

## 6. Заключение

В работе представлено описание функциональных возможностей текущей версии пакета программ ЛОГОС, предназначенных для решения задач динамической и квазистатической прочности. Работоспособность и эффективность реализации показана на примере численного решения ряда практических инженерных задач.

## Литература

1. Циберев К. В., Авдеев П. А., Артамонов М. В. и др. Пакет программ ЛОГОС. Функциональные возможности для решения задач прочности / Под ред. Р. М. Шагалиева // Труды XIII Международного семинара «Супервычисления и математическое моделирование». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011.
2. Речкин В. Н., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В. Пакет программ ЛОГОС. Модуль решения квазистатических задач прочности и модального анализа / Под ред. Р. М. Шагалиева // Там же.
3. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. и др. Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41–50.
4. Hallquist J. O. LS-DYNA theoretical manual. Livermore Software Technology Corporation. 2006.
5. Peery J. S., Carroll D. E. Multi-material ALE Methods in Unstructured Grids // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2000. Vol. 187. P. 591–619.
6. Benson D. J., Hallquist J. O. A single surface algorithm for the post-buckling analysis of shell structures // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1990. Vol. 91. P. 141–163.
7. Belytschko T., Neal M. O. Contact-impact by the pinball algorithm with penalty and Lagrangian methods // International Journal of Numerical Methods and Engineering. 1991. Vol. 31. P. 547–572.
8. Oldenburg M., Nilsson L. The position code algorithm for contact searching // International Journal of Numerical Methods and Engineering. 1994. Vol. 37. P. 359–386.
9. ANSYS [Electronic resource]. Mode of access: [www.ansys.com](http://www.ansys.com)
10. ABAQUS [Electronic resource]. Mode of access: [www.siemens.com](http://www.siemens.com)
11. MSC.NASTRAN [Electronic resource]. Mode of access: [www.mssoftware.com](http://www.mssoftware.com)
12. Ryabov A. A., Romanov V. I., Kukanov S. S. et al. Chupin Fan Blade Bird Strike Analysis Using Lagrangian, SPH and ALE Approaches // 6th European LS-DYNA Users' Conference 6th European LS-DYNA Users' Conference [Electronic resource]. Mode of access: <http://www.dynalook.com/european-conf-2007/fan-blade-bird-strike-analysis-using-lagrangian.pdf>

## ГЕТЕРОГЕННАЯ ДЕКОМПОЗИЦИЯ НЕСТРУКТУРИРОВАННОЙ МНОГОГРАННОЙ РАСЧЕТНОЙ СЕТКИ

*А. Ю. Алейников*

Российский федеральный ядерный центр –  
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Для проведения параллельных газодинамических расчетов на больших многопроцессорных вычислительных системах необходимо осуществлять декомпозицию расчетной сетки. При этом каждая ячейка расчетной сетки относится к конкретному вычислительному устройству, а также выстраивается топология обменов расчетными величинами в ячейках. В программах, основанных

на конечно-объемных методиках, часто используются неструктурированные многогранные расчетные сетки. В комплексе программ ЛОГОС-Газодинамика [1] ячейки расчетной сетки являются произвольными многогранниками, а грани сетки – произвольными многоугольниками. Фрагмент типичной расчетной сетки представлен на рис. 1.

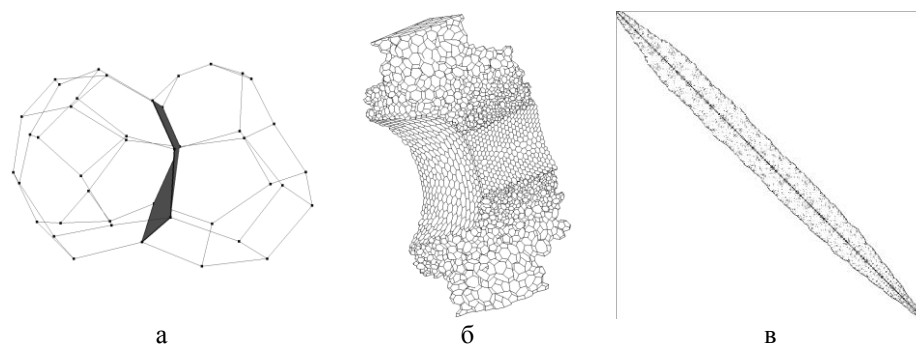


Рис. 1. Неструктурированная многогранная расчетная сетка: а – две ячейки, разделенные гранью; б – фрагмент сетки; в – матрица связности сетки

