

Проведенное сравнение основных характеристик различных топологий коммуникационных сетей на базе системы межпроцессорных обменов СМПО-10GA-1, топологии коммуникационной сети «Ангара» и различных топологий коммуникационных сетей на базе архитектуры InfiniBand показало, что КС на архитектуре СМПО-10GA-1 с топологией KNS имеют параметры, сравнимые с параметрами КС на архитектуре InfiniBand с топологией Fat Tree.

Литература

1. Вихарев В. М., Сапронов С. И. Принципы программной организации коммуникационной системы мультипроцессора МП-3 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1997. Вып. 2. С. 79–84.
2. Горбунов В., Елизаров Г., Эйсымонт Л. Экзафлопсные суперкомпьютеры: достижения и перспективы // Открытые системы. 2013. № 7.
3. García P. J., Escudero-Sahuquillo J., Quiles F. J., Duato J. High-Performance Interconnection Networks on the Road to Exascale HPC: Challenges and Solutions // 12th HPC Advisory Council Conference. September, 2013, Barcelona, Spain.
4. Басалов В. Г., Вялухин В. М. Адаптивная система маршрутизации для отечественной системы межпроцессорных обменов СМПО-10G // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 3. С. 64–70.

УНИФИЦИРОВАННАЯ СИСТЕМА «GEOMGRID2» ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПРЕПРОЦЕССИНГА ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

О. В. Беломестных, С. В. Гагарин, Е. А. Приб, А. А. Ушкова

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ технической физики им. Е. И. Забабахина, г. Снежинск

Введение

На протяжении многих лет в РФЯЦ-ВНИИТФ проводятся расчеты задач механики сплошной среды (МСС) при помощи различных методик численного моделирования института. С каждым годом растут требования к скорости и качеству проведения расчетов методиками численного моделирования. Также с увеличением вычислительных мощностей института и повышением сложности задач, рассчитываемых программными комплексами математического моделирования РФЯЦ-ВНИИТФ, остро встал вопрос о повышении эффективности подготовки данных для расчета и необходимости в разработке новых современных средств для более качественного и точного задания геометрии и формирования начальных данных.

В 2010 году в РФЯЦ-ВНИИТФ была начата разработка системы «GeomGrid2» [1] для обеспечения двумерных программных комплексов математического моделирования института всей функциональностью, необходимой для эффективного и качественного расчета начальных данных.

Система «GeomGrid2» обеспечивает функциональностью все звенья технологической цепочки этапа подготовки и расчета начальных данных (РНД). Функциональность системы позволяет: формировать геометрию задачи, осуществлять построение сеток и полей частиц, задавать газодинамические параметры, распределять вещества по ячейкам сеток и формировать начальные файлы-разрезы в различных форматах данных.

Формирование геометрии задачи

Формирование геометрии задачи можно условно разбить на следующие этапы:

- загрузка данных из файлов-разрезов (СДР¹, ЕФР² [2]);
- загрузка данных из САПР «AutoCAD»;
- создание геометрических объектов инструментами системы.

Загрузка данных из файлов-разрезов. Так как в файлах СДР не содержится явно информация о границах областей и физических подобластях, поэтому загрузка данных из файлов СДР осуществляется при помощи алгоритмов, которые формируют данные о границах областей, сеточных линий, линий раздела веществ и изолиний. Алгоритмы восстанавливают информацию на основе данных о сетке, веществах и концентрациях веществ. Загруженные из файлов СДР линии затем используются как конструктивные элементы для формирования блоков и областей новой задачи.

Загрузка данных из САПР «AutoCAD». В системе «GeomGrid2» реализована загрузка данных о геометрии из файлов dwg и dxf, создаваемых в САПР «AutoCAD» [3]. Из файлов dwg и dxf загружаются данные об отрезках, дугах окружностей, точках, окружностях, эллипсах, а также составных кривых.

