

7. Соболев И. М. Глобальные показатели чувствительности для изучения нелинейных математических моделей // Мат. моделирование. 2005. Т. 17, № 9. С. 43–52.
8. Антонов А. С. Параллельное программирование с использованием технологии MPI: учеб. пособие. М.: Изд-во МГУ, 2004.
9. Гергель В. П., Стронгин Р. Г. Основы параллельных вычислений для многопроцессорных вычислительных машин: учеб. пособие. Изд. 2-е. Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2003.
10. Федоренко А. Г., Цыпкин В. И., Иванов А. Г., Русак В. Н., Заикин С. Н. Особенности динамического деформирования и разрушения цилиндрических стеклопластиковых оболочек при внутреннем импульсном нагружении // Механика композитных материалов. 1983, № 1. С. 90–94.

ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РЕШАТЕЛЕЙ СЛАУ В ПАКЕТАХ ПРОГРАММ ИНЖЕНЕРНОГО АНАЛИЗА РФЯЦ-ВНИИЭФ

А. Ю. Алейников, Р. А. Барабанов, Ю. Г. Бартенев, В. А. Ерзунов, А. П. Карпов, В. Ю. Кузнецов, Д. А. Петров, В. Ю. Резчиков, А. Н. Стаканов, Е. Б. Щаникова

Российский Федеральный Ядерный Центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Введение

В пакетах параллельных программ ЛОГОС.Аэрогидромеханика, ЛОГОС.Прочность, НИМФА [1, 2, 3], ряде программ моделирования задач ядерной энергетики применяются неявные методы и, соответственно, решатели разреженных СЛАУ. Предшествующие работы по теме доклада отражены в [4, 5, 6].

Если ранее основным средством достижения параллелизма являлось использование MPI, то в последнее время повысилась актуальность использования добавочно возросшего многопоточного и векторного параллелизма современных и будущих процессоров.

Представлены отвечающие этой тенденции реализации алгебраического многосеточного метода, аддитивного метода Шварца, симметричного метода Гаусса–Зейделя, неполного разложения ILU0/IC0, итерационных решателей CG и BiCGStab, выполненные в библиотеке PMLP/ParSol комплекса библиотек LParSol и пакете ЛОГОС.Аэрогидромеханика. В комплекс библиотек LParSol, помимо PMLP/ParSol, входят также библиотеки параллельных многопоточных решателей СЛАУ TParFBSS [7] и массивно-параллельных решателей VC RAN SLAU [8]; интерфейсы вызовов мультипоточного решателя Intel PARDISO [9] и параллельного предобусловливателя AMG библиотеки Nupre [10] в качестве предобусловливателей итерационных решателей PMLP/ParSol. В LParSol входит также некоторый инструментарий¹.

Постановка задачи и общие сведения о библиотеке

Для распределенной СЛАУ $A \times x = b$, где A – $N \times N$ матрица и b – вектор, найти вектор x итерационно: $\|b - A \times x_n\| < \varepsilon \|b\|$, $\varepsilon \ll 1$; $n \ll N$, $t_n \sim O(N)$, x_n , x_0 – векторы;
– x прямым методом; далее x при необходимости уточнить итерационно.

¹Тестовая система и средства анализа СЛАУ, параллельная библиотека графов ParMatruz (разбиение графа, сужение ленты матрицы [14], раскраска графа), параллельный спектральный решатель SPD-матриц VC_RAN_Eigen [15].

В PMLP/ParSol комбинация $M \times (A \times x = b) - preconditioner \times solver$ выполняет решение СЛАУ в подпространствах Крылова ($r_0, A \times r_0, A^2 \times r_0, \dots, A^n \times r_0$). В PMLP/ParSol реализованы параллельные многопоточные итерационные решатели²:

- $CG_mpiomp(A, b, x, preconditioner, crit, \varepsilon, ierr)$ – сопряженных градиентов,
- $BiCGStab_mpiomp(\dots)$ – бисопряженных градиентов стабилизированный,
- $BiCGStab2_mpiomp(\dots)$ – дважды бисопряженных градиентов стабилизированный;
- последовательные предобусловливатели:
- $IC_0(A, M, \Delta b, \Delta x), ILU_0(\dots), IC_t(\dots, \tau), ILU_t(\dots, \tau)$ – неполные разложения матрицы [11],
- $IC2(\dots, \tau_1, \tau_2)$ – второго порядка точности разложение симметричной матрицы [12],
- $AMG(\dots, smooth, \dots)$ – селективный алгебраический многосеточный [13];
- многопоточные предобусловливатели (на общей памяти):
- $ILU_0_omp(\dots), ILU_t_omp(\dots, \tau)$ ³,
- $AMG_omp(\dots, smooth_omp, \dots)$;
- $Schwartz_omp(\dots, precond_seq, cross, \dots)$ – блочный с перекрытием метод Шварца [11];
- параллельные (на распределенной памяти) многопоточные предобусловливатели:
- $AMG_mpiomp(\dots, smooth, \dots)$,
- $Schwartz_mpi(\dots, precond_omp, cross, \dots)$,
- $CGC_mpi(A, M_c, coarse_cells_nums) \times Schwartz_mpi(A, M, precond_omp, \dots)$ – усилитель блочного предобусловливателя с коррекцией поправки на грубой сетке⁴.

