

УДК 519.6

## МЕТОДИЧЕСКИЕ ПРИКЛАДНЫЕ ТЕСТЫ РФЯЦ-ВНИИЭФ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

А. В. Алексеев, С. П. Беляев, А. И. Бочков, А. Н. Быков, М. В. Ветчинников,  
А. Н. Залялов, А. А. Нуждин, С. П. Огнев, Н. С. Самсонова, И. С. Сапронов,  
И. Н. Чистякова, Т. В. Шемякина, Р. М. Шагалиев, Ю. В. Янилкин  
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Статья посвящена вопросам тестирования высокопроизводительных вычислительных систем, ориентированных на численное моделирование сложных физических процессов. Приводится обзор методических прикладных тестов (*miniapps* в англоязычной терминологии), разработанных в РФЯЦ-ВНИИЭФ. Пакет тестов включает программы моделирования различных физических процессов: переноса нейтронов с применением разностных методов (в кинетическом и диффузионном приближениях) и метода Монте-Карло, газовой динамики, теплопроводности, молекулярной динамики. Тестовые программы предназначены для оценки эффективности распараллеливания, реальной производительности и правильности выполнения вычислений высокопроизводительными вычислительными системами. Рассматриваются общая функциональность тестовых программ, а также особенности алгоритмов и процедуры тестирования для каждой методики.

*Ключевые слова:* высокопроизводительные вычислительные системы, численное моделирование физических процессов, тестовая программа, *miniapps*, эффективность распараллеливания, производительность.

### Введение

При решении задач численного моделирования сложных физических процессов применяются высокопроизводительные вычислительные системы (ВВС), позволяющие использовать алгоритмы распараллеливания. Объективная оценка применимости ВВС для конкретных приложений требует комплексного тестирования, включающего исследование характеристик различных компонентов, а также вычислительной системы в целом. Эта оценка включает в себя следующие направления работ:

- оценка производительности вычислительных устройств и ВВС в целом в различных режимах на актуальных задачах и алгоритмах;
- оценка эффективности распараллеливания для задач различного класса;
- проверка правильности выполнения вычислений при проведении расчетов характерных задач в различных режимах;
- оценка отдельных параметров ВВС.

Последняя из указанных оценок, включая оценку быстродействия оперативной памяти, производительности коммуникационной и файловой подсистем, а также ВВС в целом, выполняется с помощью набора синтетических тестовых программ, таких как *Stream* [1], *IOR* [2], *b\_eff* [3], *NP CG* [4], *HPL* [5]. Эти тестовые программы (так называемые *специальные тесты* [6]) свободно распространяются, легко портируются на различные аппаратно-программные платформы и вследствие этого широко используются в мире для исследования характеристик ВВС.

Тем не менее для определения возможности эффективного применения ВВС необходимо исследование с использованием тестов, более приближенных к реальным приложениям. Для этих целей существует отдельный класс тестовых программ, представляющих собой упрощенные аналоги вычислительных ядер методик моделирования физических процессов. В них используются аналогичные физико-математические приближения, схожие методы дискретизации и численного решения, а также алгоритмы распараллеливания. В зарубежной практике такие тестовые программы называются *миниприложениями* (miniapps или proхuapps). Можно отметить пакеты тестов, созданные в национальных лабораториях США, например, давно известный пакет NPВ [7], а также более современные Mantevo [8] и Exascale Proxy Applications [9], которые широко применяются при разработке ВВС, а также в ходе приемочных испытаний.

Тестовые программы подобного класса, разработанные в РФЯЦ-ВНИИЭФ (аналогичные работы также ведутся в РФЯЦ-ВНИИТФ), называются *методическими прикладными тестами* (МПТ) [6]. Название, с одной стороны, подчеркивает отличие от международных тестов, а с другой стороны, отражает схожесть численных методов и алгоритмов распараллеливания в этих программах с прикладными методиками численного моделирования физических процессов, ориентированными на использование ВВС.

Работа над МПТ в РФЯЦ-ВНИИЭФ началась в середине 90-х годов с появлением ВВС с распределенной памятью [10]. С тех пор созданный пакет программ успешно применяется для тестирования сложных вычислительных систем, постоянно развивается, пополняется новыми тестами и адаптируется под новые аппаратно-программные платформы. С помощью МПТ были выполнены оценки эффективности применения многих образцов ВВС отечественной и зарубежной разработки. В частности, были протестированы образцы ВВС разработки IBM и Cray [11–13].

Статья посвящена обзору МПТ, разработанных в РФЯЦ-ВНИИЭФ. Пакет тестов включает программы моделирования различных физических процессов: переноса нейтронов с применением разностных методов (в кинетическом и диффузионном приближениях), а также метода Монте-Карло, газовой динамики, теплопроводности, молекулярной динамики. Рассматриваются общая функциональность тестовых программ, а также особенности алгоритмов и процедуры тестирования для каждой методики.

### Общие функциональные возможности МПТ

Основными показателями, определяющими возможность эффективного применения ВВС для моделирования физических процессов, являются производительность отдельных вычислительных устройств (ядер, процессоров, узлов) и ВВС в целом, правильность выполнения и эффективность распараллеливания вычислений.

Основным способом распараллеливания вычислений для рассматриваемых МПТ является использование парадигмы распределенной памяти с применением процедур библиотеки MPI для организации передачи сообщений между процессами. Распределение данных задачи по MPI-процессам, как правило, выполняется путем пространственной декомпозиции области решения на подобласти.

Для определения эффективности распараллеливания в качестве наиболее используемого применяется метод слабого масштабирования (weak scaling). Согласно этому методу для большинства тестовых программ сначала выполняется расчет задачи в последовательном режиме и определяется время исполнения  $T_1$ . Затем размер задачи увеличивается в  $n$  раз (например, по пространственным переменным), выполняется параллельный расчет увеличенной задачи с использованием  $n$  MPI-процессов и определяется время исполнения  $T_n$ . Вычисляются коэффициент ускорения и эффективность распараллеливания:

$$Sp_n = \frac{nT_1}{T_n}; \quad E_n = \frac{Sp_n}{n} \cdot 100\% \quad (1)$$

В случае использования метода сильного масштабирования (strong scaling) в параллельном режиме считается задача того же размера, что и в последовательном. Коэффициент ускорения вычисляется как  $Sp_n = T_1/T_n$ , эффективность распараллеливания определяется по формуле (1).

Следует отметить, что эффективность распараллеливания может определяться относительно одного вычислительного ядра либо относительно вычислительного узла ВВС. Последний способ может применяться при тестировании ВВС с гетерогенными вычислительными узлами, которые наряду с универсальными процессорами содержат арифметические ускорители или сопроцессоры.