Для декомпозиции неструктурированных многогранных сеток часто используются не геометрические, а топологические методы. Основная идея таких методов состоит в построении специального графа, эквивалентного исходной расчетной сетке с последующим разбиением его на части. В комплексе программ ЛОГОС-Газодинамика конечные объемы строятся на ячейках исходной расчетной сетки, следовательно узлы такого графа в этом случае соответствуют ячейкам исходной сетки, а ребра графа ее внутренним граням. Построенный граф разбивается с помощью одного из классических (как правило, многоуровневых) методов разбиения графа. Методы разбиения графа реализованы во многих свободно-доступных вычислительных пакетах, таких как Chaco [2], MeTiS [3] или Scotch [4]. В комплексе программ ЛОГОС-Газодинамика для разбиения графов используются многоуровневый метод семейства Kernighan-Lin, реализованный в пакете Chaco. Полученное разбиение графа затем естественным образом переносится на исходную расчетную сетку.

Декомпозиция расчетной сетки, основанная на топологическом разбиении графа, позволяет получить однородное сбалансированное разбиение. В таком разбиении количество ячеек в каждой подобласти примерно одинаково, а обмены между подобластями минимизируются. При использовании такого подхода подразумевается, что вычислительные устройства, на которых будет происходить расчет, одинаковы по вычислительной производительности и коммуникационная сеть представляет собой полносвязный граф с равными пропускными способностями между его элементами.

В настоящее время все больше вычислительных систем становятся гетерогенными. В таких вычислительных системах, кроме основного вычислительного элемента – центрального процессора, дополнительно используются или графические ускорители (GPU) или сопроцессоры Intel Xeon Phi, основанные на архитектуре Intel MIC. В последнем случае типичная теоретическая пиковая производительность составляет: для двух центральных процессоров вычислительного узла суммарно ~0,3 TFLOP/S, а для сопроцессора Intel Xeon Phi примерно 1 TFLOP/S. Таким образом, элементы вычислительной системы отличаются по своей производительности более чем в три раза, а потребляемая при этом энергия примерно одинакова. Производительность реальных приложений также будет значительно отличаться при их выполнении на различных вычислительных элементах таких гетерогенных вычислительных систем. Коммуникационная сеть в таких гетерогенных вычислительных системах также обладает существенной неоднородностью как по своей структуре (типичные сетевые топологии: «шина», «кольцо», «жирное дерево», «гиперкуб» и др.), так и по пропускной способности между различными ее элементами. Например, в работе [5] авторы произвели детальные замеры пропускной способности между элементами тестовой гетерогенной вычислительной системы, некоторые результаты представлены на рис. 2.