Охарактеризуем перечисленные методы. Блочные методы действуют в каждом домене (подобласти) СЛАУ независимо, полусквозные – в группе доменов, сквозные – во всей СЛАУ. Так, итерационные решатели CG_mpiomp , $BiCGStab_mpiomp$, точечный предобусловливатель Якоби (обратная диагональ), предобусловливатель AMG_mpiomp являются сквозными методами; предобусловливатели ILU_0_omp , $ILU_t_omp(\tau)$, AMG_omp являются сквозными в узле с общей памятью и полусквозными при использовании в $Schwartz_mpi$. Последовательные предобусловливатели становятся блочными многопоточными при использовании в $Schwartz_omp$. Многопоточные предобусловливатели становятся полусквозными или дважды блочными параллельными при использовании в $Schwartz_mpi$ ⁵, который в свою очередь становится подобным сквозному с усилителем CGC_mpi .

Многопоточный режим решения СЛАУ в PMLP/ParSol используется на гомогенных параллельных ЭВМ и находится в стадии оптимизации к гетерогенным параллельным ЭВМ.

В ЛОГОС.Аэрогидромеханика реализованы сквозные MPI×OMP решатели:

- $SGS_mpiomp(A, b, x, rtol)$ – многоцветный и конвейерный решатель Гаусса–Зейделя,
- $DILU_mpiomp(\dots)$ – многоцветный и конвейерный диагональный ILU0,
- $AgAMG_mpiomp(\dots, nAggCell, smoother_f, smoother_c, nStepRconst)$ – агрегативный AMG для нескольких неизвестных с одной ведущей неизвестной в каждой ячейке сетки, где
- A – распределенная матрица с перекрытиями между MPI-областями в один слой;
- $nAggCell$ – число агрегируемых ячеек в одну грубую ячейку;
- $smoother_f$ – сглаживатель SGS_mpiomp / $DILU_mpiomp$ подробных уровней;
- $smoother_c$ – сглаживатель грубых уровней (= $smoother_f$ или многоцветный DILU/SGS);
- $nStepRconst$ – число СЛАУ с постоянным агрегированием ячеек.

Планируется включение AgAMG в PMLP/ParSol в качестве параллельного многопоточного решателя и предобусловливателя для использования в других приложениях.

²Обозначим \dots_seq или $\dots, \dots_mpi, \dots_omp, \dots_mpiomp$ – последовательную, параллельную, многопоточную и параллельную многопоточную функцию \dots , где для распараллеливания использованы средства MPI [16], OpenMP [17], MPI и OpenMP.

³Полное разложение с отсечением по малости значения пока только для блочно-трехдиагональной части матрицы.

⁴Coarse Grid Correction [19].

⁵Например, $Schwartz_mpi(IC_0_omp, \dots)$ – полусквозной, а $Schwartz_mpi(Schwartz_omp(IC_0, \dots), \dots)$ – дважды блочный.

Особенности решения СЛАУ в библиотеке PMLP/ParSol

Библиотека PMLP/ParSol позволяет воспользоваться некоторыми структурами общими для несколько СЛАУ, использовать одинарную и двойную точность предобусловливания, что способствует сокращению затрат на решение СЛАУ, задавать разные решатели для решения СЛАУ разного типа в одной задаче на одном и разных множествах процессоров, адаптивно подстраиваться к сложности СЛАУ, что позволяет «подогнать» решатель к стадии счета задачи, физическому процессу [18]. Например, в задаче газовой динамики с лучистой теплопроводностью применение $CGC_mpi(\dots) \times Schwartz_mpi(\dots) \times BiCGStab_mpi(\dots)$ для решения только *первых двух* СЛАУ и $Schwartz_mpi(\dots) \times BiCGStab_mpi(\dots)$ для *остальных* СЛАУ в итерациях по нелинейности на *каждом временном шаге* ускорил счет в 1,4 раза. Другой пример – в табл. 1 для $BiCGStab_mpi$ с разными предобусловливателями.