Данные, загруженные из файлов СДР и САПР «AutoCAD», а также геометрию, созданную при помощи инструментов системы «GeomGrid2», можно объединять в одном окне системы для формирования единой геометрии задачи.

Построение и загрузка расчетных сеток

В системе «GeomGrid2» для создания новых разрезов задач можно использовать как построенную расчетную сетку, так и загруженную целиком либо фрагментом сетку из файлов-разрезов.

Построение расчетных сеток. Для вызова генераторов построения сеток используется технология подключаемых плагинов. Эта технология позволяет использовать для построения сеток как внутренние генераторы разработчиков системы, так и внешние генераторы программных комплексов. В системе «GeomGrid2» в одной задаче можно строить сетку как регулярного, так и нерегулярного типа. Для построения регулярных расчетных сеток в системе «GeomGrid2» разработано 6 генераторов. Для построения нерегулярных расчетных сеток – 3 генератора [4].

Загрузка расчетных сеток. Загрузка расчетных сеток в системе «GeomGrid2» возможна из файлов-разрезов СДР и ЕФР. Для этого разработан инструмент для загрузки как всех сеточных данных целиком, так и фрагмента, путем задания начальных и конечных номеров горизонтальных и вертикальных сеточных линий.

Построение полей частиц

Некоторые комплексы программ математического моделирования РФЯЦ-ВНИИТФ для дискретизации модели задачи используют поля точечных масс – частиц. Для таких комплексов программ в системе «GeomGrid2» реализовано построение полей частиц двумя способами (рис. 1):

- в контурах областей задач без сетки;
- в ячейках сеток областей.

В системе «GeomGrid2» реализовано параллельное построение сеток и частиц. Для этого используется технология распараллеливания на фоновых потоках. Построение сеток и частиц осуществляется для каждой области в отдельном фоновом потоке (рис. 2).

¹СДР – стандартный двумерный разрез (РФЯЦ-ВНИИТФ).

²ЕФР – единый файл разрез (РФЯЦ-ВНИИЭФ).

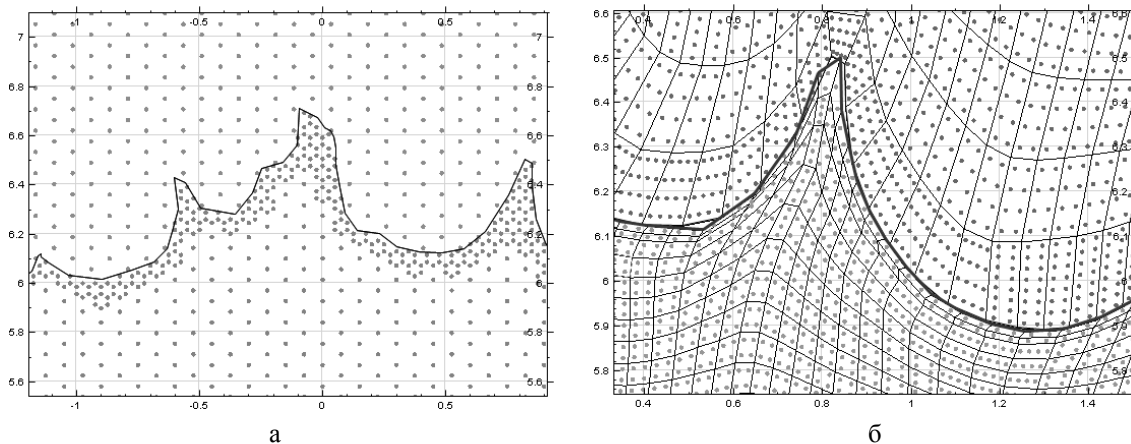


Рис. 1. Способы построения полей частиц в системе «GeomGrid2»: а – в контурах областей без сетки; б – в ячейках сеток областей