Для оценки производительности отдельных вычислительных устройств и ВВС в целом могут использоваться разные метрики. На первый взгляд, предпочтительнее прямой подсчет количества операций двойной точности с плавающей запятой, выполненных программой за время расчета задачи, с выдачей итогового значения в единицах производительности (флопсах). Однако применение такой метрики имеет ряд недостатков. Так, для довольно сложных тестовых программ трудно правильно подсчитать количество арифметических операций. Оно может, например, зависеть от ветви численного алгоритма, по которой идет вычислительный процесс на разных стадиях решения задачи. Также вызывает вопросы учет операций деления, которые в ряде случаев могут выполняться за количество тактов, на порядок большее по сравнению с операцией сложения.

Учитывая вышесказанное, оптимальной метрикой для оценки производительности ВВС представляется количество ячеек фазового пространства, которые рассчитывает тестовая программа в единицу времени (секунду). Такая метрика является достаточно простой и точной, что позволяет с использованием соответствующих МПТ выполнять объективное сравнение производительности различных вычислительных систем.

Что касается контроля правильности выполнения вычислений, то в МПТ предусмотрена выдача верификационного параметра. Как правило, это некая интегральная или средняя величина, характерная для соответствующего физического процесса (количество нейтронов в системе, средняя плотность вещества и т. п.). Отметим, что значение верификационного параметра может зависеть от ряда факторов, в частности количества параллельных процессов или числа итераций. В связи с этим в описании МПТ приводится точная постановка расчета, выполняемого с целью верификации.

Остальные функциональные возможности МПТ определяются общими требованиями к тестовым программам. А именно, МПТ:

- являются представительными, т. е. отражают особенности вычислительных алгоритмов, структуру хранения данных и технологии распараллеливания прикладных программ численного моделирования физических процессов;
- написаны на языках высокого уровня, являются переносимыми: не зависят от операционной системы, внешних библиотек, специфических особенностей компиляторов и т. п.;
- выполняются на различном числе вычислительных устройств, допуская использование как слабого, так и сильного масштабирования;
- автоматически формируют физическую постановку задачи и разностную дискретизацию для соответствующего количества MPI-процессов при использовании слабого масштабирования, позволяя выполнять запуск задач с разными требованиями к объему оперативной памяти, количеству вычислительной работы, объему межпроцессорных обменов, времени выполнения;
- выдают характеристики выполнения: параметры задачи, параметры распараллеливания, время выполнения задачи или ее фрагментов, результат оценки производительности, верификационный параметр;
- сопровождаются подробной информацией, содержащей, помимо назначения и класса решаемых задач, описания математической модели, методов решения, алгоритмов распараллеливания, методики тестирования, а также других особенностей программы, знание которых необходимо для проведения тестирования.

### Краткое описание МПТ

**Тест TDU.** Тестовая программа TDU создана на основе программы КОПАТ-3D и служит для решения трехмерной задачи диффузии нейтронов в многогрупповом приближении [11, 14, 15].

Стационарная задача поиска  $K_{\text{эф}}$  описывается следующей системой групповых уравнений [14]:

$$\begin{aligned} -\nabla(D_i \nabla U_i) + \alpha_i U_i &= \sum_{j=1}^{N_i} \beta_{ij}^s U_j + \frac{1}{K_{\text{эф}}} \sum_{j=1}^{N_i} \beta_{ij}^f U_j, \\ \nabla(D_i \nabla U_i) &= \frac{\partial}{\partial x} D_i \frac{\partial U_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_i \frac{\partial U_i}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D_i \frac{\partial U_i}{\partial z}, \quad i = \overline{1, N_i}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $N_i$  — число нейтронных групп;  $x, y, z$  — координаты;  $D_i(x, y, z)$  — коэффициент диффузии в группе  $i$ ;  $\alpha_i(x, y, z)$  — полное нейтронное сечение в группе  $i$ ;  $\beta_{ij}^s(x, y, z)$  — коэффициенты матрицы перехода нейтронов в группу  $i$  из группы  $j$  в результате рассеяния;  $\beta_{ij}^f(x, y, z)$  — коэффициенты матрицы рождения нейтронов в группе  $i$  в результате деления на группе  $j$ .

Искомыми величинами являются:  $U_i(x, y, z)$  — функция плотности нейтронного потока;  $K_{\text{эф}}$  — эффективный коэффициент размножения нейтронов.

Граничные условия для уравнений (2) задаются в виде комбинации искомой функции и ее градиента:

$$D_i \nabla U_i + \tilde{\alpha}_i U_i = \tilde{f}_i, \quad i = \overline{1, N_i}, \quad (3)$$

где  $\tilde{\alpha}_i(x, y, z)$ ,  $\tilde{f}_i(x, y, z)$  — заданные коэффициенты.

Для аппроксимации трехмерная область решения задач (2), (3) разбивается плоскостями, перпендикулярными третьему пространственному направлению, на слои. В тестовом варианте сетка состоит из прямых призм, в основаниях которых лежат прямоугольники.

Для пространственной аппроксимации уравнения диффузии используется линейная схема [14, 16], основанная на комбинации метода конечных элементов, метода конечных разностей и интерполяционно-инвариантной схемы.

При решении стационарной задачи (2) поиска критического параметра  $K_{\text{эф}}$  используется специальный итерационный метод поиска максимального собственного значения. Он основан на методе итераций по источнику деления с введением компенсирующих источников в левую и правую части уравнений для ускорения сходимости итераций. Итерационный процесс записывается в виде (зависимость от пространственных переменных опущена)

$$\nabla(D_i \nabla U_i^{\nu+1}) + \left( \alpha_i - \frac{\bar{\beta}_i}{K_{\text{эф}}^\nu} \right) U_i^{\nu+1} = \sum_{j=1}^{N_i} \beta_{ij}^s U_j^{\nu+1} + \frac{1}{k^\nu} \sum_{j=1}^{N_i} \beta_{ij}^f U_j^\nu - \frac{\bar{\beta}_i}{K_{\text{эф}}^\nu} U_i^\nu, \quad i = \overline{1, N_i}.$$

Здесь  $\nu$  — номер итерации по  $K_{\text{эф}}$ ;  $K_{\text{эф}}^\nu$  — значение  $K_{\text{эф}}$  на  $\nu$ -й итерации;  $\bar{\beta}_i$  — компенсирующие источники, зависят в каждой точке от нейтронных констант и значений числа Куранта.

Значение параметра  $K_{\text{эф}}$  на новой итерации определяется из уравнения баланса для предыдущего уравнения:

$$K_{\text{эф}}^{\nu+1} = K_{\text{эф}}^\nu \frac{\sum_{p=1}^{N_p} \sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} (\beta_{ij}^f U_j^{\nu+1})}{\sum_{p=1}^{N_p} \sum_{i=1}^{N_i} \left( \sum_{j=1}^{N_i} \beta_{ij}^f U_j^\nu + \bar{\beta}_i (U_i^{\nu+1} - U_i^\nu) \right)},$$

где  $p$  — номер счетной точки;  $N_p$  — число счетных точек.

