



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

# ОТКРЫТАЯ ПЛАТФОРМА CABARET-RS

**В.М. Головизнин**

**А.А. Канаев**

**А.В. Соловьев**



# CABARET REVOLVE STAGE



1. Уравнения Навье-Стокса в приближении слабой сжимаемости
2. То же с теплопроводностью (приближение Буссинеска)
3. Уравнения Эйлера для идеального газа
4. Уравнения Навье-Стокса для многокомпонентного идеального газа
5. ...



# СВОЙСТВА СХЕМЫ КАБАРЕ

- Явная
- Устойчива при  $0 \leq CFL \leq 1$
- Дает точное решение при  $CFL=0.5$ ,  $CFL=1$
- Второй порядок аппроксимации на неравномерных пространственно – временных сетках
- Консервативная
- Обладает однопараметрическим семейством квадратичных законов сохранения
- Бездиссипативна
- Имеет максимально компактный вычислительный шаблон
- Минимальные дисперсионные ошибки
- Прямое использование принципа максимума для нелинейной коррекции потоков
- Отсутствие настроечных параметров



## ХАРАКТЕРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ РАСЧЕТА

- Размер сетки:  $10^6$ - $10^9$  ячеек
- Число шагов:  $10^6$ - $10^8$  шагов

Необходимость использования массивных параллельных вычислений



Компания «Т-Платформы» [заключила контракт](#) с МГУ на проектирование вычислительного кластера пиковой производительностью 10 Пфлопс (10<sup>15</sup> операций с плавающей точкой в секунду). Эта система станет одной из самых мощных в мире. На сегодняшний день в списке [Топ500](#) лидирует японский суперкомпьютер K, с максимальной производительностью 10,51 Пфлопс (пиковая — 11,28 Пфлопс), на втором месте — китайский «Тяньхэ-1А» (2,57/4,7 Пфлопс).

В июне 2014 года в МГУ смонтирована первая стойка суперкомпьютера Ломоносов – 2 производительностью в 430 терабайт (алфа класс).

Через два – три года суперкомпьютеры петафлопсного класса будут доступны ведущим проектно – конструкторским организациям Росатома. Петафлопсные вычислительные системы позволят решать задачи с т.н. критическим порогом точности, недоступные ранее.



- Построение сеток в 3D областях со сложной геометрией
- Распараллеливание сеток на большое число процессоров
- Поддержка параллельности вычислений
- Визуализация результатов расчетов
- Постпроцессорная обработка результатов
- Управление хранением больших массивов информации



- Шина данных: стандартизация формата хранения информации, «шинный» доступ к информации для всех модулей платформы
- Максимальное использование существующих программ в качестве модулей платформы
- Максимальное использование открытого ПО
- Использование существующих библиотек высокого уровня для поддержки параллельных вычислений



- Операционная система Linux
- Библиотеки MPI и OpenMP
- HDF - Hierarchical Data Format technologies
- Interoperable Technologies for Advanced Petascale Simulations (ITAPS)  
[Department of Energy's Scientific Discovery through Advanced Computing \(SciDAC\)](#)
- MOAB (The Mesh-Oriented database)





HDF 5 – это комплект уникальных технологий, позволяющий оперировать экстремально большими массивами данных со свехсложной структурой.

Он включает в себя:

- Универсальную модель данных, позволяющую описывать очень сложные структуры данных и широкое разнообразие метаданных.
- Полностью переносимый формат хранения данных, без каких либо ограничений на число или размер информационных объектов.
- Библиотеку программ, адаптированную на все компьютерные платформы от ноутбуков до многопроцессорных вычислительных комплексов и программный интерфейс с алгоритмическими языками высокого уровня, такими как C, C++, Fortran 90 и Java.
- Богатый набор встроенных утилит, позволяющих проводить оптимизацию времени доступа и объема используемой компьютерной памяти.
- Инструменты и приложения для организации, обработки, визуализации и анализа данных.