Таблица 1

Сравнение затрат на решение СЛАУ разными решателями в задаче распространения тепла

Preconditioner	tSolver, sec (% task)	nIterSolver: all / average / max	Решение 38 СЛАУ в ЛОГОС.Тепло на 12 ядрах, 1,6 млн. ячеек
AMG mpi(GS, ...).	151 (88 %)	1140 / 30 / 35	
AMG mpi(GS, P = const, ...)	140 (89 %)	1145 / 30 / 36	
JacobiBlock mpi(ILU0)	464 (98 %)	13101 / 345 / 381	

Использование *AMG* здесь экономичнее блочного *ILU0*. Применение матрицы пролонгации *P* (и матрицы рестрикции) на всем потоке 38 СЛАУ с одинаковым портретом матриц, вычисленных при решении первой СЛАУ, заметно ускорило счет задачи.

Пользователь подает решателю из библиотеки PMLP/ParSol свою (локальную) часть распределенной матрицы, вектора правой части и начального приближения и решатель СЛАУ выдает решения в распределенный вектор начального приближения. Распределение строк матрицы и векторов по процессам должно совпадать. В блоке решателя СЛАУ комплекса ЛОГОС.Аэрогидромеханика локальная часть матрицы MPI-процесса дополнена строками в конце, которые соответствуют граничащим неизвестным соседних подобластей. Характеристики матриц СЛАУ пакетов ВНИИЭФ, решаемых решателями:

- вещественные, разреженные, не вырожденные, распределенные, размером N – до 10^{10} ;
- нерегулярные и регулярные, хорошо и плохо обусловленные;
- несимметричные и симметричные, не обязательно положительно определенные;
- точечные и мелкоблочные (с постоянным размером блока ненулевых коэффициентов).

Примеры решения СЛАУ в гражданских пакетах РФЯЦ-ВНИИЭФ

Далее продемонстрируем возможности решателей СЛАУ на кластере в задачах: а – аэродинамики; б – прочности; в – сжатия мишени рентгеновским излучением в лазерной установке; г – гидрогеологии и д – нефтедобычи.

В задаче аэродинамики (пакет ЛОГОС.Аэрогидромеханика) показано применение $AgAMG_mpiomp$ для решения мелкоблочной (блоки 5×5) СЛАУ (10 млн. строк, рис. 1,а) с адаптивной техникой переиспользования структур грубых матриц.

Отметим: 1) снижение потребления оперативной памяти (рис. 1,б) при замене MPI-процессов OpenMP-потоками в многоядерном вычислителе с общей памятью благодаря сокращению окаймлений; 2) повышение экономичности решения потока СЛАУ с одинаковым портретом матриц (рис. 1,в) за счет использования структуры всей пирамиды матриц от предыдущей СЛАУ⁶; 3) реше-

⁶Это соответствует пролонгации агрегирующей силы связи ячеек с одной СЛАУ на несколько следующих.

ние больших СЛАУ ($\sim 1,3 \cdot 10^9$ уравнений, рис. 2,а), с высокой эффективностью распараллеливания (не менее 92 %, рис. 2,б) на $0,5 \div 4 \cdot 10^3$ процессорных ядрах.



3D-расчет стационарных АДХ крыла: тест ONERA M6, обтекание вязким турбулентным газом, модель турбулентности – SA; расчетная сетка : $\sim 1,9$ млн. ячеек. Число неизвестных и размер СЛАУ ~ 10 млн.

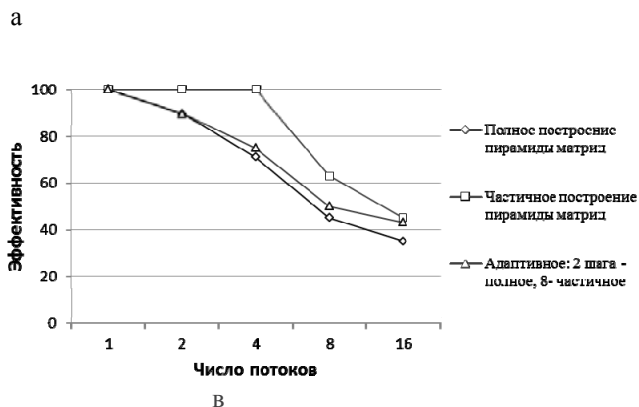
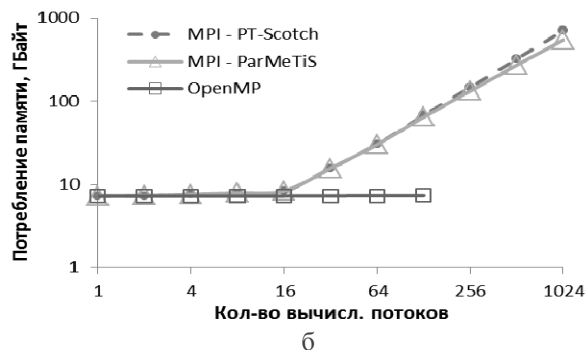