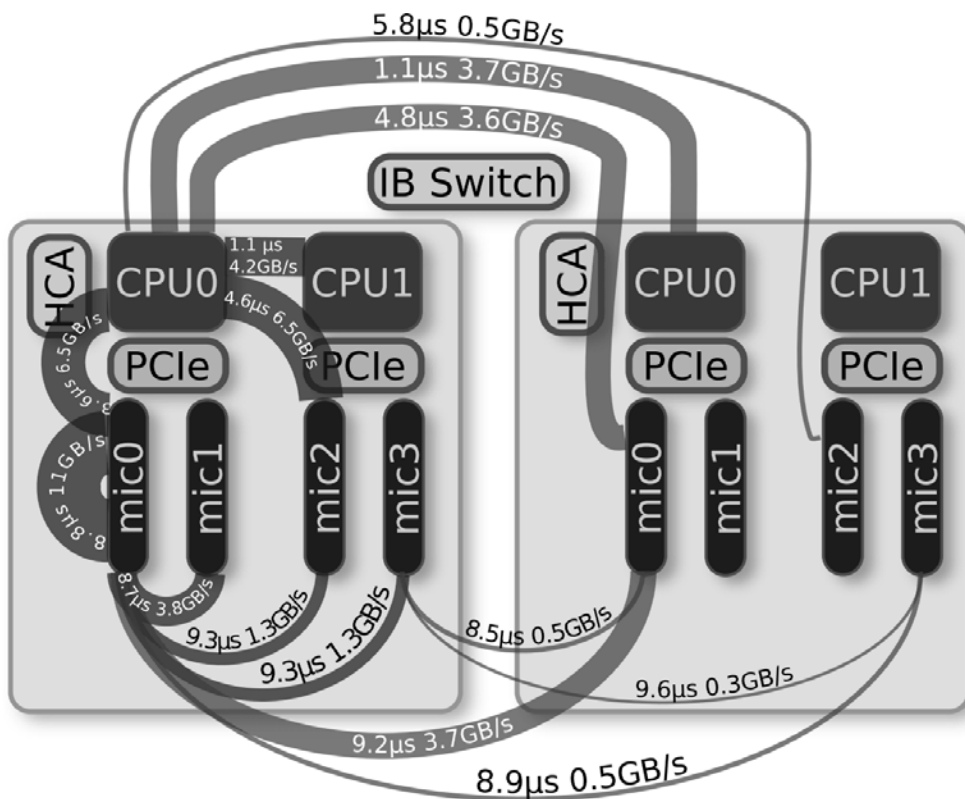


Рис. 2. Пропускная способность для MPI сообщений [5]

Из анализа результатов работы [5] можно заключить, что пропускные способности между элементами такой гетерогенной вычислительной системы могут отличаться более чем в 36 раз (обмен данными внутри устройства mic0 осуществляется со скоростью  $\sim 11$  GB/s, а между устройствами mic3 различных вычислительных узлов скорость обмена снижается до  $\sim 0,3$  GB/s).

Таким образом, становится понятно, что с применением стандартной схемы декомпозиции затруднительно получить сбалансированное разбиение неструктурированной расчетной сетки для гетерогенной вычислительной системы. В связи с этим, в рамках работы по развитию комплекса программ ЛОГОС [1] проводятся исследования, направленные на создание нового модуля статической декомпозиции неструктурированной многогранной расчетной сетки для гетерогенных вычислительных систем. В дальнейшем под гетерогенной декомпозицией расчетной сетки понимается ее сбалансированная декомпозиция на гетерогенную вычислительную систему.

Один из подходов к созданию модуля гетерогенной декомпозиции основан на идее «частично-вложенной» декомпозиции. В этом подходе основной упор делается на стремлении создать такое разбиение исходной расчетной сетки, в котором медленные каналы связи между вычислительными элементами не используются. Это можно сделать с использованием следующего подхода. Исходная расчетная сетка разбивается на большое число подобластей (например, с использованием вышеописанного традиционного подхода). Затем осуществляется слияние подобластей в группы таким образом, чтобы исключить обмены между вычислительными элементами, между которыми отсутствует непосредственная связь или скорость обмена очень мала. Примерная схема такой «частично-вложенной» декомпозиции для трехэлементной вычислительной системы (граф которой показан на рис. 3) представлена на рис. 4.

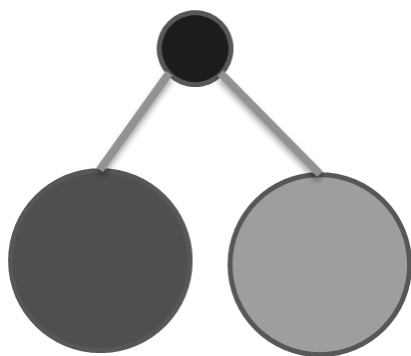


Рис. 3. Граф трехэлементной вычислительной системы

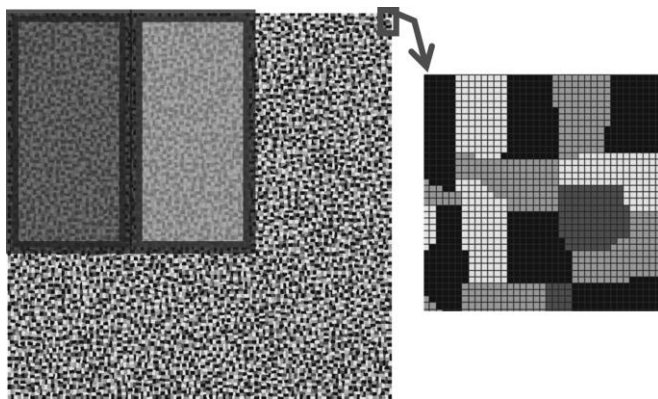


Рис. 4. Схема «частично-вложенной» декомпозиции

У подхода к гетерогенной декомпозиции, основанного на «частично-вложенном» подходе есть существенный недостаток. Он заключается в том, что при разбиении на очень большое число подобластей (или когда количество ячеек в подобласти мало) могут генерироваться несвязные подобласти (рис. 5).