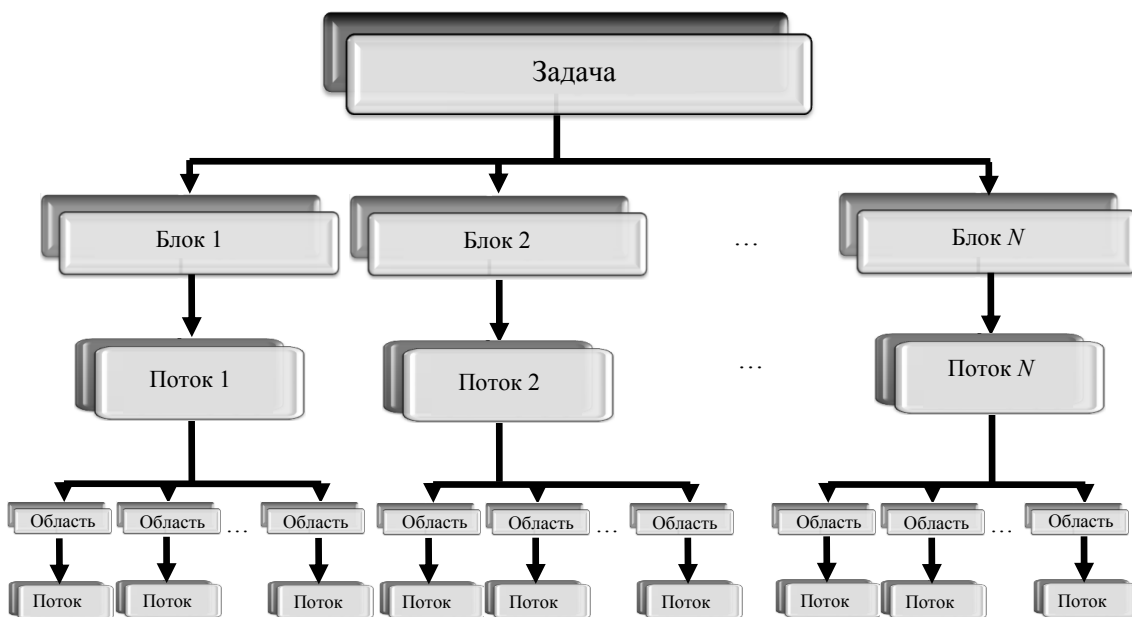


Рис. 2. Схема технологии распараллеливания процесса построения сеток и частиц с использованием фоновых потоков

Задание газодинамических параметров

Задание газодинамических параметров в системе «GeomGrid2» возможно в физических подобластях, на которые делится каждая область. При этом каждой физической подобласти ставится в соответствие только один номер вещества.

В рамках системы «GeomGrid2» реализована геометрическая декомпозиция областей на физические подобласти. Для упрощения декомпозиции области на физические подобласти реализован алгоритм автоматического поиска замкнутых контуров стягивающихся в указанную на графике системы точку (рис. 3).

Затем для каждой физической подобласти задается номер вещества, плотность и другие параметры.