Рис. 1. Фрагмент сетки теста ONERA M6 (а), потребление памяти при использовании средств MPI и OpenMP (б) и эффективность распараллеливания при адаптивном перестроении пирамиды матриц *AgAMG* (в)

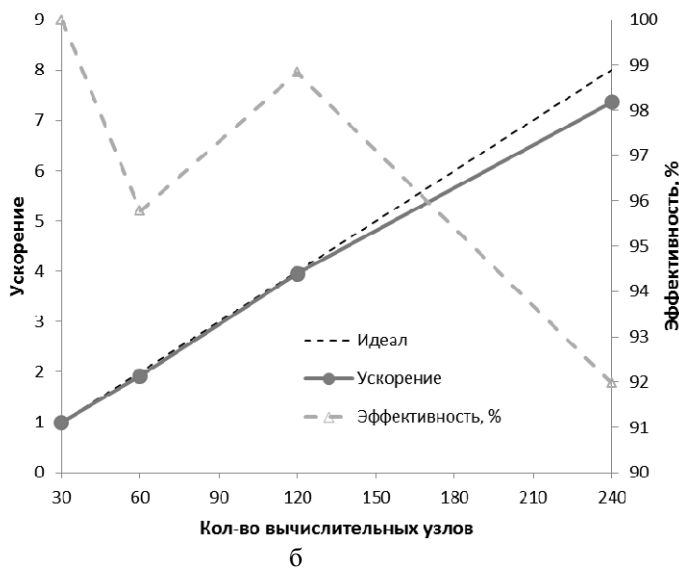
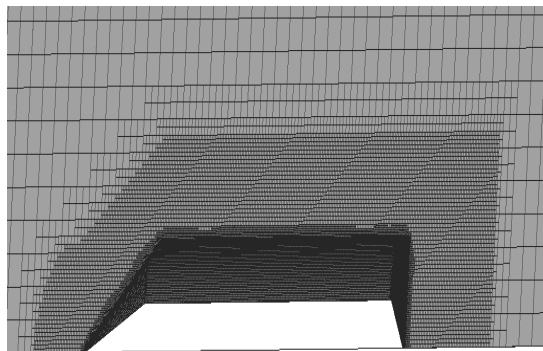
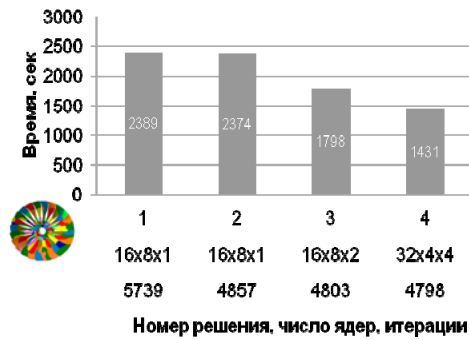


Рис. 2. Эффективность (б) решения СЛАУ большой модельной задачи турбулентного обтекания конуса с цилиндром (а) вязким сжимаемым газом. 264,5 млн. ячеек сетки с 5 неизвестными, 1,3 млрд уравнений

Задачи стационарной прочности ($\sim 10^7$ DOF, пакет ЛОГОС.Прочность, рис. 3), СЛАУ которых не решались из-за ресурсных ограничений прямым решателем Intel *CPARDISO* [9], решены итерационным решателем CG, предобусловленным методом Шварца с локальным неполным разложением *IC2*(tau1, tau2) и локальным полным разложением Intel *PARDISO*.



Линейная задача деформирования вращающегося вентилятора: 6 млн. узлов сетки, 3 неизвестных в узлах сетки, СЛАУ ~1,3 млрд. коэффициентов (декомпозиция раскрашена). Решены:

на 128 MPI × 1 нить (16node × 8mpi × 1omp):

1) *Schwartz_mpi(IC2(1e-3), ...)* × *CG_mpi(e-7)*

2) *Schwartz_mpi(PARDISO, ...)* × *CG_mpi(e-7)*

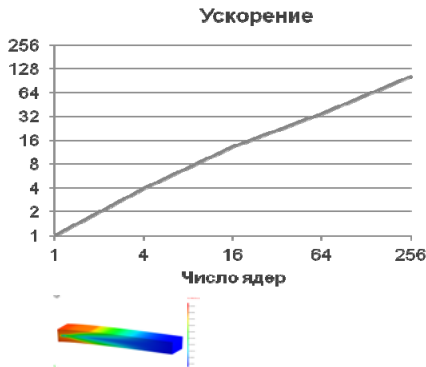
на 128MPI × 2нити (16node × 8mpi × 2omp):