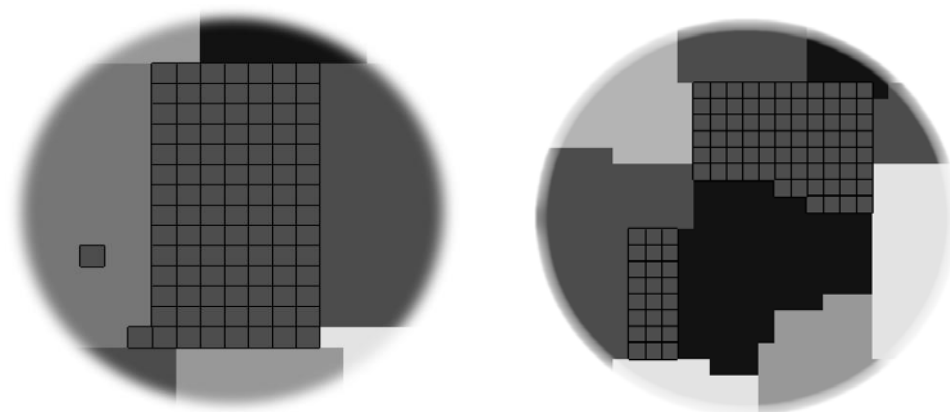


Рис. 5. Несвязные подобласти

Такие несвязные подобласти можно слить путем последующей постобработки, но при этом трудно будет обеспечить сбалансированность итоговой декомпозиции. Другой вариант состоит во введении в процедуру декомпозиции графа дополнительного ограничения, гарантирующего связность получаемых подобластей (в классической постановке такого ограничения нет).

Другой подход к гетерогенной декомпозиции основан на сведении задачи к сбалансированному отображению графов. Процедура отображения графов реализована, например, в свободно-доступном пакете Scotch [4]. Исходный граф в этом подходе представляется графом исходной расчетной сетки, а результирующий граф моделирует вычислительную систему. Узлы результирующего графа соотносятся с вычислительными элементами, а его ребра с каналами связи между ними. В качестве весов результирующего графа в этом случае задаются относительные производительности элементов вычислительной системы, а для весов ребер используются относительные пропускные способности каналов связи между вычислительными элементами. Такая постановка

является естественным обобщением классической однородной топологической декомпозиции, если в качестве графа вычислительной системы рассмотреть полносвязный невзвешенный граф. На рис. 6,а показана получаемая декомпозиция расчетной сетки при использовании в качестве графа вычислительной системы полного невзвешенного графа ( $K_3$ ). На рис. 6,б для той же расчетной сетки получена гетерогенная декомпозиция. В последнем случае в качестве графа вычислительной системы используется трехузловой граф в виде дерева, при этом вес (вычислительная производительность) листьев графа задан в пять раз больше, чем вес корневого узла.

