УДК 519.6

МЕТОДИКА РАМЗЕС-КП НА ГИБРИДНЫХ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЭВМ С ГРАФИЧЕСКИМИ УСКОРИТЕЛЯМИ

А. Н. Быков, Д. Г. Гордеев, В. Г. Куделькин, Е. А. Сизов, А. А. Фёдоров
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Дается описание программной реализации методики РАМЗЕС-КП (уравнения газовой динамики с учетом теплопроводности) для гибридной параллельной ЭВМ, содержащей универсальные процессоры и графические ускорители. Приведены результаты профилирования программ и их оптимизации. Представлены значения эффективности распараллеливания, достигнутые применением однородной многопроцессорной ЭВМ (содержащей только универсальные процессоры) и гибридной ЭВМ на одинаковых задачах.

Ключевые слова: РАМЗЕС-КП, графические ускорители, арифметические ускорители, GPU, ускорение, распараллеливание, MPI, эффективность, неявная газовая динамика, теплопроводность.

Введение

Эйлерово-лагранжева методика РАМЗЕС-КП предназначена для численного решения двумерных и трехмерных нестационарных задач газовой динамики с учетом теплопроводности [1]. Характерной ее чертой является использование параллельных вычислений. Поэтому при появлении нового типа параллельных ЭВМ — гибридных систем, содержащих универсальные процессоры и графические ускорители (GPU), стала актуальной задача адаптации методики для проведения расчетов на таких ЭВМ.

Данная методика, аналогично другим [2—6], обладает особенностями, которые затрудняют ее реализацию на гибридной архитектуре. Среди таких особенностей — наличие смешанных ячеек, содержащих несколько веществ, использование неявных разностных схем при решении как уравнения теплопроводности, так и системы уравнений газовой динамики, использование метода расщепления по направлениям.

В процессе адаптации понадобилось существенное изменение текстов программ газовой динамики и теплопроводности. Некоторые программы были переписаны полностью с изменением алгоритма. Кроме переработки практически всех модулей газовой динамики и теплопроводности, была реализована связь с библиотекой УРС-ОФ [7, 8] (библиотека предназначена для расчета уравнений состояний (УРСов) и пробегов фотонов в веществе) и разработан метод решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) трехдиагонального вида при использовании нескольких GPU [9].

Применимость и эффективность адаптированной методики подтверждаются результатами численных экспериментов по исследованию точности и эффективности распараллеливания.

Реализация программ на GPU

Адаптация методики РАМЗЕС-КП была начата с профилирования ее программ, которое показало, что в методике нет "горячих пятен", т. е. нельзя получить высокое ускорение за счет переписывания только некоторых программ. Это проиллюстрировано на рис. 1. Данный рисунок оценивает ускорение на GPU, которое можно было бы получить, если бы удалось часть кода распараллелить на GPU с эффективностью 100 %. По горизонтальной оси откладывается процент идеально распараллеленного на GPU кода (100 % — это количество строк во всех программах методики, которые участвовали в профилировании), а по вертикальной — время выполнения программ методики после ускорения в