Модель данных, формат файла, интерфейс программного приложения, библиотека и утилиты являются открытыми и распространяются бесплатно. Работы по формату HDF5 ведутся в National Center for Supercomputing Applications (NCSA) [1] с 1987 года.



## Interoperable Technologies for Advanced Petascale Simulations (ITAPS)

**ITAPS** – центр осуществляет координацию работ нескольких университетов и лабораторий департамента энергетики США и финансируется по SciDAC программе. Основной целью проекта ITAPS является разработка технологий, позволяющих максимально облегчить прикладным математикам и программистам работу с сеточными данными при переходе к суперкомпьютерам петафлопсного класса. Это достигается развитием общего функционального интерфейса к геометрии, сеткам и другим данным, необходимым для компьютерного моделирования.

В рамках **ITAPS** разрабатываются следующие интерфейсы и компоненты, которые их используют:

- **CGM (Common Geometry Module)**
- **MOAB (The Mesh-Oriented database)**
- **Lasso**
- **MeshKit**
- **PyTAPS**



- [MOAB](#): (The Mesh-Oriented database) представляет собой библиотеку для работы со структурированными и неструктурированными расчетными сетками и задаваемыми на них массивами физических величин. MOAB оперирует со всеми типами конечных элементов, многоугольниками и многогранниками. Модель данных, реализованная в MOAB, проста, и, в то же время достаточна для работы с основными типами метаданных, связанных с расчетными сетками (граничными условиями, топологическими особенностями, разбиением на процессоры и т.д.). MOAB использует интерфейс ITAPS [iMesh](#).



# Свободное программное обеспечение

## SALOME

(<http://www.salome-platform.org/>)

- Открытая платформа для пре- и пост-процессинга при численном моделировании.
- В основе лежит технология OpenCascade (CATIA)
- Важно для пользователя — есть возможность работы с геометрией как в коммерческих пакетах
- Важно для программиста — полностью изменяемая, модульная архитектура

**SALOME**  
The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation

cedi edf CASCADE

HOME NEWS DOWNLOADS SERVICE AND SUPPORT ECO-SYSTEM FORUM USER SECTION ABOUT SALOME CONTACTS EVENTS

You are here: Home [Log in](#) [Register](#)

**NAVIGATION**

- News
- Downloads
- Service and Support
- Eco-System
- Forum
- User Section
- About SALOME
- Contacts
- Events

Login Name

**»» What is SALOME?**

**SALOME is an open-source software** that provides a generic platform for Pre- and Post-Processing for numerical simulation. It is based on an open and flexible architecture made of reusable components.

SALOME is a cross-platform solution. It is distributed as open-source software under the terms of the GNU LGPL license. You can download both the source code and the executables from this site.