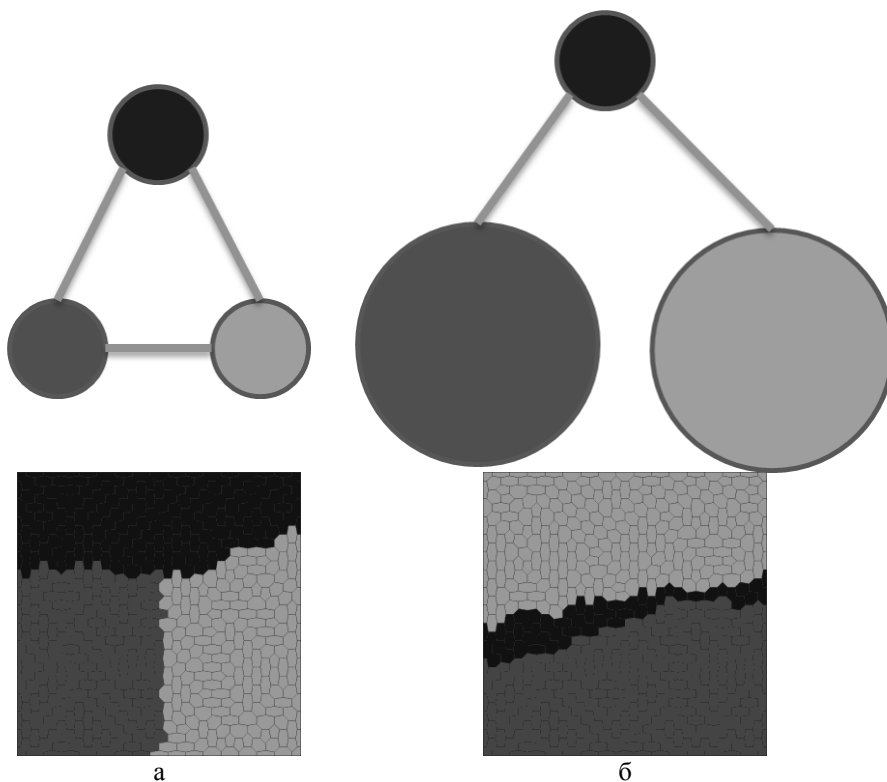
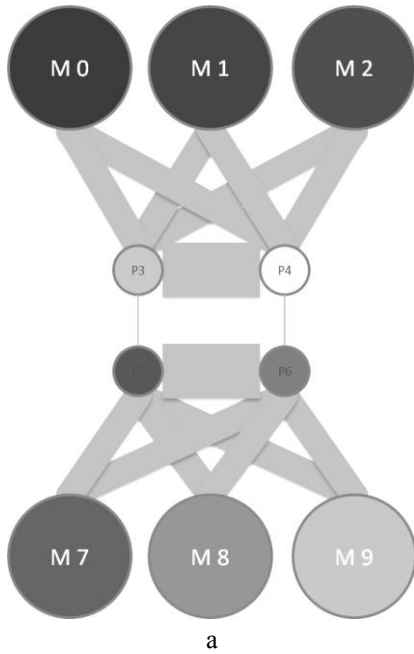


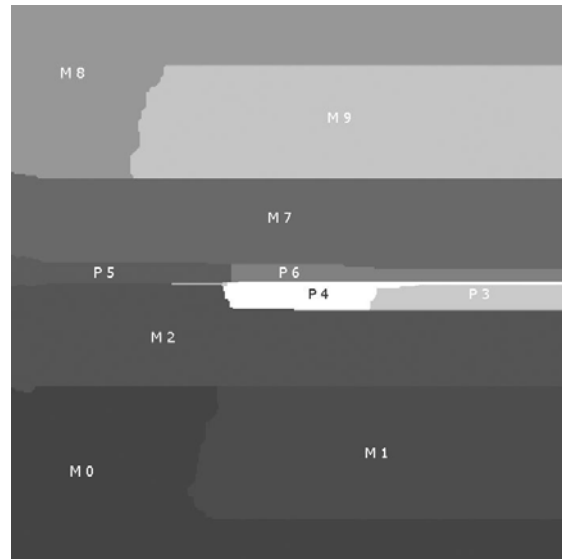
Рис. 6. Однородная (а) и гетерогенная (б) декомпозиция

Видно, что однородная и гетерогенная декомпозиция существенно отличаются друг от друга. Необходимо особо отметить, что части сетки, соответствующие листьям графа, в пять раз больше (по количеству ячеек в них), чем область сетки корневого узла. Кроме того, эти части сетки изолированы друг от друга, т. е. не имеют общих граней, что устраняет или минимизирует объем обменов между ними (в зависимости от количества слоев «обменных» ячеек, используемых в дальнейшем при разбиении расчетной сетки).

На рис. 7 представлена полученная декомпозиция расчетной сетки для тестового графа вычислительной системы. Размеры узлов графа пропорциональны их весам (производительности вычислительных элементов), а ширина ребер – пропускной способности между элементами вычислительной системы.



а



б

Рис. 7. Гетерогенная декомпозиция (а) граф вычислительной системы (б) разбиение расчетной сетки

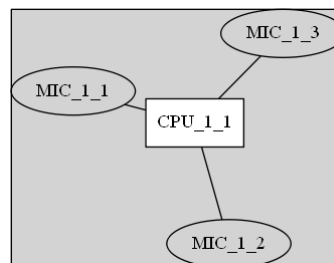
Для осуществления гетерогенной декомпозиции на основе использования сбалансированного отображения графов необходимо, кроме графа исходной расчетной сетки, иметь построенный граф вычислительной системы. Для достаточно больших вычислительных систем построение такого графа в ручном режиме становится затруднительным. Поэтому в рамках разработки модуля гетерогенной декомпозиции расчетной сетки ЛОГОС-Газодинамика принято решение о создании программного модуля построения графов вычислительных систем. Такой модуль может состоять из набора (базы данных) представлений в виде графов типичных узлов вычислительных систем, а также программы построения графа всей вычислительной системы по выбранному представлению узла и задаваемой топологии вычислительной системы.