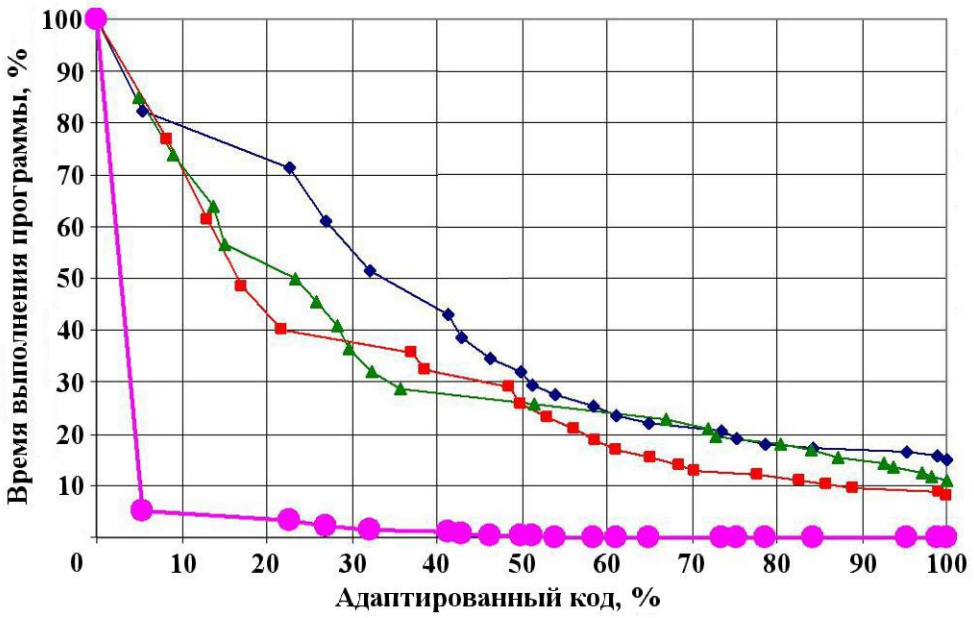

Рис. 1. Анализ трудозатрат для адаптации к счету на гибридных ЭВМ: —♦— — тест 1; —■— — тест 2; —▲— — тест 3; —●— — пример "горячего пятна"

процентах от времени их выполнения в первоначальной версии. Идеальное распараллеливание означает, что адаптированный код ускоряет время расчета тестовой задачи* в бесконечное число раз, т. е. сводит это время к нулю. Из графика видно, что для ускорения на 70 % необходимо переписать около 50 % кода. При ярко выраженном "горячем пятне" этот график имел бы более сильный прогиб и находился бы около осей координат.

Таким образом, результаты профилирования показали, что необходима переработка всех программ методики.

Распараллеливание программ было проведено в основном поточечным методом, т. е. каждая точка рассчитывается отдельной нитью. В этом заключается вся трудность адаптации программ. Необходимо было отказаться от циклов по расчетным точкам и внутренних *зацеплений* (ситуаций, когда значения некоторых величин брались с предыдущей итерации цикла). В ряде случаев пришлось пойти на дублирование вычислений, например при расчете объема потока вещества через грань: каждая нить обрабатывает каждую точку независимо от остальных и рассчитывает поток самостоятельно.

Вся счетная нагрузка отдана GPU, центральные процессоры (ЦП) в основном используются лишь для обмена сообщениями между MPI-процессами и при выполнении прогонок. Перед MPI-обменами между ЦП необходимо произвести обмен данными между ЦП и GPU. Ускорители логически связаны с ядрами ЦП так, чтобы каждый GPU работал только с одним ядром ЦП (рис. 2). Таким образом, остальные ядра ЦП остаются свободными и могут быть привлечены для других задач.

Для реализации метода прогонки, используемого для нахождения решения систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей на нескольких GPU, был взят метод распараллеливания прогонки, предложенный Н. Н. Яненко [10].

Для хранения информации о смешанных ячейках (содержащих несколько веществ), поскольку их количество, как правило, не превышает 10 % всего размера задачи, в целях экономии памяти используются списочные массивы. В процессе счета смешанные ячейки могут исчезать (когда из ячейки утекают все вещества, кроме одного) и появляться. Проблема при использовании GPU возникает в тот момент, когда на временном шаге происходит исчезновение или появление сразу нескольких смешанных ячеек. Актуальная информация о конце списка смешанных ячеек хранится в одной общей переменной. При одновременном обращении к ней нескольких нитей GPU,

*Описание тестов см. ниже.

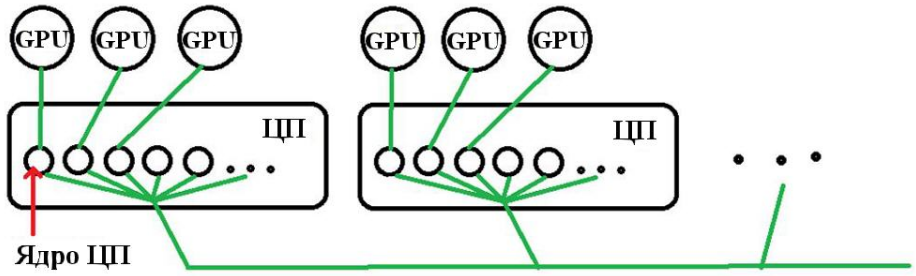

Рис. 2. Связь ядер ЦП и GPU

а тем более ее изменении, производители GPU не гарантируют корректной работы. Во избежание такой ситуации обращение к указанной переменной реализовано с помощью атомарных операций, замедляющих работу, но позволяющих использовать списочные массивы без конфликтов.