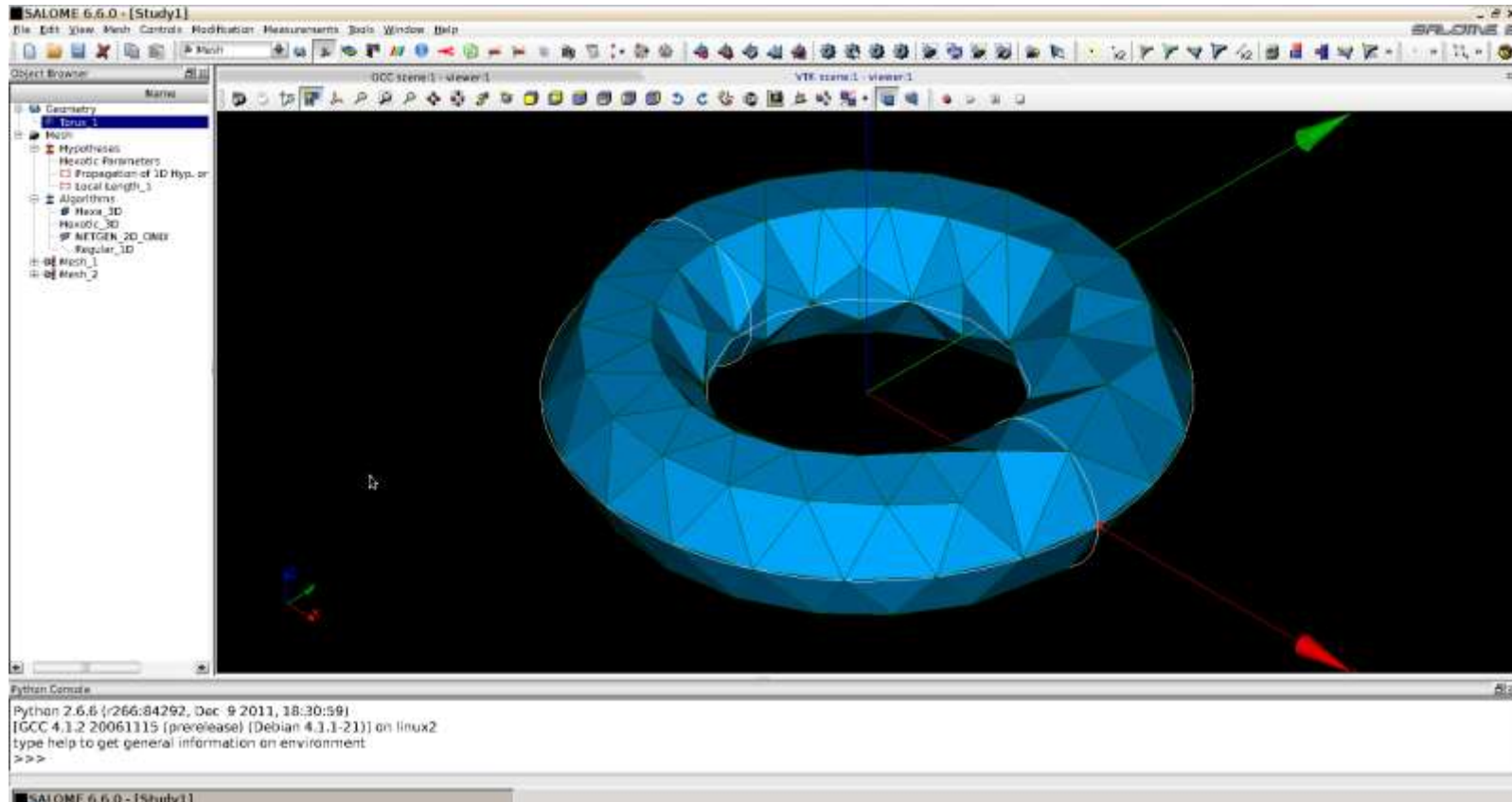
**»» How SALOME can be used?**

SALOME can be used as **standalone application** for generation of CAD models, their preparation for numerical calculations and post-processing of the calculation results.

SALOME can also be used as a **platform for integration** of the external third-party numerical codes to produce a new application for the full life-cycle management of CAD models.



# SALOME GUI





## Свободное программное обеспечение

Пакет **ParaView** (<http://www.paraview.org/>) разрабатывается компанией KitWare (<http://www.kitware.com/>) и предназначен для визуализации больших массивов данных, в том числе, с привлечением парадигмы параллельных вычислений.

**ParaView** is an open-source, multi-platform data analysis and visualization application. ParaView users can quickly build visualizations to analyze their data using qualitative and quantitative techniques. The data exploration can be done interactively in 3D or programmatically using ParaView's batch processing capabilities.

ParaView was developed to analyze extremely large datasets using distributed memory computing resources. It can be run on supercomputers to analyze datasets of terascale as well as on laptops for smaller data.