В качестве файлового представления графов типичных узлов было решено использовать один из общепринятых форматов представления графов DOT ([http://en.wikipedia.org/wiki/DOT\\_\(graph\\_description\\_language\)](http://en.wikipedia.org/wiki/DOT_(graph_description_language))). Выбор данного формата обусловлен его простым и наглядным текстовым представлением, что облегчает редактирование файла, а также создание процедур импорта и экспорта файлов в таком формате. Кроме того, для файлов в формате DOT существует достаточно удобная свободно-доступная система визуализации графов GraphViz [6], позволяющая в автоматическом режиме производить размещение узлов и ребер графа на плоскости.

На рис. 8 представлено содержимое файла в формате DOT и его графическое изображение, полученное в системе GraphViz.

```
graph G {
  overlap=false
  splines=true
  CPU_1_1 [ shape=box,
            style=filled,
            fillcolor=white ]
  subgraph clusterNode_1 {
    style=filled
    CPU_1_1 -- MIC_1_1
    CPU_1_1 -- MIC_1_2
    CPU_1_1 -- MIC_1_3
  }
}
```

а



б

Рис. 8. Граф в формате DOT (а) и его графическое изображение (б)

На рис. 9 показаны некоторые типичные графы для представлений вычислительных узлов гетерогенных вычислительных систем.

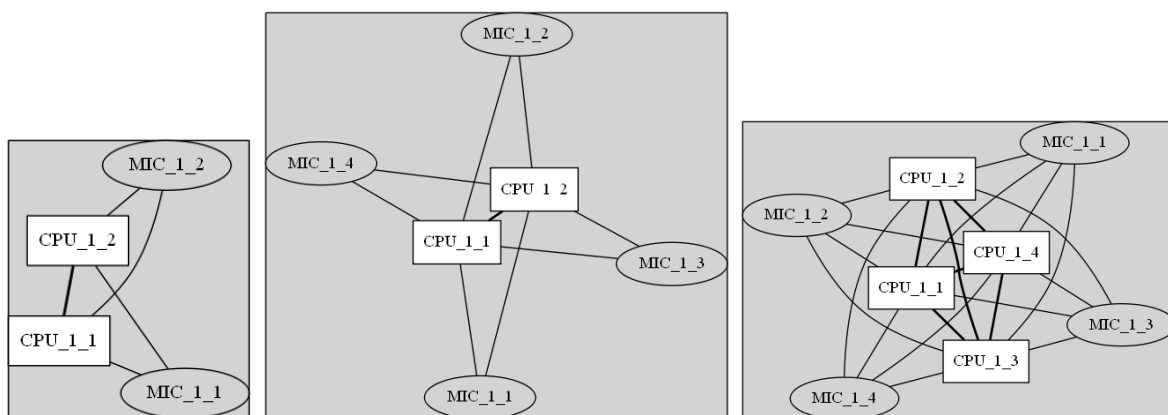


Рис. 9. Графы узлов вычислительных систем

На рис. 10 представлена схема формирования графа вычислительной системы, состоящей из трех узлов, для выбранного графа узла. Узлы соединяются в общий граф, при этом считается, что используется полностью связная сетевая топология.