На каждой итерации по  $K_{\text{эф}}$  система многогрупповых уравнений решается специальным итерационным методом РПГ [15].

В программе TDU при организации распараллеливания информация по процессорам распределяется с использованием принципа пространственной декомпозиции области решения на подобласти, которые формируются путем объединения нескольких интервалов по переменной  $z$ .

Численное решение системы разностных уравнений в параллельном режиме основано на использовании метода раздельного счета по подобластям с введением дополнительного итерационного процесса по внутренним граничным условиям специального вида [16, 17], которыми обмениваются процессы. При этом обмены внутренними граничными условиями происходят только между соседними с точки зрения геометрического соседства подобластей MPI-процессами.

Подробнее организация итерационного процесса с использованием распараллеливания (начиная от внутренних итераций к внешним) выглядит следующим образом [16]:

1. *Внутренние итерации без обменов.* Неявная система сеточных уравнений с заданной правой частью для одной группы решается в каждой подобласти своим процессом итерационным методом сопряженных градиентов с использованием неполного разложения Холецкого.
2. *Итерации по внутренним граничным условиям.* Для каждой подобласти соответствующим процессом параллельно с процессами для других подобластей выполняется итерация по правой части. После этого от каждого процесса к соседним передаются внутренние граничные условия (два двумерных массива), представляющие собой комбинацию значений искомой функции ( $U$ ) и полного потока  $\left(W = D \frac{dU}{dz}\right)$  в точках внутренней границы с коэффициентами специального вида, обеспечивающими безусловную сходимость итерационного процесса.
3. *Внешние итерации по  $K_{эф}$ .* От всех процессов одному головному процессу передается несколько чисел, а затем после выполнения небольших вычислений выполняется пересылка одного числа от головного процесса всем остальным.

При проведении тестирования в качестве тестовой используется задача вычисления критического параметра  $K_{эф}$  для полячейки ядерного реактора типа РВМК.

**Тест GD2.** В программе моделируется движение сплошной среды. Для этого решается система уравнений газовой динамики в трехмерной пространственной области [18].

Движение среды описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div} \vec{U}; \quad \frac{d\vec{U}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p; \quad \frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{p}{\rho} \operatorname{div} \vec{U}, \quad (4)$$

где  $\rho$  — плотность;  $\vec{U}$  — массовая скорость;  $p$  — давление;  $\varepsilon$  — удельная внутренняя энергия. Эти функции являются искомыми.

Система (4) замыкается уравнением состояния среды.

Для аппроксимации дифференциальных уравнений (4) трехмерная область решения задачи разбивается регулярной косоугольной (в общем случае) сеткой на ячейки. Построение сетки по третьему пространственному направлению в криволинейном случае происходит *по листам*. В общем случае трехмерные ячейки представляют собой криволинейные шестигранники. При расчете используется лагранжево-эйлеров подход, т. е. в начале каждого временного шага движение среды рассчитывается в лагранжевых координатах, затем по второму и третьему пространственным направлениям производится восстановление исходной сетки с соответствующим пересчетом конвективных членов.

Для аппроксимации системы уравнений (4) используется неявная схема в сочетании с методом расщепления по пространственным направлениям. Сеточные значения искомых скалярных величин берутся в центрах расчетных ячеек, а значения скорости — в центрах граней ячеек.

Используемый метод аппроксимации приводит вдоль каждого пространственного направления на каждом временном шаге к последовательности конечно-разностных уравнений для полного давления вида

$$A\bar{u}^{n+1} = B\bar{u}^n, \quad (5)$$

где  $\bar{u}$  — искомая сеточная функция (полное давление в ячейке),  $A$  — трехдиагональная матрица.

Решение системы уравнений (5) с трехдиагональной матрицей осуществляется с помощью метода прогонки.

В программе GD2 реализован подход к организации параллельных вычислений с использованием декомпозиции трехмерной матрицы данных на подматрицы [19]. Для декомпозиции данных по процессам используется разбиение расчетной сетки вдоль двух пространственных направлений.

Поскольку численное решение системы разностных уравнений (с трехдиагональной матрицей) производится методом прогонки, то для выполнения прогонок вдоль линейки процессов используется параллельно-конвейерный метод.

Основная идея алгоритма состоит в том, что каждый процесс, рассчитав прогоночные коэффициенты для  $i$ -го канала и передав их следующему в линейке процессу, переходит к обработке других каналов. По мере прихода обратной прогонки процесс прерывает работу по расчету прямой прогонки (если она еще не закончилась) и вычисляет решение для  $i$ -го канала. При этом обмены внутренними граничными условиями происходят только между соседними в решетке МРІ-процессами (они являются соседними и с точки зрения геометрического соседства подобластей).

В качестве тестовой рассчитывается задача о разлете газового эллипсоида в вакуум. Постановка задачи следующая: в трехосном эллипсоиде с полуосями  $a_x, a_y, a_z$ , заполненном газом с показателем адиабаты  $\gamma = 1,4$ , задано начальное распределение плотности и удельной внутренней энергии:

$$\rho(x, y, z, 0) = (1 - \nu)^{1/\gamma-1}; \quad \varepsilon(x, y, z, 0) = \frac{1 - \nu}{\gamma - 1}, \quad \text{где } \nu(x, y, z) = \left(\frac{x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{y}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{z}{a_z}\right)^2,$$

т. е. плотность и удельная внутренняя энергия постоянны вдоль слоев, получаемых при равномерном разбиении эллипсоида по радиусу от его центра к внешней границе.

На границе эллипсоида поддерживается постоянное давление  $P(x, y, z, t) = 0, t \geq 0$ .

При тестировании возможно задание трех разных уравнений состояний, моделирующих различную вычислительную нагрузку.

**Тест ПАУК.** По тестовой программе ПАУК выполняется решение трехмерного уравнения переноса в кинетическом приближении, записанного в декартовой системе координат, на ортогональных пространственных сетках [20].

Рассматривается стационарное одногрупповое уравнение переноса в кинетическом приближении в декартовой системе координат

$$\sqrt{1 - \mu^2} \left( \cos \varphi \frac{\partial N}{\partial x} + \sin \varphi \frac{\partial N}{\partial y} \right) + \mu \frac{\partial N}{\partial z} + \alpha N = \frac{1}{4\pi} \left( \beta n^{(0)} + Q \right), \quad (6)$$

где  $\alpha$  — коэффициент столкновения;  $\beta$  — коэффициент размножения частиц;  $Q$  — независимый источник частиц;  $N$  — плотность потока частиц, летящих в направлении  $\vec{\Omega}$  (для определенности скорость частиц  $v = 1$ );  $\vec{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$  — единичный вектор направления полета частиц;  $\Omega_x = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi$  — проекция вектора на ось  $Ox$ ;  $\Omega_y = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi$  — проекция вектора на ось  $Oy$ ;  $\Omega_z = \mu$  — проекция вектора на ось  $Oz$  (косинус угла между вектором  $\vec{\Omega}$  и осью  $\vec{z}$ );  $\varphi$  — угол между проекцией  $\vec{\Omega}$  на плоскость  $Oxy$  и осью  $Ox$ ;  $n^{(0)} = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} N d\varphi$ .