**News** [More News >](#)

**03.15.2011** NASA Awards Kitware Contract to Develop ParaView for Ultrascale Visual...

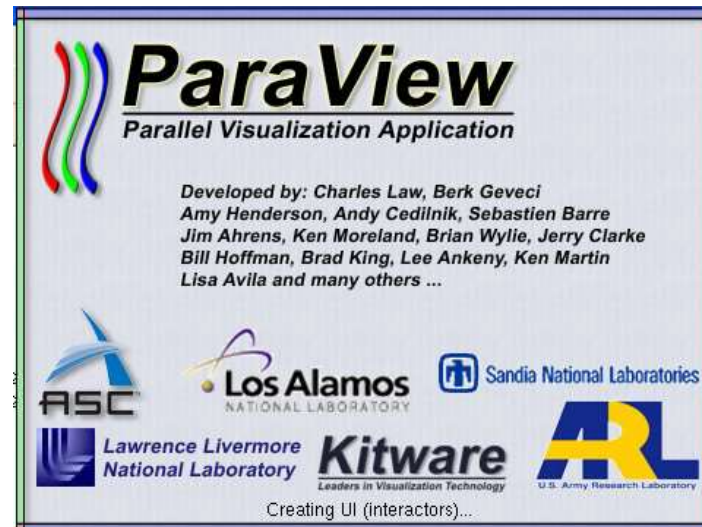
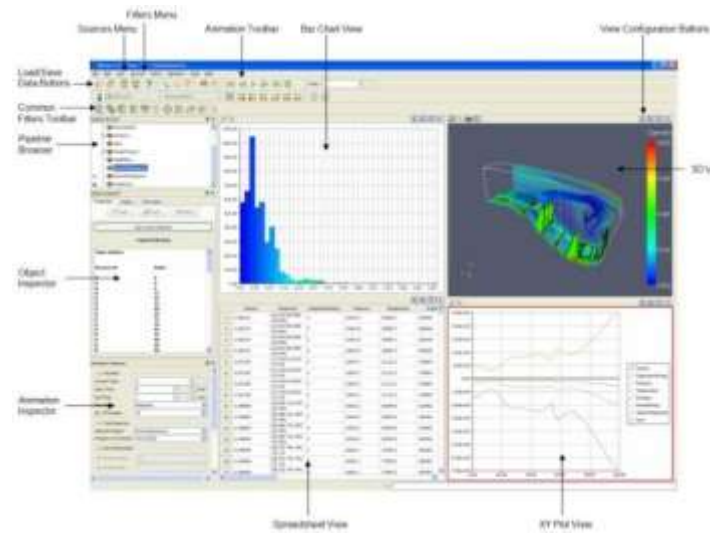
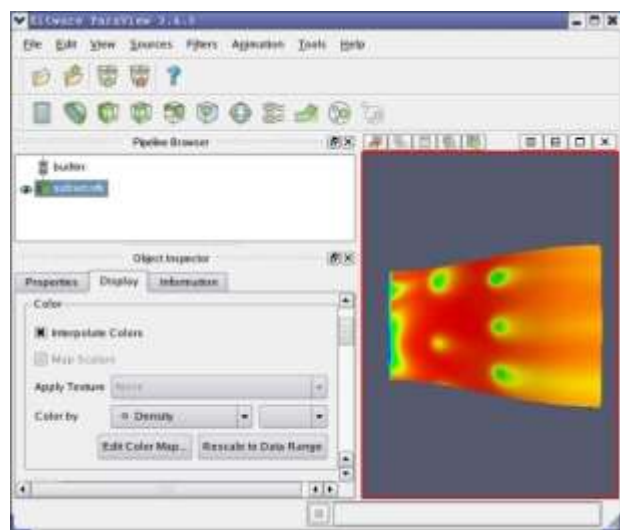
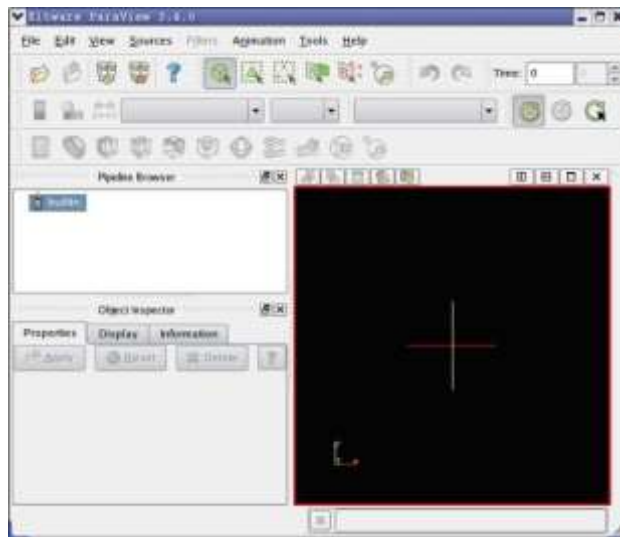
Kitware receives HPCwire's Editors' & Readers' Choice awards for ParaView. Thank you to the global ParaView community for contributing to its success!