3) *Schwartz_mpi(PARDISO_omp, ...)* × *CG_mpiomp(e-7)*

на 128MPI × 4нити (32node × 8mpi × 4omp):

4) *Schwartz_mpi(PARDISO_omp, ...)* × *CG_mpiomp(e-7)*

а



Уругопластическое деформирование бруса, закрепленного с левого торца и нагружаемого поверхностным давлением, приложенным к верхней грани (напряжения раскрашены). 8 решений СЛАУ до достижения статического равновесия: СЛАУ ~ 5,5 млн., число СЛАУ = 8, которые решались:

– *Schwartz_mpi(IC2(tau), ...)* × *CG_mpi(e-7)*

– на 1÷256 ядрах (1 × 16 узлов):

Количество узлов КЭ-модели: 1 828 288

Количество 6-гранных 8-узловых элем-в: 1 766 010

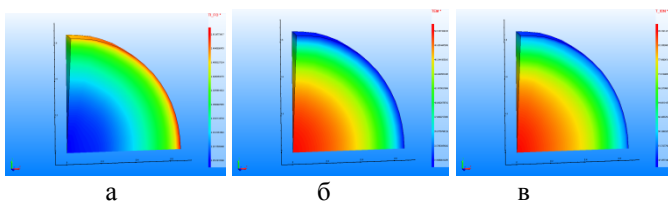
Размер прочностной СЛАУ: 5 470 080

б

Рис. 3. Решение большеразмерных модельных задач прочности вентилятора (а), бруса (б)

Отметим: 1) большие СЛАУ задачи стационарной прочности решены в параллельном многопоточном режиме, применяя Intel *PARDISO* или *IC2* в предобусловливателе Шварца.

Температуры электронов и ионов модели неравновесного излучения в задаче моделирования (связь комплексов программ САТУРН [20] и МИД [21], рис. 4, 5) обжаривания рентгеновским излучением термоядерной мишени в будущей лазерной установке УФЛ-2М рассчитываются с применением решателей СЛАУ.



– Сетка цилиндрическая: 200 строк, 200 столбцов, 30 плоскостей – 1,2 млн ячеек.

– 27-точечный шаблон.

– Считалось 19 временных шагов с постоянным шагом.

– Выполнялось 7÷15 нелинейных итераций на шаге.

Рис. 4. Распределение температур в капсуле: а – фотонов, б – электронов, в – ионов

В одной из задач испытывались следующие решатели СЛАУ:

1) *JacobiBlock_mpi (ILU0_float)*

× *BiCGStab_mpi (e-7);*

2) *Schwartz_mpi (... , cross = 4, ILU0_float)*

× *BiCGStab_mpi (e-7);*

3) *Schwartz_mpi (... , cross = 4, ILUt_float(tau = 0.001))*

× *CG_mpi (e-7);*

4) *Schwartz_mpi (... , cross = 4, IC2(tau1 = 0.01, tau2 = 0001))*

× *CG_mpi (e-7);*

5) *Schwartz_mpi (... , cross = 4, IC0_float)*

× *CG_mpi (e-7);*

на каждой итерации решались две 27-точечных СЛАУ для нахождения T_{ions} , $T_{electrons}$.

Отметим: 1) возможность предобусловливания с разной точностью (*float* – одинарной или *double* – двойной); 2) разнообразие неполных разложений, дающих возможность выбора оптимального для задачи или стадии счета; 3) ускорение решения СЛАУ с увеличением числа процессоров

в режиме строгого масштабирования (до 2500 уравнений по 27 коэффициентов на каждое процессорное ядро).

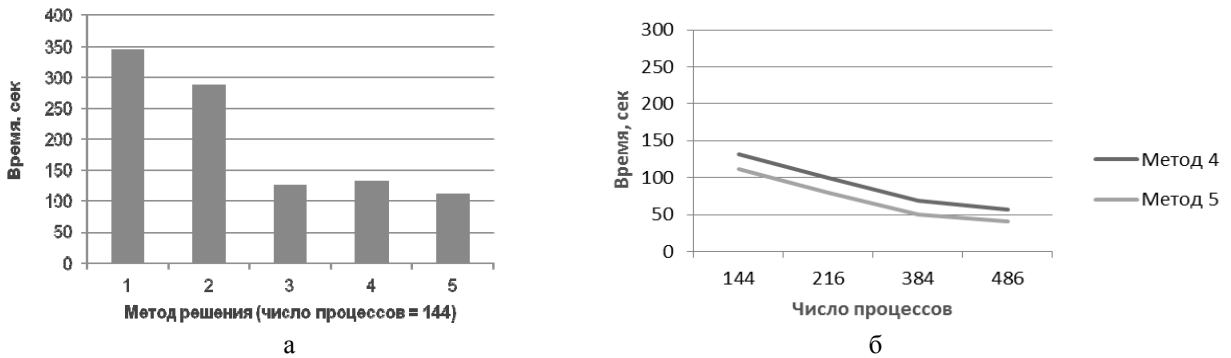


Рис. 5. Сравнение разных методов решения (а) и масштабирование наилучших в этой задаче (б)