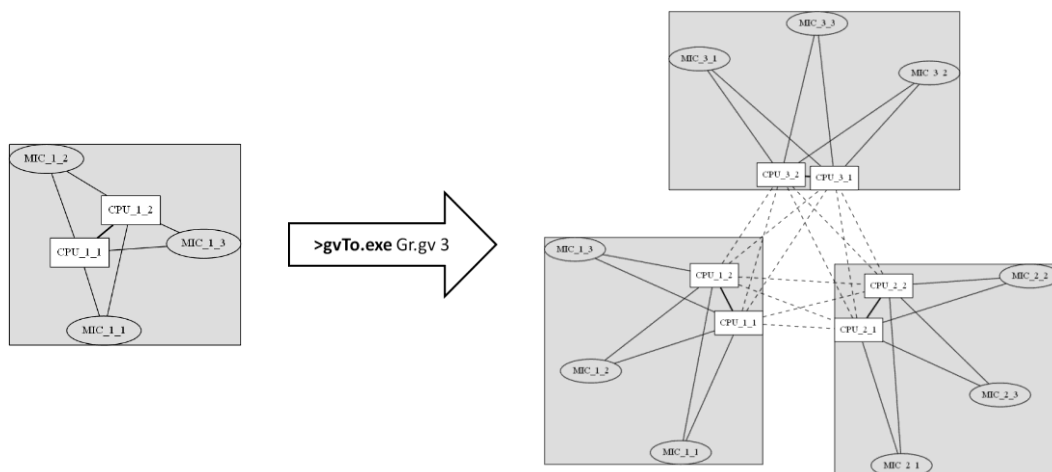


Рис. 10. Создание графа вычислительной системы

Отметим также, что разработанная программа **gvTo** также позволяет конвертировать файл в формате DOT в файл, совместимый с представлением графов в комплексе Scotch. Реализованные возможности позволяют проводить гетерогенную декомпозицию расчетных сеток с использованием средств отображения графов пакета Scotch.

В заключении отметим, что в комплексе программ ЛОГОС-Газодинамика создается новая технология проведения декомпозиции расчетной сетки. Один из подходов основан на стандартных алгоритмах отображения графов. Разрабатываемая технология позволяет проводить сбалансированную декомпозицию неструктурированной многогранной расчетной сетки для проведения расчетов на гетерогенных вычислительных системах. При этом явно учитывается как различие в вычислительной производительности элементов, так и отличие в пропускной способности между элементами гетерогенной вычислительной системы.

## Литература

1. Погосян М. А., Савельевских Е. П., Шагалиев Р. М. и др. Применение отечественных суперкомпьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной техники // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 2. С. 3–18.
2. Hendrickson B., Leland R. The Chaco user's guide: Version 2.0: Tech. Rep. // SAND95-2344, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, July 1995.
3. Karypis G., Kumar V. MeTiS: A software package for partitioning unstructured graphs, partitioning meshes, and computing fill-reducing orderings of sparse matrices, version 4.0: Technical report // Univ. of MN, Dept. of Computer Sci. and Engr. September 20, 1998.
4. Pellegrini F. Scotch and libScotch 5.1 User's Guide, INRIA Bordeaux Sud-Ouest, ENSEIRB & LaBRI, Universite Bordeaux, FRANCE, August 29, 2010.
5. Karpusenko V., Vladimirov A. Configuration and Benchmarks of Peer-to-Peer Communication over Gigabit Ethernet and InfiniBand in a Cluster with Intel Xeon Phi Coprocessors, March 11, 2014. [Electronic resource]. Mode of access: <http://research.colfaxinternational.com/post/2014/03/11/InfiniBand-for-MIC.aspx>.
6. Gansner E. R., North S. C. An open graph visualization system and its applications to software engineering // SOFTWARE – PRACTICE AND EXPERIENCE. 2000. 30. 11. P. 1203–1233. [Electronic resource]. Mode of access: <http://www.graphviz.org>.

## ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПРОВОДЯЩИХ СТРУКТУРАХ РЕАКТОРА ИТЭР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ЭВМ

*А. Б. Алексеев, В. М. Амосков, А. М. Базаров, А. В. Белов, В. А. Беляков,  
Е. И. Гапионов, Ю. В. Грибов, В. П. Кухтин, Е. А. Ламзин, Н. А. Максименкова,  
С. Е. Сычевский, О. Г. Филатов*

ОАО «НИИЭФА им. Д. В. Ефремова», г. Санкт-Петербург

## Введение

Эксплуатация токамака ИТЭР предполагает необходимость планирования и предварительного численного моделирования физических экспериментов с тем, чтобы не выйти за границы допустимого операционного пространства установки. При этом управление плазмой и реактором в целом является сложной задачей из-за достаточно малых технических запасов, принятых при конструировании, что является следствием жесткого ограничения стоимости проекта ИТЭР. Решение задачи управления требует наличия симуляторов, моделирующих поведение плазмы, плазменной диагностики и инженерных систем реактора, а также использования многочисленных баз данных, характеризующих работу этих систем.

Симуляторы ИТЭР – это специализированные быстродействующие компьютерные программы, адаптированные к особенностям установки. Отдельную группу составляют симуляторы, моделирующие работу различных инженерных систем (все системы, кроме плазмы и ее диагностики) и, в частности, их электромагнитное поведение, анализ которых, как правило, требует привлечения полномасштабных вычислительных моделей.