**HPCwire** Readers' Choice Awards 2010

**HPCwire** Editors' Choice Awards 2010

[Download](#)





- Multi-view support
- Quantitative analysis
- Undo/redo Python scripting
- Time support
- Plot styles
- Plugins
- Model/View
- Representation/
- Display:
- Stream Lines/Vector Fields
- Contours/isosurfaces
- XY Plots
- Animation
- Parallel processing
- Documentation



## Основные положения концепции создания версий CABARET-RS

Массивный параллелизм и максимальное использование открытого программного обеспечения.

Использование «шины данных», базирующейся на формате файлов HDF5

Гексагональные неструктурированные расчетные сетки, адаптируемые к границам области

Обмен между расчетными ячейками только через грани

Гибридные LES-RANS алгоритмы для вычислительной гидродинамики, исключение итераций, явные схемы

Расчетно – технологические цепочки



# Шина данных ПЕРСОНАЛЬНОГО КОМПЬЮТЕРА



<http://yourlib.net/content/view/12652/150/>

- **Единый стандарт** передачи данных по шине
- Управление шиной позволяет **идентифицировать** передаваемую информацию и определять источник или назначение информации
- Устройства, не поддерживающие стандарт шины присоединяются через **контроллеры**

# MOAB

## MBPART

Zoltan

Parmetis

CABINIT

CABBOUND



## .h5m

.msh → .h5m

.cub → .h5m

.cgns → .h5m

.h5m → .plt

.h5m → .vtk

Fluent

CUBIT

Salome

TecPlot

Visit



# Использование MOAB (высокоуровневое)

```
Core *mb = new Core();  
ParallelComm* pcomm = new ParallelComm(mb, MPI_COMM_WORLD);
```

Создание корневого класса MOAB  
Создание параллельного интерфейса

```
mb->load_mesh(fileName);
```

Чтение сетки с тегами из файла

```
Tag U;  
mb->tag_get_handle("U", 1, MB_TYPE_DOUBLE, U);
```

Доступ к тегам (по имени тега)

```
moab::Range cells;  
mb->get_entities_by_dimension(0, 3, cells);
```

Получение всех ячеек,  
размещенных на данной нити

```
for (moab::Range::iterator it = cells.begin(); it != cells.end(); it++) {  
    EntityHandle cell = *it;  
  
    double u;  
    mb->tag_get_data(U, &cell, 1, &u);  
    .....  
    mb->tag_set_data(U, &cell, 1, &u);  
}
```

Цикл по всем ячейкам  
Получение хендлера ячейки

Чтение переменной u из тега

Запись переменной u в тег

```
result = pcomm->exchange_ghost_cells(3, 2, 1, 2, true);
```

Обмен общими ячейками  
между нитями

```
mb->store_mesh(fileName);
```

Запись сетки с тегами в файл



# Использование MOAB (низкоуровневое)

```
Core *mb = new Core();  
ParallelComm* pcomm = new ParallelComm(mb, MPI_COMM_WORLD);
```

Создание корневого класса MOAB  
Создание параллельного интерфейса

```
mb->load_mesh(fileName);
```