Уравнение (6) решается в области  $d = \{(x, y, z) \in L, -1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ .

На внешней поверхности задаются граничные условия в виде потока частиц, входящих в тело при  $\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0$ , где  $\vec{n}$  — внешняя нормаль к поверхности, ограничивающей область  $L$ .

Конечно-разностная аппроксимация уравнения (6) выполняется для пространственной сетки, состоящей из прямоугольных параллелепипедов. Уравнение баланса в счетной ячейке в конечно-разностной форме получается с помощью интегро-интерполяционного метода:

$$\operatorname{div}_h \left( \vec{\Omega} N \right) \equiv \Omega_x S_{yz} (N_2 - N_1) + \Omega_y S_{xz} (N_4 - N_3) + \Omega_z S_{xy} (N_6 - N_5) + V \alpha N_0 = V \bar{F}, \quad (7)$$

где  $N_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 6$ ) — средние значения искомой функции  $N$  на гранях ячейки;  $N_0$  — значение функции  $N$  в центре ячейки;  $S_{yz}, S_{xz}, S_{xy}$  — площади граней ячейки;  $V$  — объем ячейки;  $\bar{F} = \frac{1}{4\pi} (\beta \bar{n}^{(0)} + Q)$ .

Скалярный поток в каждой счетной ячейке вычисляется следующим образом:

$$\bar{n}^{(0)} = \sum_{w=1}^{N_w} N_0^w d\Omega_w, \quad \sum_{w=1}^{N_w} d\Omega_w = 4\pi,$$

где  $w$  — номер направления полета частиц;  $N_w$  — число направлений полета частиц;  $d\Omega_w$  — телесный угол.

Для замыкания системы сеточных уравнений по пространственным переменным используется DD-схема:

$$N_0 = \frac{N_1 + N_2}{2} = \frac{N_3 + N_4}{2} = \frac{N_5 + N_6}{2}. \quad (8)$$

Система (7), (8) решается итерациями по источнику:

$$\operatorname{div}_h \left( \vec{\Omega} N^{s+1} \right) + V \alpha N_0^{s+1} = V \bar{F}^s,$$

где  $s$  — номер итерации.

Численное решение системы сеточных уравнений осуществляется с помощью алгоритма бегущего счета. Это алгоритм разрешения ячеек пространственной сетки в определенной последовательности, которая зависит от освещенности граней ячеек. Полный телесный угол ( $4\pi$ ) можно разделить на восемь октантов по вариантам освещенности граней ячеек. Алгоритм бегущего счета — одинаковый для всех направлений из одного октанта, разный для любых направлений из разных октантов.

В тестовой программе ПАУК с помощью средств стандарта MPI реализована версия КВА-алгоритма распараллеливания [21]. Это безытерационный алгоритм распараллеливания конвейерного типа, который основан на принципе геометрической декомпозиции. Геометрия задачи регулярным образом разбивается по трем пространственным направлениям на одинаковые геометрические фрагменты, или подобласти. Декомпозиция осуществляется без перехлестов. Одному MPI-процессу соответствует один геометрический фрагмент. Всего получается  $P_x \times P_y \times P_z$  подобластей, где  $P_x$ ,  $P_y$ ,  $P_z$  — параметры разбиения в каждом из пространственных направлений.

Для одного направления полета частиц организуется сквозной бегущий счет по геометрическим фрагментам. Термин *сквозной* здесь означает, что решение сеточных уравнений в каждом фрагменте выполняется со входящими граничными условиями, которые получены на текущей итерации по правой части. Использование такого типа граничных условий требует передачи данных между фрагментами непосредственно в процессе сквозного или параллельного бегущего счета. Этот алгоритм можно представить в виде ациклического орграфа, в котором вершинам соответствуют геометрические фрагменты, а дугам — передача данных по направлениям, определенным освещенностью граней ячеек. Время выполнения сквозного бегущего счета определяется максимальной длиной пути в орграфе от источника до стока, равной  $1 + (P_x - 1) + (P_y - 1) + (P_z - 1)$ . Вершины в орграфе с одинаковой максимальной длиной пути от источника можно рассчитать одновременно, что приводит к свойству волнового (*wavefront*) параллелизма КВА-алгоритма.

Орграф параллельного бегущего счета одинаков для всех направлений полета частиц в одном октанте. Последовательный расчет таких направлений приводит к организации параллельного конвейера. Время выполнения одного конвейера составляет  $N_w/8 + (P_x - 1) + (P_y - 1) + (P_z - 1)$ . В тестовой программе ПАУК реализован вариант КВА-алгоритма с последовательным стартом параллельных конвейеров. Учет расстояний между источниками разных орграфов приводит к следующей формуле для оценки времени исполнения всех восьми конвейеров на одной итерации по правой части:  $N_w + 5(P_x - 1) + 4(P_y - 1) + 2(P_z - 1)$ . Теоретическая эффективность распараллеливания рассчитывается по формуле

$$E_{\max} = \frac{N_w}{N_w + 5(P_x - 1) + 4(P_y - 1) + 2(P_z - 1)} \cdot 100 \%$$

Для повышения значения теоретической эффективности распараллеливания в тестовой программе ПАУК реализован характерный прием уменьшения гранулярности алгоритма. Передача данных между фрагментами осуществляется после расчета порции, а не всех слоев пространственной сетки в фрагменте. Размер порции слоев (гранулярность) можно регулировать. Дополнительное разбиение множества слоев в фрагменте на  $k$  порций приводит к организации дополнительного вложенного конвейера, который имеет смысл только для первых двух пространственных направлений [21].

Формула для теоретической эффективности распараллеливания в случае дополнительной конвейеризации по порциям слоев имеет вид

$$E_{\max} = \frac{N_w k}{N_w k + 5(P_x - 1) + 4(P_y - 1) + 2k(P_z - 1)} \cdot 100\%.$$

В качестве тестовой задачи используется область в форме прямоугольного параллелепипеда с определенными свойствами среды (параметры  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $Q$ ). Входящий поток равен нулю. При численном решении тестовой задачи используются равномерные сетки по угловым переменным  $\mu$  и  $\varphi$ . Результатом решения служит полное число частиц в системе

$$P = \int_L n^{(0)} dV.$$

**Тест С-95.** Тестовая программа С-95 разработана на основе методики С95 [22]. По ней выполняется решение методом Монте-Карло задач переноса нейтронов в трехмерных областях с использованием как спектральных, так и групповых систем констант.