В задаче гидрогеологии (пакет НИМФА, $\sim 10^9$ уравнений, рис. 6) показано решение на $\sim 10^4$ ядрах большой СЛАУ диффузии жидкости в пористой среде. Использовалась модель однофазной фильтрации. Тестовая задача SPE1 общества Petroleum Engineers. Решение искомое *невяно* по давлению и *явно* по насыщенности; сетка – *нерегулярная*; число ячеек – $350 \div 1100$ млн.; одна *неизвестная* в ячейке; шаг по времени (τ) – $0.01 \div 1.0$ суток.

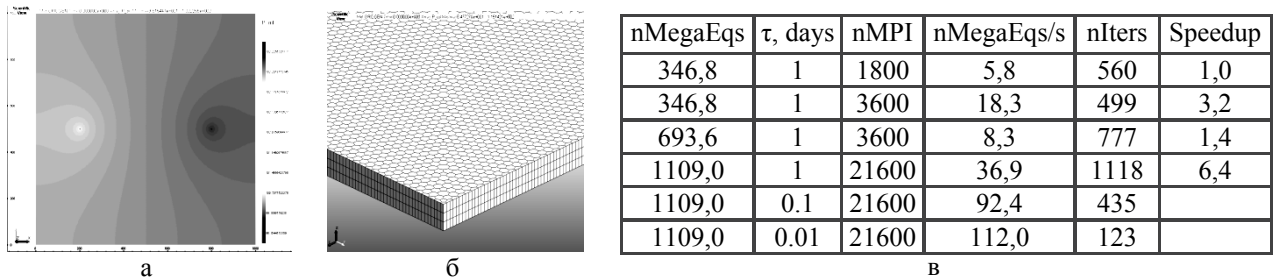


Рис. 6. Распределение давления (а), вид сетки (б), производительность (млн. уравнений/с) решения СЛАУ (в)

Здесь СЛАУ получен на первом шаге (самая трудная), использовался параллельный однопоточный решатель *JacobiBlock_mpi(ILU0_float) × BiCGStab_mpi(1e-5)* на $1800 \div 21600$ процессорных ядрах. Отметим: 1) использование одинарной точности в *ILU0* по сравнению с двойной сократило время решения на 1/4; 2) данный предобусловливатель неудовлетворительно откликается на увеличение временного шага.

Приведем также характеристики расчета дебита (табл. 2) нефтяного пласта (рис. 7) с использованием трехфазной модели, ~ 0.75 млн. уравнений.

Таблица 2

Характеристики решения СЛАУ на разном числе ядер

nCore	tExec,sec	Speedup	nNonLinIt	nLinIt	ExecTask, %
1	668.2	1	6	56	82.5
4	231.8	2.9	6	76	85.5
8	147.9	4.5	6	80	87.9
16	77.5	8.6	6	83	88.4
24	51.9	12.9	6	79	87.9

Здесь *nCore* – число ядер, *tExec* – *t* решения всех СЛАУ, *nNonLinIter* – число СЛАУ на шаге, *nLinIter* – ср. число итераций решателя, *ExecTask* – % решателя СЛАУ в задаче.