Чтение сетки с тегами из файла

```
Tag U;  
mb->tag_get_handle("U", 1, MB_TYPE_DOUBLE, U);
```

Доступ к тегам (по имени тега)

```
moab::Range cells;  
mb->get_entities_by_dimension(0, 3, cells);
```

Получение всех ячеек,  
размещенных на данной нити

```
double *u;  
mb->tag_iterate(U, cells.begin(), cells.end(), nCells, (void*)&u);
```

Получение прямого доступа к  
памяти тега

```
for (int i=0; i<nCells; i++) {  
    ... = u[i];  
    .....  
    u[i] = ...;  
}
```

Цикл по всем ячейкам  
Чтение переменной u из тега

Запись переменной u в тег

```
result = pcomm->exchange_ghost_cells(3, 2, 1, 2, true);
```

Обмен общими ячейками  
между нитями

```
mb->store_mesh(fileName);
```

Запись сетки с тегами в файл

# MOAB

## MBPART

Zoltan

Parmetis

CABINIT

CABBOUND



## .h5m

.msh → .h5m

.cub → .h5m

.cgns → .h5m

.h5m → .plt

.h5m → .vtk

Fluent

CUBIT

Salome

TecPlot

Visit

# MOAB

## MBPART

Zoltan

Parmetis

CABINIT

CABBOUND



## .h5m

.msh → .h5m

.cub → .h5m

.cgns → .h5m

.h5m → .plt

.h5m → .vtk