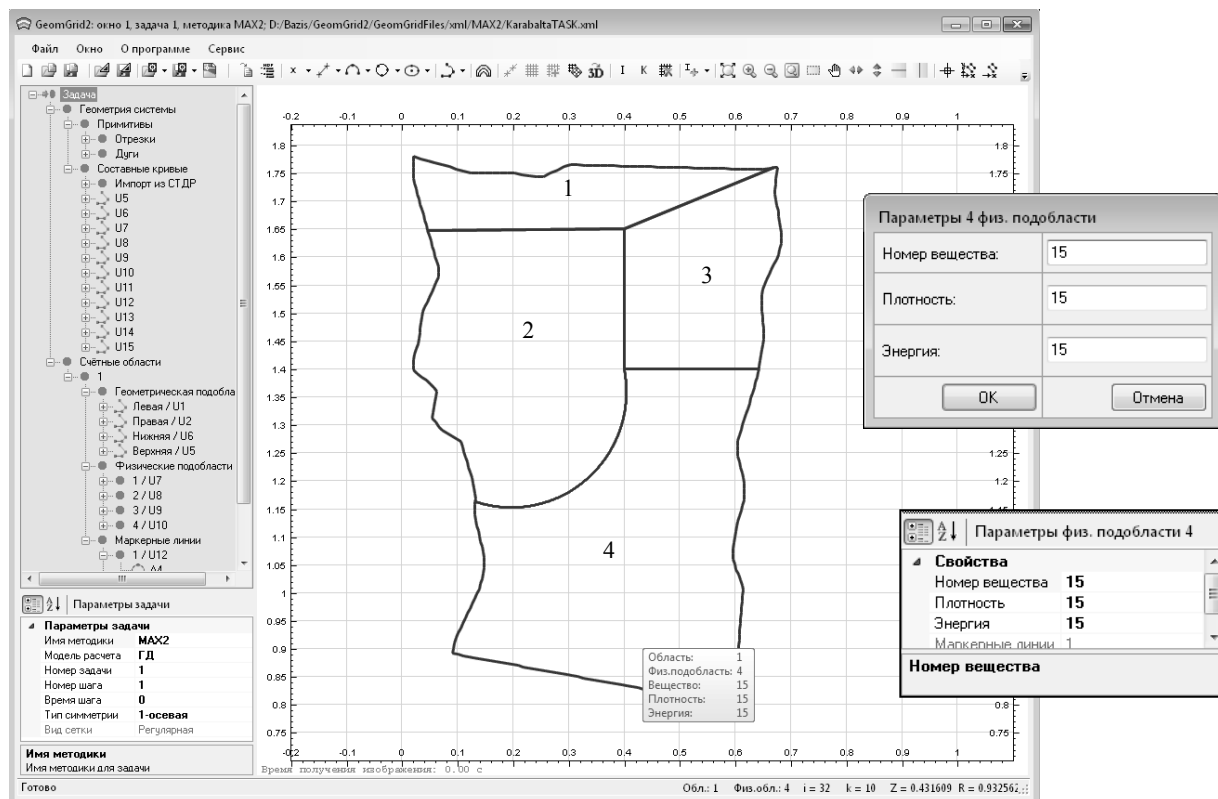


Рис. 3. Геометрическая декомпозиция области на 4 физические подобласти

Распределение веществ по ячейкам сеток

После декомпозиции областей на физические подобласти и задания параметров веществ необходимо распределить вещества по ячейкам сетки. Для этого в системе «GeomGrid2» был разработан алгоритм, который заключается в поиске пересечений ячеек с контурами физических подобластей. В окрестностях пересечений физических подобластей с ячейками области образуются смешанные ячейки, в которые попадают несколько веществ от каждой физической подобласти.

На рис. 4 представлена ячейка, которая имеет пересечение с тремя физическими подобластями.

Для таких ячеек рассчитывается доля вещества от каждой физической подобласти. В рамках системы «GeomGrid2» реализован алгоритм для расчета концентраций в смешанных ячейках, который заключается в вычислении объема или площади пересечения произвольного контура, который может состоять из отрезков и из дуг окружностей, физических подобластей с каждой ячейкой сетки области. В зависимости от отношения площади/объема пересечения к общей площади/объему ячейки определяются объемные или площадные концентрации. Площадь и объемы пересечений контуров с ячейками сетки осуществляются при помощи функций OpenCASCADE [5].

За счет использования функций OpenCASCADE получается хорошая точность при вычислении концентраций веществ в смешанных ячейках, а за счет параллельной реализации алгоритма увеличивается скорость выполнения алгоритма, а также снимается ограничение памяти на объем данных.

Для параллельной реализации алгоритма был разработан инструмент для пространственной декомпозиции области по ячейкам сетки на фрагменты. Реализовано несколько способов декомпозиции: равномерно по горизонтали, равномерно по вертикали и произвольным способом.