Рассматривается нестационарное кинетическое уравнение переноса

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)}{\partial t} + V\vec{\omega} \cdot \nabla n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) + V\Sigma(\vec{r}, V)n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) = \\ = \int V'\Sigma(\vec{r}, V')n(t, \vec{r}, \vec{\omega}', V')C(\vec{r}; \vec{\omega}', V' \rightarrow \vec{\omega}, V)d\vec{\omega}'dV' + n_0(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V), \end{aligned}$$

где  $t$  — время;  $r$  — радиус-вектор положения частицы;  $n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)$  — плотность частиц, находящихся в момент времени  $t$  в точке пространства с радиусом-вектором  $\vec{r}$  и движущихся в направлении  $\vec{\omega}$  со скоростью  $V$ ;  $\Sigma(\vec{r}, V)$  — полное макроскопическое сечение;  $C(\vec{r}; \vec{\omega}', V' \rightarrow \vec{\omega}, V)$  — плотность распределения вторичных частиц;  $n_0(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)$  — плотность частиц, испущенных независимыми источниками.

Моделирование процессов переноса нейтронов осуществляется в соответствии с выбранной системой констант взаимодействия соответствующих частиц с веществом.

Для розыгрыша свободного пробега и выбора вещества, на котором происходит столкновение, используется схема максимальных кусочно-постоянных сечений.

Для распараллеливания решения нестационарных задач линейного переноса используется алгоритм асинхронного счета пакетов траекторий [23].

В программе С-95 при моделировании используется линейный конгруэнтный генератор случайных чисел с периодом  $\approx 10^{16}$ . Для обеспечения независимости траекторий моделирование частиц осуществляется на непересекающихся подпоследовательностях случайных величин. Поэтому в начале счета каждый процессор, кроме загрузки начальных данных задачи, получает и начальное случайное число, с которого он начинает моделирование. Получение этого случайного числа обеспечивается сдвигом по генератору на цепочку из  $10^{12}$  случайных чисел. Длина подпоследовательности, равная  $10^{12}$ , позволяет моделировать одному процессу около  $10^9$  траекторий (в среднем по 100 столкновений на траекторию и по 10 чисел на одно столкновение), что обеспечивает достаточный временной запас даже при существенном увеличении производительности вычислительных узлов ВВС.

Идея алгоритма асинхронного счета пакетов заключается в том, что все MPI-процессы в течение определенного одинакового промежутка календарного времени (по умолчанию он равен 1 мин) независимо друг от друга моделируют траектории частиц. После этого нулевой процесс выполняет сбор от всех процессов числа рассчитанных пакетов траекторий и процессорного времени, за которое этот расчет произведен. Затем проверяется условие окончания счета (по времени или числу заказанных пакетов). Если условие окончания счета не выполнено, продолжается моделирование в течение следующего промежутка времени, иначе счет заканчивается. Через более длинные промежутки времени (10 мин) происходят суммирование результатов расчетов и сохранение промежуточных результатов. Данный алгоритм не обеспечивает полной повторяемости расчетов, но результаты идентичны в пределах их статистических погрешностей.



Для тестирования используются две задачи на расчет критического параметра.

Первая задача Т1 имитирует перенос нейтронов в коре реактора. Геометрия задачи представляет собой сферу радиусом 2 м, в которой задан гомогенный состав, включающий 38 изотопов. В центре сферы задан изотропный источник нейтронов.

Вторая задача Т2 моделирует распространение тепловых нейтронов в борированной воде. Геометрия задачи — это сферическая *слойка*, во всех слоях которой задан один и тот же изотопный состав. В центре сфер также задан изотропный источник нейтронов.

Тестирование проводится в режиме слабого масштабирования. Оценивается количество пакетов траекторий нейтронов, рассчитываемых за одинаковое календарное время каждым процессом.

В отличие от остальных тестовых программ коэффициент ускорения вычисляется по следующей формуле:  $Sp_n = K_{\text{рас}}^n / K_{\text{рас}}^1$ , где  $K_{\text{рас}}^n$  — число пакетов траекторий, рассчитанных  $n$  процессами;  $K_{\text{рас}}^1$  — число пакетов траекторий, рассчитанных одним процессом.

Эффективность распараллеливания определяется по формуле (1).

**Тест MD.** По тестовой программе MD выполняется решение уравнений классической динамики Гамильтона больших ансамблей микрочастиц, находящихся в потенциальном поле сил межчастичного взаимодействия [24].

Движение частиц, взаимодействующих друг с другом, описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}_i}{dt} &= \vec{v}_i, \\ m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} &= \vec{F}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\vec{r}_i$ ,  $\vec{v}_i$ ,  $m_i$  — координаты, скорость и масса  $i$ -й частицы соответственно;  $\vec{F}_i$  — сила, действующая на частицу с номером  $i$ ;  $t$  — время.

Наиболее трудоемкой частью при решении системы уравнений (9) является перебор пар взаимодействующих частиц. Для локализации зоны поиска в программе используется сеточный подход. Каждая ячейка представляет собой параллелепипед с ребрами, близкими к радиусу обрезания потенциала.

Для аппроксимации системы уравнений (9) используется явная двухслойная разностная схема Верле:

$$\begin{aligned} v^{n+1} &= v^n + \tau F(r)^n, \\ r^{n+1} &= r^n + \tau v^{n+1}. \end{aligned} \quad (10)$$

Для решения системы (10) сначала рассчитываются силы, действующие на частицы, затем вычисляются скорости и координаты частиц.

В программе MD при организации распараллеливания используется разбиение по пространству [24, 25]. Каждому MPI-процессу назначается фиксированная пространственная область в форме параллелепипеда. Каждый параллелепипед разбивается на ячейки, при этом происходит наложение слоев ячеек на границе между областями, рассчитываемыми разными процессами. Эти слои ячеек используются при обмене информацией между процессами. Далее атомы расставляются в ячейки в соответствии с заданной кристаллической решеткой. На каждом временном шаге каждый процесс вычисляет силы и обновляет координаты и скорости для всех атомов из своего параллелепипеда. Если атомы покидают этот параллелепипед, они переназначаются другому процессу. Для более быстрого поиска атомов, которые взаимодействуют друг с другом, используются связанные списки — цепочки атомов.

В качестве тестовой задачи рассматривается релаксация образца меди при нулевой температуре. Тип граничных условий — *свободная поверхность*. Потенциал парных взаимодействий — потенциал Морзе [24, 25].

**Тест ЭГИДА-ТЕСТ.** Тестовая программа ЭГИДА-ТЕСТ предназначена для тестирования производительности ВВС при решении задач газовой динамики и теплопроводности. Программа раз-

работана на основе методики моделирования течений многокомпонентной среды с большими деформациями [26, 27].