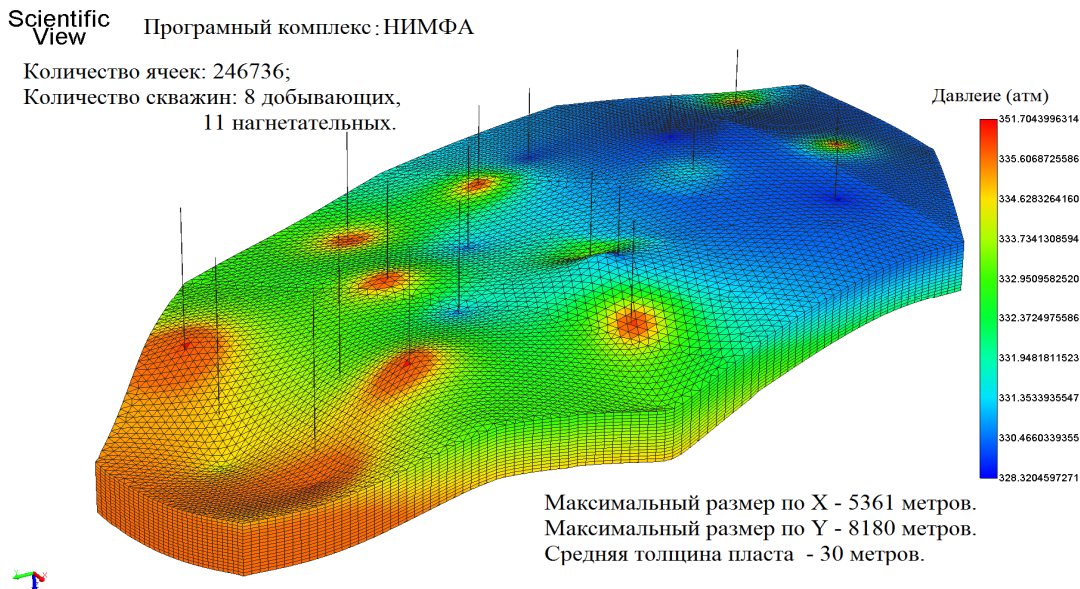


Рис. 7. Распределение давления в модели нефтяного пласта

Здесь применялся предобусловливатель Шварца с мелкоблочным *ILU0-разложением* для матриц с плотными блоками в данном случае – 3×3 , который эффективнее точечного аналога. Наблюдается хорошее распараллеливание после выхода за пределы одного узла со скачком итераций при переходе в параллельный режим.

Эксперименты по увеличению τ/h – отношения шага по времени к шагу по сетке показали, что при фиксированном $\tau = 1$ сутки уменьшение h в 14 раз по оси z (размер СЛАУ увеличился в 14 раз) повысило в 3,6 раза число линейных итераций и в 2,2 раза нелинейных итераций при решении СЛАУ с той же точностью. Примерно так же возрастает произведение линейных и нелинейных итераций при аналогичном увеличении τ на исходной сетке. Можно надеяться на уменьшение зависимости числа итераций решателя СЛАУ от числа Куранта при использовании многосеточных решателей. Время счета увеличенной задачи при переходе с 24 на 336 ядер сократилось в 12 раз, то есть, эффективность распараллеливания – 86 %.

Заключение

Как следует из изложенного, библиотека решателей СЛАУ PMLP/ParSol позволяет решать задачи в достаточно широком диапазоне физических процессов, размеров и сложности СЛАУ. В ряде задач Аэромеханики, Прочности прикладные пакеты ВНИИЭФ на идентичной с зарубежными пакетами сетке, используя неявные методы, показывают сравнимые по затратам машинных ресурсов результаты. В ряде областей моделирования и использования гибридных вычислительных систем есть над чем работать.

Литература

1. Погосян М. А., Савельевских Е. П., Шагалиев Р. М., Козелков А. С., Стрелец Д. Ю., Рябов А. А., Корнев А. В., Дерюгин Ю. Н., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В. 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. Александрова О. Л., Барабанов Р. А., Дьянов Д. Ю., Косарим С. С., Наумов А. О., Спиридонов В. Ф., Филимонкин Е. А., Циберев К. В. Пакет программ ЛОГОС. Конечно-элементная методика расчета задач статической прочности конструкций с учетом эффектов физической и геометрической нелинейности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 3. С. 3–17.

3. Бутнев О. И., Горев И. В., Колесников С. С., Кузнецов В. Ю., Пронин В. А., Сидоров М. Л., Яруллин А. Д. Полностью неявная схема решения задач трехфазной фильтрации на неструктурированных сетках в пакете программ НИМФА // Международный журнал «Вестник кибернетики». 2015, № 3 (19). С. 53–69.

4. Ерзунов В. А., Капорин И. Е., Харченко С. А., Сысоев А. В. и др. Комплекс библиотек параллельных решателей СЛАУ LParSol версии 3 // XV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. докл. Саров, 13–17 октября 2014. С. 102–110.

5. Капорин И. Е., Милукова О. Ю. Предобусловливание итерационных методов для эффективного массивно-параллельного решения систем линейных алгебраических уравнений // XIII Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. докл. Саров, 3–7 октября, 2011. С. 266–275.

6. Лашкин С. В., Силаев Д. П., Симонов П. Г. и др. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 4. С. 44–56.

7. Коньшин И. Н., Сушко Г. Б., Харченко С. А. Сквозной параллельный алгоритм построения неполного треугольного разложения второго порядка точности с динамическим выбором декомпозиции и упорядочивания // XIV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. докл. Саров, 2012. С. 110–111.

8. Капорин И. Е., Милукова О. Ю., Бартенев Ю. Г. Массивно-параллельные предобусловленные методы решения больших несимметричных разреженных СЛАУ // XV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. докл. Саров, 13–17 октября 2014. С. 76–78.