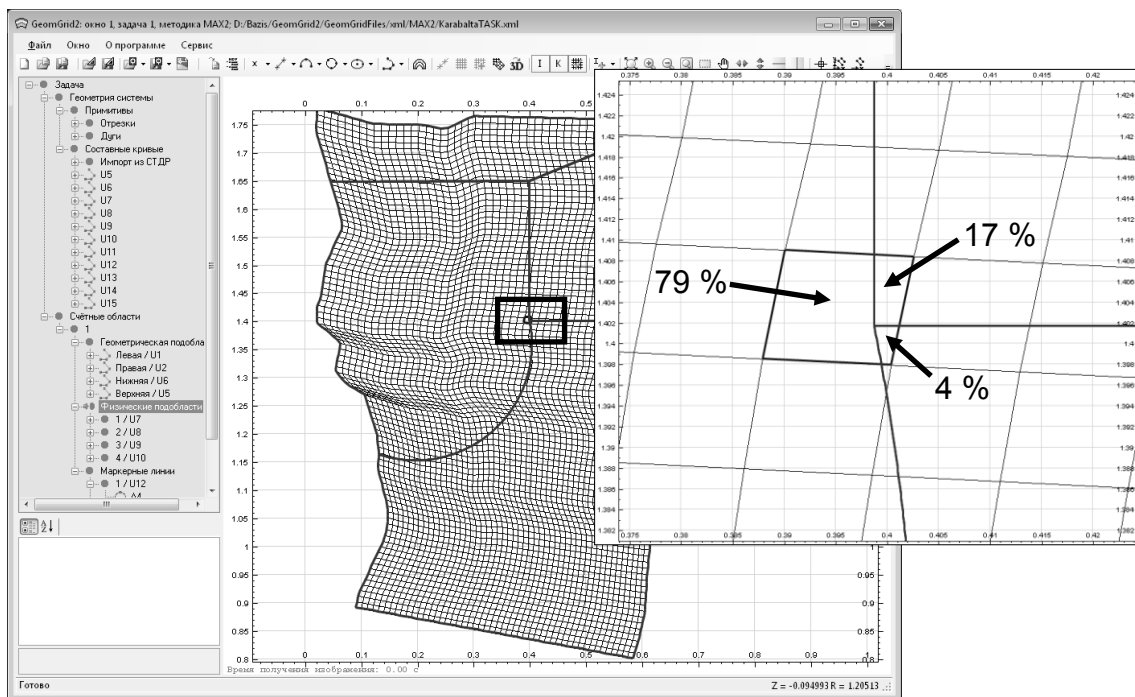


Рис. 4. Ячейка области, имеющая пересечение с тремя физическими подобластями

Далее для каждого фрагмента сетки осуществляется отработка алгоритма распределения веществ с расчетом концентраций в смешанных ячейках в отдельном процессе (рис. 5).