При аппроксимации по пространству используется матричная шестигранная неподвижная счетная сетка. В расчетной области может быть несколько компонентов (веществ) с различными уравнениями состояний. При этом границы разделов веществ могут не совпадать с линиями счетной сетки. Используется односкоростная модель многокомпонентной среды, каждый компонент которой выделяется полным набором термодинамических параметров. Скорость  $\vec{u}$  определена в узлах счетной сетки, скалярные величины  $\rho_i, e_i, P_i, P, \beta_i = V_i/V$  — в центрах ячеек. Здесь  $\rho$  — плотность;  $e$  — удельная внутренняя энергия;  $P$  — давление;  $V$  — объем;  $\beta$  — объемная концентрация;  $i = 1, \dots, J$  — номер компонента.

Исходная система дифференциальных уравнений многокомпонентной газовой динамики имеет следующий вид:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \text{grad}(P + q); \quad (11)$$

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \text{div}\vec{u}_i; \quad (12)$$

$$\frac{d\beta_i}{dt} = \beta_i(\text{div}\vec{u}_i - \text{div}\vec{u}); \quad (13)$$

$$\frac{de_i}{dt} = -\frac{P_i + q_i}{\rho_i} \text{div}\vec{u}_i, \quad (14)$$

где  $q$  и  $q_i$  — счетные вязкости;  $i = 1, \dots, J$ .

Система (11)–(14) замыкается уравнениями состояний компонентов среды

$$P_i = P_i(\rho_i, e_i). \quad (15)$$

Аппроксимация системы (11)–(15) выполняется с привлечением метода расщепления в два этапа. На первом (лагранжевом) этапе решаются уравнения (11)–(15) без конвективных членов, т. е. уравнения газовой динамики в лагранжевых переменных. На втором (эйлеровом) этапе сетка возвращается в исходное состояние и осуществляется пересчет величин на эту сетку, т. е. аппроксимация отброшенных на первом этапе членов уравнений (11)–(14). При этом в качестве начальных данных используются значения величин, полученные на первом этапе вычислений.

Для моделирования процесса теплопроводности рассматривается уравнение изотропной квазилинейной диффузии без источников в односвязной области  $\Omega$ , которое в трехмерном случае имеет вид

$$Q \frac{\partial E(\mathbf{x}, U)}{\partial t} = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D(\mathbf{x}, U) \frac{\partial U}{\partial x_i} \right), \quad t > 0, \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega.$$

Здесь  $U$  — искомая функция (температура);  $D(\mathbf{x}, U)$  — коэффициент диффузии;  $Q(x)$  — плотность газа.

В начальный момент времени задано распределение температуры

$$U(t, \mathbf{x})|_{t=t_0} = U_0(\mathbf{x}).$$

На границе  $\Gamma = \partial\Omega$  области  $\Omega$  задано граничное условие одного из трех типов (в общем случае):

- 1)  $U(t, \mathbf{x})|_{\Gamma_1} = \varphi(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_1;$
- 2)  $\sum_{i=1}^3 W_i(t, \mathbf{x}) n_i(\mathbf{x}) \Big|_{\Gamma_2} = -\nu(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_2;$
- 3)  $\left( \sum_{i=1}^3 W_i(t, \mathbf{x}) n_i(x) + \alpha(t, \mathbf{x}) U(t, \mathbf{x}) \right) \Big|_{\Gamma_3} = \psi(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_3,$

где  $n$  — внешняя нормаль к границе в точке  $\mathbf{x}$ ;  $\alpha > 0$ ,  $\varphi$ ,  $\nu$ ,  $\psi$  — заданные на части границы  $\Gamma_i$  функции;  $\mathbf{W} = (W_1, W_2, W_3)$  — вектор потока.

Численный алгоритм состоит из двух этапов. На первом этапе схема расщепления по потокам применяется с коэффициентами теплопроводности, которые вычисляются по начальной температуре  $U^n|_{t=t^n}$ . После первого этапа находится приближенное значение новой температуры в ячейках  $U^{n+1}|_{t=t^{n+1}}$ . По этой температуре находятся новые коэффициенты теплопроводности, и затем выполняется второй этап.

На втором этапе проводятся итерации типа Ньютона по нелинейной зависимости энергии от температуры до сходимости или исчерпания максимального числа итераций. На каждой итерации второго этапа также применяется схема расщепления потоков по направлениям. Расщепление потоков по направлениям выполняется в три полушага:

- 1) потоки находятся из предположения, что боковые потоки (потоки других направлений) равны нулю. Трехточечные системы уравнений решаются методом прогонки, обычной или встречной;
- 2) потоки  $W_x$ ,  $W_y$  и  $W_z$  находятся из предположения, что боковые потоки (потоки других направлений) уже известны; при этом используются потоки, найденные на первом полушаге. Трехточечные системы уравнений также решаются методом прогонки;
- 3) выполняется вычисление новой энергии с помощью уравнения баланса; при этом используются потоки, найденные на втором полушаге.

Для подготовки следующих итераций по новой энергии  $E^{n+1(\nu)}$  с помощью уравнений состояний веществ находятся новая температура  $U^{n+1(\nu)}$  и теплоемкость  $C_{V_i}^{n+1(\nu)}$  ( $\nu$  — номер итерации).

Распараллеливание в программе ЭГИДА-ТЕСТ основано на следующих положениях:

- трехмерная пространственная декомпозиция. Каждый MPI-процесс рассчитывает одну подобласть. Число ячеек во всех подобластях одинаковое;
- обмен каждого процесса только со своими соседями по топологии. Максимально возможное число соседей равно 26.

При распараллеливании газовой динамики с использованием явной схемы каждым процессом рассматриваются и выполняются следующие события (в порядке приоритета):

- проверка наличия и начало приема сообщения от другого процесса;
- проверка завершения приема сообщения от другого процесса;
- счет точек на границе подобласти;
- начало передачи сообщения другому процессу;
- проверка завершения передачи сообщения другому процессу;
- счет точек внутри подобласти;
- ожидание завершения работы остальных процессов.

Распараллеливание теплопроводности основано на реализации асинхронных параллельно-конвейерных алгоритмов, в которой при отсутствии последовательных вычислений свободные MPI-процессы вычисляют коэффициенты разностных уравнений "про запас". Это позволяет существенно улучшить производительность.

Алгоритм реализует схему приоритетной обработки асинхронных событий. Каждым процессом рассматриваются и выполняются следующие события (в порядке приоритета):

- приход сообщения;
- готовность сообщения для передачи;
- счет обратной прогонки для подобласти данного процесса;
- счет прямой прогонки;
- счет коэффициентов разностных уравнений для прогонки, уже пришедшей данному процессу;
- счет коэффициентов разностных уравнений про запас.

Для тестирования используются следующие задачи: для газовой динамики — седовский (точечный) взрыв в идеальном газе, для теплопроводности — распространение плоской тепловой волны.