9. Intel Math Kernel Library Reference Manual [Electronic resource]. URL: Mode of Access: <http://software.intel.com/sites/products/documentation/hpc/mkl/mklman.pdf>.

10. Henson V. E., Yang U. M. BoomerAMG: a Parallel Algebraic Multigrid Solver and Preconditioner // Applied Numerical Mathematics. 2002. 41. 155–177.

11. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems // Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2003.

12. Kaporin I. E., High Quality Preconditioning of a General Symmetric Positive Matrix Based on its $U^T U + U^T R + R^T U$ -Decomposition // Numerical Linear Algebra Appl. 1998. Vol. 5. 484–509.

13. Liebmann M. Algebraic Multigrid Methods on GPU-Accelerated Hybrid Architectures. – Institute for Mathematics and Scientific Computing, University of Graz, 2011.

14. Бартенев Ю. Г., Старостин Н. В., Филимонов А. В. Многоуровневый алгоритм уменьшения ширины ленты симметрической распределенной матрицы // Системы управления и информационные технологии. 2014, № 3. 1(57). С. 116–120.

15. Капорин И. Е., Милукова О. Ю. Предобусловленный блочный итерационный метод для массивно-параллельного решения частичной обобщенной симметричной задачи на собственные значения // Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. докл. Саров, 1–5 октября 2012. С. 333–344.

16. [Electronic resource]. Mode of Access: <http://mvapich.cse.ohio-state.edu>.

17. OpenMP.Org, «OpenMP». [Electronic resource]. Mode of Access: <http://openmp.org/wp>.

18. Ерзунов В. А., Горбунов А. А. Механизм адаптивного выбора решателя в библиотеке PMLP/Parsol // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 1. С. 55–62.

19. Smith B. F., Bjorstad P. E., Gropp W. D. Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.

20. Алексеев А. В., Беляков И. М., Бочков А. И., Евдокимов В. В., Ириничев Е. П., Морозов В. Ю., Москвин А. Н., Нуждин А. А., Пепеляев М. П., Резчиков В. Ю., Сучкова В. В., Шарифуллин Э. Ш., Шемякина Т. В., Шумилин В. А. Методика САТУРН-2005. Математические модели, алгоритмы и программы решения многомерных задач переноса частиц и энергии // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 4. С. 17–30.

21. Бабанов А. В., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Ватулин В. В., Винокуров О. А., Гречишкина И. Н., Змушко В. В., Измайлова Т. Б., Митрофанов Е. И., Рябикина Н. А., Шамраев Б. Н. Методика МИМОЗА-НДЗД. Расчет трехмерных задач спектрального переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 2. С. 64–72.

ПОДСИСТЕМА ДЛЯ ОБРАБОТКИ НЕСЕТОЧНЫХ ДАННЫХ ПО ЗАДАЧЕ И ЕЕ ИНТЕГРАЦИЯ В КОМПЛЕКС ЛОГОС

*М. В. Артамонов, С. В. Величко, В. И. Дерюгин, Н. А. Захарова,
Н. А. Мустаева, А. А. Резяпов*

Российский Федеральный Ядерный Центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

В рамках работ по созданию и внедрению отечественного базового программного обеспечения для комплексного имитационного моделирования на супер-ЭВМ во ВНИИЭФ ведется разработка программного комплекса ЛОГОС. Комплекс состоит из различных прикладных программных пакетов для моделирования физических процессов и препостпроцессора «ЛОГОС.ПреПост», который является интерактивным интерфейсом для подготовки расчетной модели, управления счетом и анализа результатов.

Функционально работу пользователя в комплексе (процесс имитационного моделирования) можно разделить на три этапа: подготовка расчетной модели, проведение расчета, обработка результатов расчетов.

Для задания и сопровождения расчета математической задачи необходимы не только данные распределенные на расчетной сетке, но и данные, не привязанные к расчетной сетке, необходимые для задания параметров математической модели и тактики проведения расчета. Например, блок управления счетом, наборы констант (уравнения состояния веществ, константы кинетики), список счетных процессов и их параметров и т. д. Такие компоненты (или **объекты**) представляют собой целостные, логически связанные данные и так же, как и сеточные данные, **нуждаются в сохранении и обработке**. Данный доклад посвящен решению этой задачи.

Так как комплекс ЛОГОС объединяет различные прикладные пакеты и общий препостпроцессор, то необходимо обеспечить интерфейс для обмена данными между ними. В настоящее время есть два основных подхода к созданию файлового интерфейса:

- использование известных форматов (k, yaml, xml, и т. д.);
- разработка своего формата хранения.

Первый подход уже используется, однако, с ростом требований к математическим моделям, известные форматы перестали удовлетворять ряд методик.