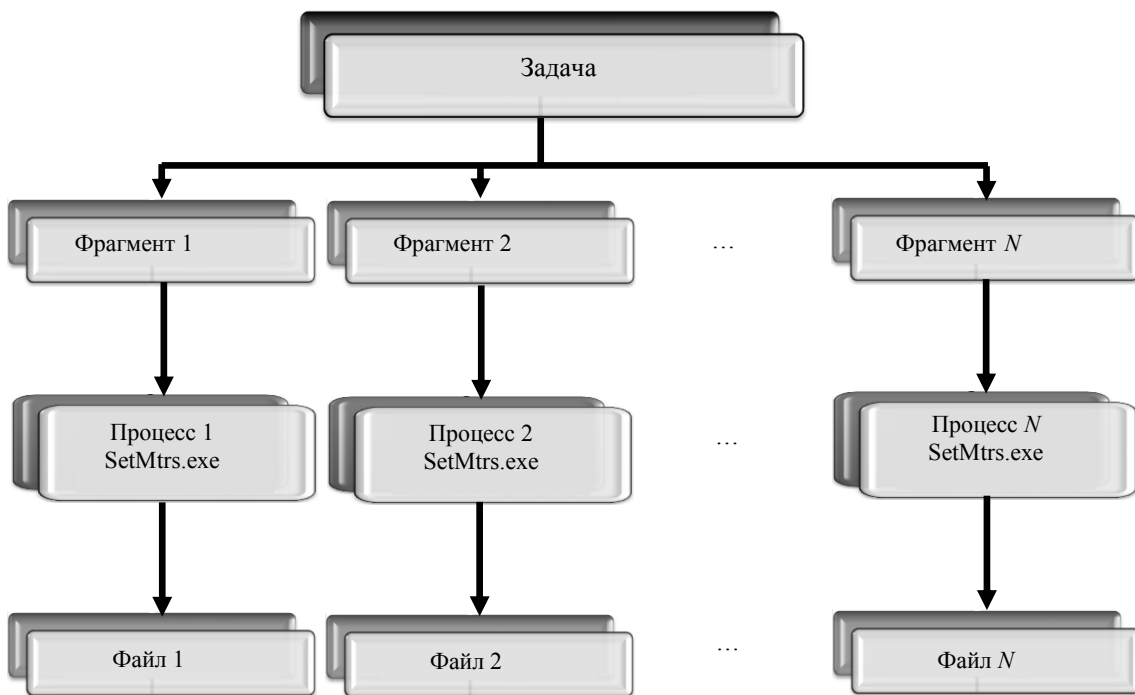


Рис. 5. Схема технологии распараллеливания алгоритма распределения веществ с расчетом концентраций в ячейках сеток областей

Процессы являются независимыми. В результате для каждого фрагмента сетки рассчитываются вещества.

Параллельное выполнение распределения веществ реализовано для ОС WINDOWS и ОС LINUX.

Формирование начальных файлов-разрезов

В РФЯЦ-ВНИИТФ программные комплексы математического моделирования МСС для начала расчета задач используют файлы с подготовленными на этапе РНД данными, поэтому в системе «GeomGrid2» был разработан широкий спектр форматов для выгрузки данных:

- hdf4, hdf5 [6];
- xml;
- prom;
- max2 [7];
- geo;
- и др.

Заключение

В итоге в РФЯЦ-ВНИИТФ создана система «GeomGrid2», разрабатываемая под управлением ОС WINDOWS и ОС LINUX. Система «GeomGrid2» успешно решает основные задачи двумерного препроцессинга для программных комплексов математического моделирования РФЯЦ-ВНИИТФ.

За счет параллельной реализации времязатратных алгоритмов в рамках системы «GeomGrid2» можно проводить расчет начальных данных двумерных задач, превышающих десятки миллионов элементов (ячеек, частиц).

Литература

1. Беломестных О. В., Гагарин С. В., Галинова А. В. и др. Программа «GeomGrid2» для задания геометрии, построения сеток и формирования начальных данных двумерных задач // XII Международ. семинар «Супервычисления и математическое моделирование»: Тез. докл. Саров, 3–7 октября, 2011. С. 91. Препринт РФЯЦ-ВНИИТФ. 2012. № 172.
2. Олесницкая К. К., Антипин И. А., Шубина М. А. Библиотека ЕФР для масштабируемого доступа к файловым данным на многопроцессорных ЭВМ // XI Забабахинские научные чтения: Сб. тез. Снежинск, 16–20 апреля, 2012. С. 335–336.
3. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.autodesk.ru>, свободный.
4. Сковпень А. В. Усовершенствованный алгоритм построения нерегулярных четырехугольных сеток: Монография. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2004.
5. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.opencascade.org>, свободный.
6. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://hdfgroup.org>, свободный.
7. Анучина Н. Н., Волков В. И., Еськов Н. С. Численный метод расчета контактных границ с большими деформациями // Труды V Международ. конф. «Забабахинские научные чтения». Снежинск, 1998.