## Заключение

Статья посвящена вопросам тестирования ВВС, ориентированных на численное моделирование сложных физических процессов. Приводится обзор МПТ (miniapps в англоязычной терминологии), разработанных в РФЯЦ-ВНИИЭФ и предназначенных для оценки эффективности распараллеливания, реальной производительности и правильности выполнения вычислений ВВС.

Пакет МПТ постоянно развивается и пополняется. Проводится адаптация программ к современным аппаратно-программным платформам.

В заключение отметим, что за годы использования рассмотренные тестовые программы зарекомендовали себя в качестве удобного и необходимого инструмента для оценки параметров ВВС в процессе их разработки, развития и приема в эксплуатацию.

## Список литературы

1. Stream. [http://reality.sgi.com/employees/mccalpin\\_asd](http://reality.sgi.com/employees/mccalpin_asd).
2. IOR. <https://github.com/VI4IO/io-500-dev>.
3. b\_eff. [www.hlrs.de/mpi/b\\_eff](http://www.hlrs.de/mpi/b_eff).
4. HPCG. [www.hpcg-benchmark.org](http://www.hpcg-benchmark.org).
5. HPL. [www.netlib.org/benchmark/hpl](http://www.netlib.org/benchmark/hpl).
6. ГОСТ Р 5770.18-2019. Высокопроизводительные вычислительные системы. Требования к тестовым программам приемочных испытаний.  
GOST R 5770.18-2019. Vysokoproizvoditelnye vychislitelnye sistemy. Trebovaniya k testovym programmam priemochnykh ispytaniy.
7. NPВ. <http://www.nas.nasa.gov/Software/NPB/>.
8. Mantevo. <http://software.sandia.gov/mantevo>.
9. Exascale Proxy Applications. <http://www.nas.nasa.gov/Software/NPB/>.
10. Гордиенко А. В., Гусев В. А., Лякишев А. М., Степаненко С. А., Холостов А. А. Мультипроцессорные вычислительные системы МП-Х-У // Вопросы систематического моделирования, вычислительной математики и информатики: Сб. науч. трудов. Москва, Арзамас-16, 1994. С. 101–103.  
*Gordienko A. V., Gusev V. A., Lyakishev A. M., Stepanenko S. S., Kholostov A. A. Multiprocessornye vychislitelnye sistemy MP-X-Y // Voprosy sistematicheskogo modelirovaniya, vychislitelnoy matematiki i informatiki. Sb. nauch. trudov. Moskva, Arzamas-16, 1994. S. 101–103.*
11. Алексеев А. В., Софронов И. Д., Федотова Л. П., Шагалиев Р. М. Численные исследования алгоритмов распараллеливания трехмерных задач диффузии и переноса нейтронов в комплексе САТУРН на многопроцессорных ЭВМ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1996. Вып. 4. С. 16–23.  
*Alekseev A. V., Sofronov I. D., Fedotova L. P., Shagaliev R. M. Chislennyye issledovaniya algoritmov rasparallelivaniya trekhmernykh zadach diffuzii i perenosa neytronov v komplekse SATURN na mnogoprotsessornykh EVM // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovaniye fizicheskikh protsessov. 1996. Vyp. 4. S. 16–23.*
12. Alexeyev A. V., Zvenigorodskaya O. A., Shagaliev R. M., Taiwo T. A. Performance Assessment of KORAT-3D on the ANL IBM-SP computer // Trans. Am. Nucl. Soc. 1999. Vol. 80. P. 250.
13. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бутнев О. И., Быков А. Н., Веселов Р. А., Воронин Б. Л., Ганчук Н. С., Делов В. И., Ерофеев А. М., Пронин В. А., Рудько Н. М., Селезнев А. А., Скрытнич С. И. Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 1. С. 3–13.

- Aleynikov A. Yu., Barabanov R. A., Butnev O. I., Bykov A. N., Veselov R. A., Voronin B. L., Ganchuk N. S., Delov V. I., Erofeev A. M., Pronin V. A., Rudko N. M., Seleznev A. A., Skrypnik S. I.* Programma MDP-SOVTs resheniya zadach molekulyarnoy dinamiki na paralelnykh EVM s raspredelennoy pamyatyu // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2001. Vyp. 1. S. 3–13.
14. *Федотова Л. П., Шагалиев Р. М.* Математическая методика KORAT-3D численного решения трехмерных групповых задач диффузии нейтронов на регулярных и нерегулярных пространственных сетках // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 1994. Вып. 4. С. 3–10.  
*Fedotova L. P., Shagaliev R. M.* Matematicheskaya metodika KORAT-3D chislenного resheniya trekhmernykh gruppovykh zadach diffuzii neytronov na regulyarnykh i neregulyarnykh prostranstvennykh setkakh // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 1994. Vyp. 4. S. 3–10.
15. *Федотова Л. П., Шагалиев Р. М.* Итерационный по правой части метод для решения системы групповых сеточных уравнений многомерной нестационарной диффузии // Там же. 1995. Вып. 1–2. С. 87–90.  
*Fedotova L. P., Shagaliev R. M.* Iteratsionnyy po pravoy chasti metod dlya resheniya sistemy gruppovykh setochnykh uravneniy mnogomernoy nestatsionarnoy diffuzii // Там же. 1995. Vyp. 1–2. S. 87–90.
16. *Zvenigorodskaya O. A., Shagaliev R. M., Shemyakina T. V.* An improved accuracy order approximation for a 3D neutron diffusion equation in KORAT 3D code by a combined scheme of methods of finite elements and finite differences // *Proc. Ann. Meeting Nuc. Tech.* 2000. Bonn, 23–25 May, 2000. P. 55–58.
17. *Алексеев А. В., Звенигородская О. А., Шагалиев Р. М.* Численные исследования алгоритма распараллеливания для моделирования нейтронных процессов в ЯЭУ на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 2000. Вып. 1. С. 21–26.  
*Alekseev A. V., Zvenigorodskaya O. A., Shagaliev R. M.* Chislennyye issledovaniya algoritma rasparrallelivaniya dlya modelirovaniya neytronnykh protsessov v YaEU na mnogoprotsessornykh EVM s raspredelennoy pamyatyu // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov.* 2000. Vyp. 1. S. 21–26.
18. *Софронов И. Д., Воронин Б. Л., Скрыпник С. И., Быков А. Н., Козуб А. Г., Бутнев О. И., Веселов Р. А., Ерофеев А. М., Алексеев А. В., Казарин А. А., Шумилина Н. В., Урм А. В., Шапоренко Е. В., Пронина О. А.* Методика и комплексы РАМЗЭС, РАМЗЭС-КП // Там же. 1999. Вып. 4. С. 27–31.  
*Sofronov I. D., Voronin B. L., Skrypnik S. I., Bykov A. N., Kozub A. G., Butnev O. I., Veselov R. A., Erofeev A. M., Alekseev A. V., Kazarin A. A., Shumilina N. V., Urm A. V., Shaporenko E. V., Pronina O. A.* Metodika i komplekсы RAMZES, RAMZES-KP // Там же. 1999. Vyp. 4. S. 27–31.
19. *Воронин Б. Л., Бутнев О. И., Быков А. Н., Ерофеев А. М., Скрыпник С. И., Софронов И. Д., Нильсен Д.* Методы распараллеливания многомерных задач газовой динамики на сетках блочно-матричного типа // Там же. 2000. Вып. 1. С. 3–7.  
*Voronin B. L., Butnev O. I., Bykov A. N., Erofeev A. M., Skrypnik S. I., Sofronov I. D., Nilsen D.* Metody rasparrallelivaniya mnogomernykh zadach gazovoy dinamiki na setkakh blochno-matrichnogo tipa // Там же. 2000. Vyp. 1. S. 3–7.
20. *Бочков А. И., Нурждин А. А.* Параллельный алгоритм решения трехмерного кинетического уравнения переноса. Программа ПАУК для тестирования многопроцессорных вычислительных систем // *Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2008): Тр. межд. науч. конф. (С.-Пб., 28 января — 1 февраля 2008 г.). Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2008.*  
*Bochkov A. I., Nuzhdin A. A.* Parallelnyy algoritm resheniya trekhmernogo kineticheskogo uravneniya perenosa. Programma PAUK dlya testirovaniya mnogoprotsessornykh vychislitelnykh sistem //