Fluent

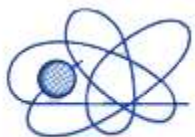
CUBIT

Salome

TecPlot

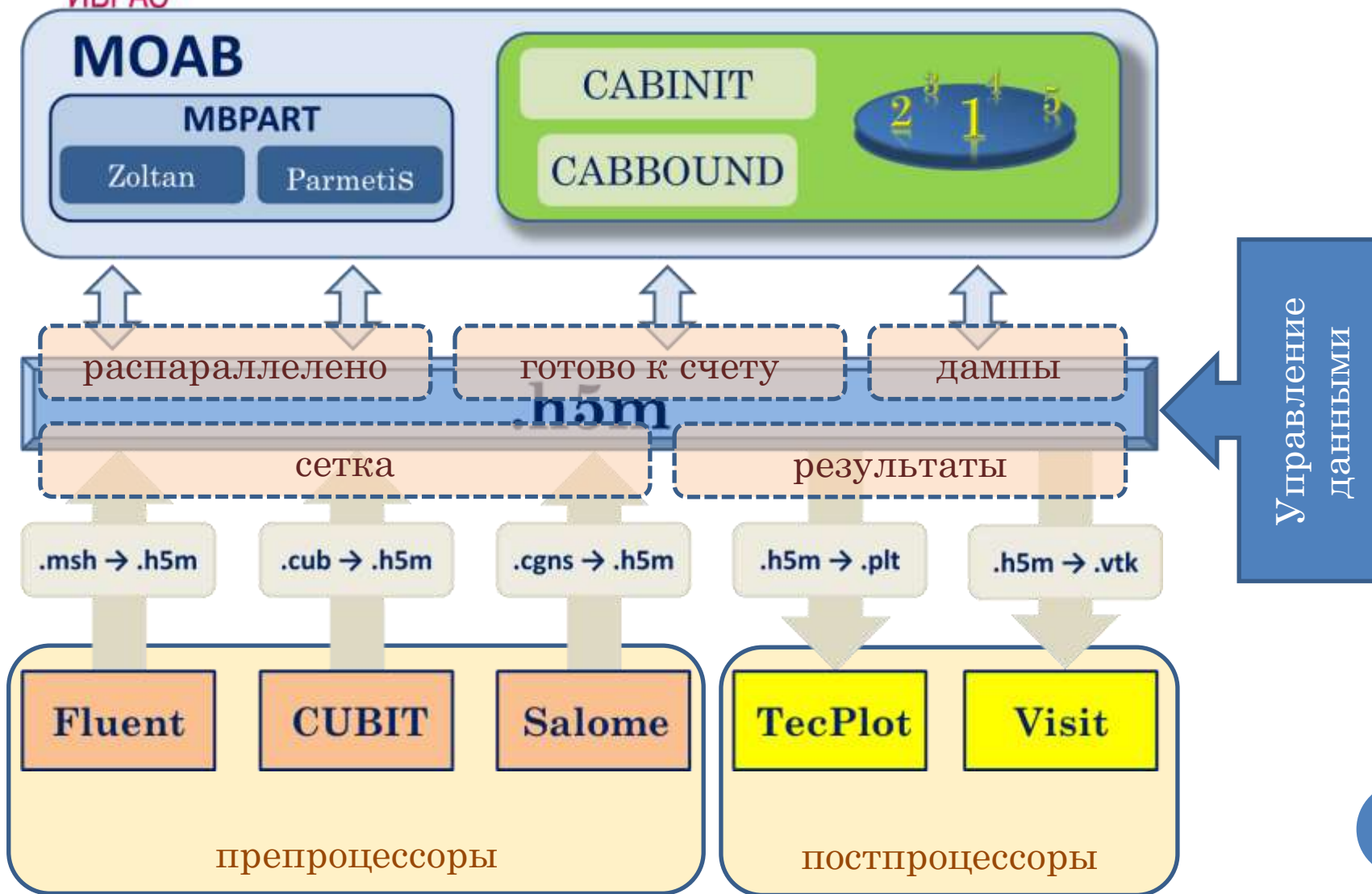
Visit





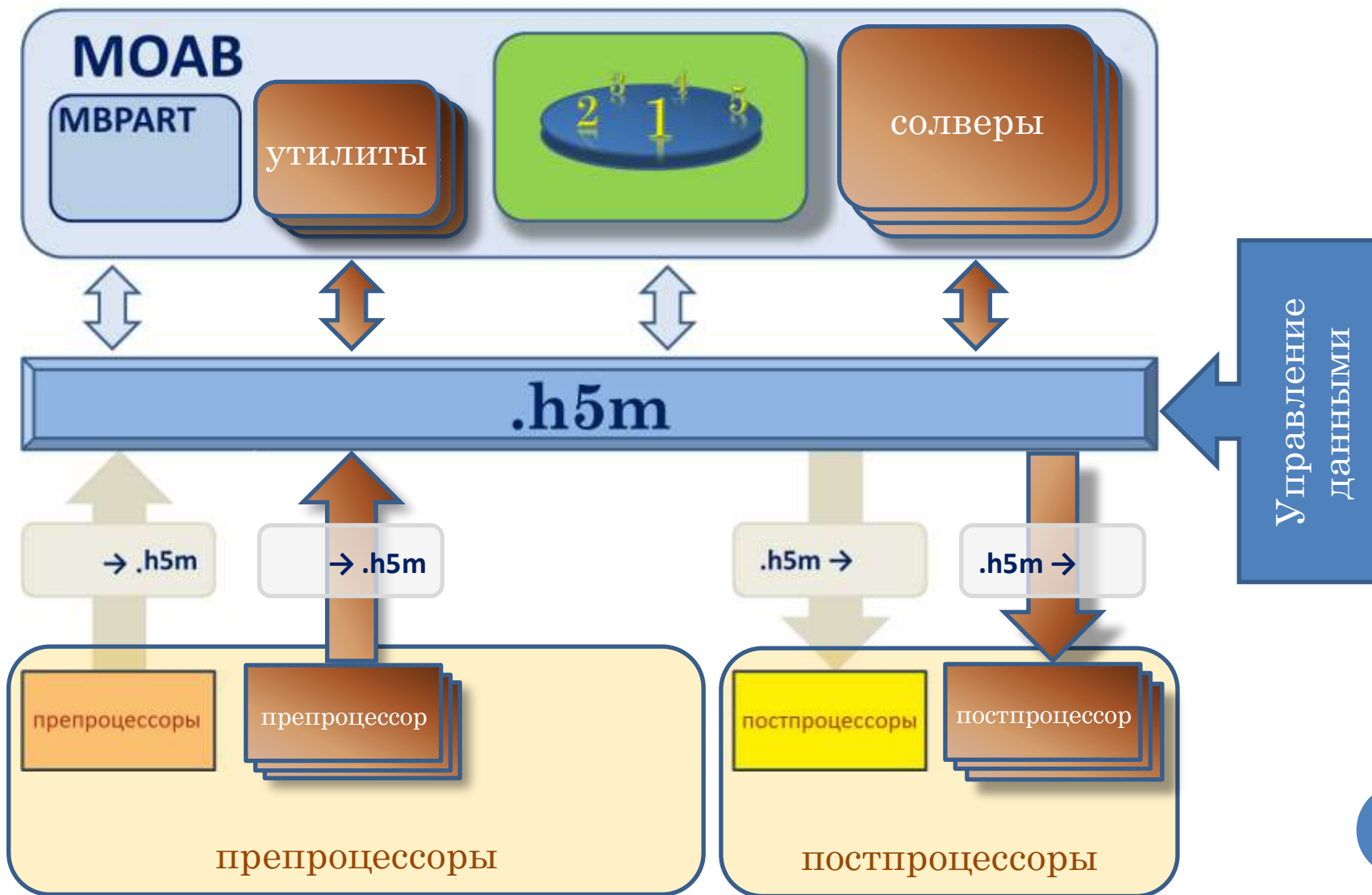
ИБРАЭ

# Открытая CABARET-RS





# Открытая ПЛАТФОРМА CABARET-RS

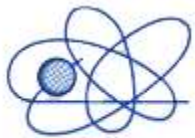






## Выводы

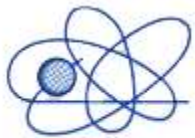
- Платформа CABARET-RS предоставляет возможность использовать пре-, постпроцессоры и другое ПО, не ограниченное коммерческими лицензиями
- Использование формата H5M, основанного на стандарте HDF5, позволяет удобно и эффективно оперировать с большими массивами данных
- Использование MOAB в качестве ядра системы позволяет автоматизировать низкоуровневые вопросы параллельной обработки данных
- Платформа CABARET-RS предоставляет возможность сконцентрировать усилия разработчиков на самом важном направлении
- Платформа CABARET-RS является открытой для использования с различными наборами солверов, утилит, пре- и постпроцессоров



ИБРАЭ

## АНКЕТА 1/2

Название кода	CABARET-RS
