

Библиотека XAMG для решения систем уравнений со многими правыми частями

Б.И. Краснопольский, А.В. Медведев
НИИ механики МГУ

Моделирование несжимаемых турбулентных течений сопряжено с необходимостью решения уравнения Пуассона для давления с целью обеспечения бездивергентности поля скорости. Данный этап занимает существенную часть времени расчета, и эффективная реализация соответствующих численных методов востребована при моделировании турбулентных течений.

Представленная в докладе библиотека XAMG предназначена для решения больших разреженных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Данная библиотека содержит реализацию набора итерационных методов решения СЛАУ, широко используемых для решения эллиптических уравнений, а именно: набор методов подпространства Крылова, классический алгебраический многосеточный метод (на основе библиотеки hupre), метод итераций Чебышева, Якоби и Гаусса-Зейделя. Отличительной особенностью библиотеки является возможность решения СЛАУ со многими правыми частями, что может быть актуально, в том числе, при одновременном моделировании нескольких реализаций турбулентного течения с последующим осреднением по ансамблю [1]. Исходя из предполагаемого предназначения библиотеки для моделирования турбулентных течений, когда СЛАУ с неизменной матрицей решается многократно, в ходе разработки был сделан акцент на эффективную реализацию только «solve»-части методов, тогда как для однократного построения иерархии матриц используется библиотека hupre.

Библиотека XAMG реализована на языке C++ и основана на стандарте C++11. Дополнительно разработан API сопряжения для вычислительных кодов, реализованных на языке C. В коде предусмотрена поддержка гибридного трехуровневого распараллеливания на основе модели программирования MPI+POSIX shared memory, что позволяет учесть особенности NUMA-архитектуры. В коде реализован ряд специфических оптимизаций, таких как: возможность использования смешанной точности, сжатие целочисленных типов представления индексов матриц, флаги нулевых векторов, векторизация вычислений по правым частям, и ряд других. Указанные оптимизации позволяют существенно превзойти показатели библиотеки hupre как с точки зрения производительности в пределах одного узла, так и результаты сильной масштабируемости.

Исходный код библиотеки XAMG под лицензией GPLv3 доступен по адресу <https://gitlab.com/xamg/xamg>

1. Krasnopolsky B. An approach for accelerating incompressible turbulent flow simulations based on simultaneous modelling of multiple ensembles // Computer Physics Communications, 229, p. 8-19, 2018