- Parallelnye vychislitelnye tekhnologii (PAVT'2008): Tr. mezhd. nauch. konf. (S.-Pb., 28 yanvarya — 1 fevralya 2008). Chelyabinsk: Izd-vo YuUrGU, 2008.
21. Koch K. R., Baker R. S., Alcouffe R. E. Solution of the first-order form of the 3-D discrete ordinates equation on a massively parallel processor // Trans. Amer. Nuc. Soc. 1992. Vol. 65. P. 198.
  22. Кочубей Ю. К., Житник А. К., Артемьева Е. В., Донской Е. Н., Ельцов В. А., Иванов Н. В., Иванов А. Н., Кибкало А. А., Моренко А. И., Моренко Л. З., Огнев С. П., Ронжин А. Б., Рослов В. И., Семенова Т. В., Субботин А. Н., Трущина Е. Л. Программа С-95. Моделирование совместного переноса нейтронов и  $\gamma$ -квантов методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 2. С. 49—52.  
Kochubey Yu. K., Zhitnik A. K., Artemeva E. V., Donskoy E. N., Eltsov V. A., Ivanov N. V., Ivanov A. N., Kibkalo A. A., Morenko A. I., Morenko L. Z., Ognev S. P., Ronzhin A. B., Roslov V. I., Semenova T. V., Subbotin A. N., Trushchina E. L. Programma S-95. Modelirovanie sovmestnogo perenosa neytronov i gamma-kvantov metodom Monte-Karlo // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2000. Vyp. 2. S. 49—52.
  23. Житник А. К., Огнев С. П., Иванов А. Н. Параллельные алгоритмы для решения методом Монте-Карло задач переноса и задач на собственные значения на многопроцессорных вычислительных комплексах с распределенной памятью // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2002. Вып. 3. С. 76—87.  
Zhitnik A. K., Ognev S. P., Ivanov A. N. Parallelnye algoritmy dlya resheniya metodom Monte-Karlo zadach perenosa i zadach na sobstvennyye znacheniya na mnogoprotsessornykh vychislitelnykh kompleksakh s raspredelennoy pamyatyu // Trudy RFYaTs-VNIIEF. 2002. Vyp. 3. S. 76—87.
  24. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бутнев О. И., Быков А. Н., Веселов Р. А., Воронин Б. Л., Ганчук Н. С., Делов В. И., Ерофеев А. М., Пронин В. А., Рудько Н. М., Селезнев А. А., Скрыпник С. И. Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 1. С. 3—13.  
Aleynikov A. Yu., Barabanov R. A., Butnev O. I., Bykov A. N., Veselov R. A., Voronin B. L., Ganchuk N. S., Delov V. I., Erofeev A. M., Pronin V. A., Rudko N. M., Seleznev A. A., Skrypnik S. I. Programma MDP-SOVTs resheniya zadach molekulyarnoy dinamiki na parallelnykh EVM s raspredelennoy pamyatyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2001. Vyp. 1. S. 3—13.
  25. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987.
  26. Янилкин Ю. В., Тарасов В. И., Стадник А. Л., Базhenov С. В., Башуров В. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А., Быкова Е. А., Гаврилова Е. С., Горев В. В., Дибиров О. А., Иванова Г. Г., Ковалев Н. П., Королькова Т. В., Певная П. И., Софронов В. Н., Торопова Т. А., Шанин А. А. Program system TREK for numerical simulation of 3D multi-component medium flows // Proc. Workshop "New Models and Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media". Oxford, 1997. P. 413—422.
  27. Беляев С. П. Метод мелкозернистого распараллеливания с динамической балансировкой на примере задачи газовой динамики и вычислительные эксперименты на параллельной системе // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 1. С. 45—49.  
Belyaev S. P. Metod melkozernistogo rasparallelivaniya s dinamicheskoy balansirovkoj na primere zadach gazovoy dinamiki i vychislitelnye eksperimenty na parallelnoy sisteme // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2000. Vyp. 1. S. 45—49.

Статья поступила в редакцию 03.12.19.

METHODOLOGICAL APPLICATION TESTS DEVELOPED AT RFNC-VNIIEF FOR NUMERICALLY STUDYING PARAMETERS OF HPC SYSTEMS / A. V. Alekseev, S. P. Belyaev, A. I. Bochkov, A. N. Bykov, M. V. Vetchinnikov, A. N. Zalyalov, A. A. Nuzhdin, S. P. Ognev, N. S. Samsonova, I. S. Sapronov, I. N. Chistyakova, T. V. Shemyakina, R. M. Shagaliev, Yu. V. Yanilkin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region).

The paper considers the issues of testing high-performance computing systems for the numerical simulation of complex physical processes. Methodological application tests (miniapps) developed at RFNC-VNIIEF are reviewed. A test package includes codes for the simulation of various physical processes: neutron transport simulations using difference methods (in kinetic and diffusion approximation) and the Monte Carlo method, gas dynamics, heat transfer, and molecular dynamics processes. These test codes are used to assess the efficiency of paralleling, real performance, and correctness of simulations by high-performance computing systems. The general functionality of test codes, as well as the specific features of algorithms and testing procedures for each code are considered.

*Keywords:* high-performance computing systems, numerical simulation of physical processes, a test program, miniapps, efficiency of paralleling, performance.

---