и обращение к невыровненным данным происходит дольше, нежели к данным, находящимся внутри целого «машинного слова» в памяти.

И, во-вторых, при выполнении матрично-векторных операций количество итераций внутрен-

него цикла является постоянным числом, что избавляет от необходимости вычислять параметры на каждой итерации внешнего цикла и позволяет произвести его векторизацию.

На основе формата хранения матриц ELLPACK в скалярном решателе SIMPLE программного комплекса ЛОГОС были реализованы методы решения СЛАУ Гаусса – Зейделя и PCG. Использование ELLPACK позволяет получить ускорение в районе 40 % при выполнении основного расчётного цикла. Однако наличие прочих вычислительных операций, таких как вычисление нормы невязки и межпроцессорный обмен, дающих значительный вклад в общее время выполнения алгоритма, могут понизить его общее ускорение до 15 %.

Для демонстрации работоспособности реализованных алгоритмов и полученного ускорения решения СЛАУ произведено решение трёх задач с конечно элементными сеточными моделями, состоящими из тетраэдров, призм и гексаэдров на ЭВМ гибридной архитектуры с конфигурацией. Расчёты производились на ускорительном сервере «Технопарк – Саров» [7] при использовании различного числа MPI процессов и OpenMP потоков. Выбор количества OpenMP потоков для каждого MPI процесса производился таким образом, чтобы полностью задействовать вычислительные мощности устройства, т. е. 240 вычислительных потоков. Все задачи решались до сходимости, получена точность решения идентичная точности текущей реализации.

### Турбулентное течение в трубе круглого сечения

Рассматривается стационарное изотермическое турбулентное течение вязкой несжимаемой жидкости в прямолинейной круглой трубе, соответствующее числу Рейнольдса  $10^5$ . Для расчетов используется блочно-структурированная сетка. Общее число ячеек порядка 800 тысяч.

Использование формата ELLPACK дает ускорение решения СЛАУ методом Гаусса-Зейделя от 30 до 43 %, а методом PCG от 14 до 28 % по сравнению с форматом CSR.

### Турбулентное обтекание препятствия «Ahmedbody»

В данном численном эксперименте рассматривается задача турбулентного обтекания потоком воздуха препятствия «Ahmedbody» [8]. Скорость набегающего потока на входе в расчетную область задается равной 15 м/с, число Рейнольдса порядка  $Re = 10^6$  и параметры воздуха считаем стандартными. Для расчетов используется неструктурированная сетка из усеченных гексаэдров. Общее число ячеек составляет порядка 900 тысяч. Постановка и сеточная модель для данной задачи полностью трехмерные.

Использование формата ELLPACK дает ускорение решения СЛАУ методом Гаусса – Зейделя от

12 до 28 %, а методом PCG от 20 до 37 % по сравнению с форматом CSR.

### Течение в канале за обратным уступом

В данной задаче рассматривается стационарное изотермическое турбулентное течение газа в канале с обратным уступом, соответствующее числу Рейнольдса 21000 [9]. Общее число ячеек составляет порядка 300 тысяч. В численном эксперименте использовались трехмерная расчетная сетка (исходная постановка задачи – двумерная).

Использование формата ELLPACK дает ускорение решения СЛАУ методом Гаусса-Зейделя от 5 до 24 %, а методом PCG от 10 до 16 % по сравнению с форматом CSR.

В результате выполнения данного исследования произведена реализация структуры памяти и внедрение в программный комплекс ЛОГОС специализированного формата хранения разреженных матриц ELLPACK, который позволил адаптировать решатель систем линейных алгебраических уравнений SIMPLE на ЭВМ с гибридной архитектурой, что позволяет более эффективно использовать их вычислительную мощность.

### Литература

1. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Лашкин С. В., Силаев Д. П., Симонов П. Г., Тятюшкина Е. С. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. № 4. С. 44–56.
2. Ferziger J. H., Peric M. Computational methods for fluid dynamics., Berlin, New York, Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Tokyo: Springer, 2002. P. 423.
3. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. В 2-х томах, т. 1. М.: Мир, 1991. С. 504.
4. Patankar S. Numerical heat transfer and fluid flow, New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. P. 197.
5. Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н., Карпенко А. Г., Козелков А. С., Тетерина И. В. Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. М.: Физматлит, 2013. P. 600.
6. Копысов С. К., Новиков А. К., Промежуточное программное обеспечение параллельных вычислений. Ижевск: «Удмуртский университет», 2012.
7. ООО «ЦКО», Саров, Россия [Electronic Resource] 2016. Mode of access: <https://compcenter.org/>
8. Ahmed S. R., Ramm G. Some Salient Features of the Time-Averaged Ground Vehicle Wake. *SAE Paper*, 1984.
9. Menter F. Two-equation eddy viscosity turbulence models for aerodynamics flows. AIAA Paper, pp. 92–429, 1992.