Общие цели кода	Нацеленность на промышленные задачи ядерной безопасности
Отчуждаемость	нет
Что моделируется	Слабосжимаемая жидкость, идеальный газ Дозвук, сверхзвук Многокомпонентный газ
Модели	Эйлер, Навье-Стокс
Сетки	Неструктурированные гексагональные
Собственный генератор сеток	нет
Пре- и постпроцессор	Нет (реализованы модули задания граничных и начальных данных)
Численные методы	Конечно-разностная явная схема КАБАРЕ, 2-й порядок точности по времени и пространству



ИБРАЭ

## АНКЕТА 2/2

Распараллеливание	MPI
Число процессорных ядер	1-...
Гетерогенные вычисления	нет
Достигаемый процент от пика	?
Тестирование	Ручное тестирование при выпуске релиза.
Ведение документации	Задание на программирование, документирование кода при выпуске релиза
Средства разработки	Eclipse, GIT
Язык кода	C++
Текущее состояние разработки	ОКР



В.М. Головизнин



В. Кондаков



А. Зайцев



В. Глотов



А. Канаев



А.В. Соловьев



М.А. Зайцев



Д. Асфандияров



С. Карабасов



А. Данилин



С.А. Финогенов



А. Рязанов



И. Короткин



**СПАСИБО ЗА  
ВНИМАНИЕ!**