

УДК 004.021

Алгоритм автоматической балансировки нагрузки для параллельных расчетов материалов в экстремальных условиях методами частиц

С. А. Дьячков<sup>1,2</sup>, М. С. Егорова<sup>1</sup>, С. А. Мурзов<sup>1,2</sup>, А. Н. Паршиков<sup>1</sup>, В. В. Жаховский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л.Духова

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

Методы частиц с близким взаимодействием широко применяются для моделирования материалов. К ним относятся, в частности, метод молекулярной динамики (MD) и бессеточный лагранжевый метод сглаженных частиц в гидродинамике (SPH). Эти подходы позволяют эффективно решать задачи со сложной границей и сильно неравномерным распределением плотности, которые зачастую возникают в экстремальных условиях. Тем не менее, применение известных алгоритмов параллелизации расчетов [1] для этих задач приводят к плохому балансу вычислительных ресурсов, так как не учитывают особенностей нестационарных процессов. Для решения этой проблемы мы разработали высокоэффективный программный комплекс, используя динамическую декомпозицию моделируемых образцов между вычислительными единицами с помощью областей Вороного. Этот алгоритм балансировки нагрузки был впервые представлен в [2] для расчетов методом молекулярной динамики, а в данной работе он демонстрируется на примере контактного метода SPH [3].

Предлагаемый алгоритм определяет разбиение моделируемого образца на области Вороного, каждая из которых обрабатывается соответствующей вычислительной единицей (CU – computational unit). В зависимости от реализации CU может быть представлена как вычислительным узлом суперкомпьютера, так и одним процессорным ядром. В ходе расчета для каждой CU измеряется нагрузка как отношение времени непосредственного расчета взаимодействия между частицами к полному времени работы на шаг интегрирования (включая время на коммуникации между CU). Алгоритм задает движение центров областей Вороного соответствующих менее загруженным CU в сторону более загруженных, что приводит к перераспределению частиц между областями и выравниванию нагрузки. Таким образом, уменьшается время ожидания межпроцессорных коммуникаций, и, в итоге, уменьшается время всего моделирования. Наша программа показывает высокую эффективность в моделировании потоков вещества с сильными изменениями формы и неоднородностями (Рис 1). Мы также приводим тесты, показывающие практически идеальное сильное масштабирование для систем с количеством частиц до  $10^8$ , распределенными между  $10^3$  CU.

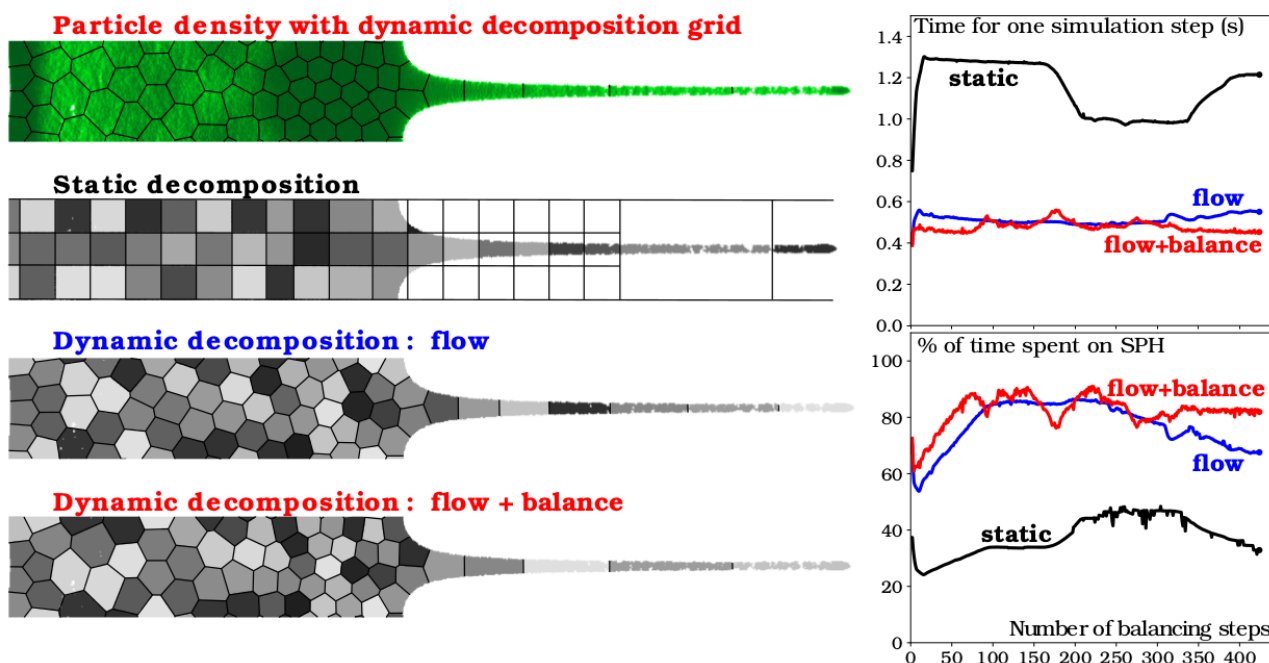


Рис. 1. Образование кумулятивных струй при выходе ударной волны на гофрированную поверхность образца для различных вариантов декомпозиции: статической, динамической и динамической с балансировкой нагрузки. В последнем случае наблюдается наиболее эффективное использование вычислительных ресурсов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 16-38-00925.

#### Литература

1. G. Oger, D. Le Touzé, D. Guibert [*et al.*] On distributed memory MPI-based parallelization of SPH codes in massive HPC context // *Comp. Phys. Comm.*, – 2016. – V. 200, – P. 1–14.
2. V. Zhakhovskii, K. Nishihara, Y. Fukuda [*et al.*] A new dynamical domain decomposition method for parallel molecular dynamics simulation on grid // *IEEE Proceeding of the 5th International Symposium on Cluster Computing and Grid*, – 2005. – V. 2, – P. 848–854
3. A. N. Parshikov, S. A. Medin, Smoothed particle hydrodynamics using interparticle contact algorithms // *J. Comp. Phys.*, – 2002. – V. 180(1), – P. 358–382.