Решаемая в методике РАМЗЕС-КП система уравнений газовой динамики замыкается уравнениями, описывающими теплофизические свойства веществ: УРСами, пробегами фотонов в веществе. Доступ к программам расчета теплофизических свойств на GPU реализован с помощью связи РАМЗЕС-КП и специально разработанной версии автономной библиотеки расчета теплофизических свойств УРС-ОФ [8], содержащей подпрограммы нескольких типов (УРСы, пробеги фотонов и т. д.). Вызов программ пакета УРС-ОФ, как и других счетных алгоритмов РАМЗЕС-КП, производится с ЦП, при этом все основные вычисления выполняются на GPU. Результаты расчета начальных данных УРС-ОФ также хранятся в оперативной памяти GPU. Для обмена информацией между РАМЗЕС-КП и УРС-ОФ разработаны структуры данных, с помощью которых передаются инициализированные в РАМЗЕС-КП указатели на непрерывные области оперативной памяти GPU (массивы), общие для всей задачи. Эти массивы содержат исходные данные для проведения расчетов и заполняются в процессе выполнения программ библиотеки УРС-ОФ результатами расчетов теплофизических свойств. Также программам библиотеки УРС-ОФ в виде дополнительного индексного массива передается необходимая информация о веществе, находящемся в каждой газодинамической ячейке.

Оптимизация реализованных программ

Существенную часть счета занимал обмен данными между ЦП и GPU. Значительное сокращение доли такого обмена достигнуто благодаря следующим действиям:

1. Оптимизация объемов копирования информации между ЦП и GPU. Вследствие разделения программ, содержащих внутренние зацепления, на несколько более коротких подпрограмм без циклов появилась возможность уменьшить объем передаваемой информации.
2. Использование pinned-памяти для временных массивов. Это в два раза сокращает время их копирования. Такие массивы возникают при выполнении операций ЦП над данными, которые были рассчитаны на GPU (основные массивы в методике РАМЗЕС-КП объявлены с атрибутом `save`, поэтому для них нельзя использовать атрибут `pinned`).
3. Использование константной памяти для тех переменных, которые задаются при считывании файла расчета начальных данных задачи и не меняются в процессе расчета.
4. Передача данных в качестве аргументов по значению. Это параметры, которые используются только для чтения и управления внутри ядер, их можно явно не копировать. Каждое из написанных ядер было подвергнуто анализу на наличие таких параметров. Как правило, среди них номер рассчитываемого фрагмента области и сеточные координаты участка фрагмента, который рассчитывается текущим процессом.
5. Реализация асинхронного копирования при обмене данными между ЦП и GPU там, где это возможно. Это эффективный, но и самый трудоемкий процесс. Для его осуществления понадобился тщательный анализ работы с памятью на шаге. Целью анализа являлся поиск таких мест в коде, где возможно одновременное выполнение арифметических операций на GPU и копирования

необходимой информации с ЦП на GPU или с GPU на ЦП.

Кроме того, в процессе оптимизации активно проводился поиск путей снижения временных затрат на решение СЛАУ трехдиагонального вида. Помимо вышеперечисленных действий, для уменьшения времени выполнения на GPU прогонок по первому направлению реализовано транспонирование исходной трехдиагональной матрицы (его описание как способа решения проблемы дано в [11]). Также реализован метод встречных прогонок. Оба этих подхода позволили уменьшить время решения СЛАУ примерно в 2 раза.

Постановка тестов

В данном разделе приведены постановки тестовых расчетов. Тест 1 создан искусственно, он моделирует работу как процессов газовой динамики, так и теплопроводности. Тесты 2 и 3 взяты из набора тестов [12, 13].

Тест 1. *Обжатие легкого вещества тяжелой оболочкой.* Постановка теста представлена на рис. 3. На внешней границе задаются температура и давление.

Задача решена с количеством точек 256×800 и количеством временных шагов 1 400.

Тест 2. *Адиабатический разлет в вакуум осесимметричного газового эллипсоида.* В двухосном эллипсоиде G с полуосями $a_x = 1$ см, $a_y = 2$ см, заполненном газом с показателем адиабаты $\gamma = 1{,}4$, задано начальное распределение плотности и удельной внутренней энергии:

$$\rho = (1-\nu)^{1/(\gamma-1)}; \qquad \varepsilon = \frac{1-\nu}{\gamma-1},$$

где

$$\nu = \left(\frac{x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{y}{a_y}\right)^2.$$

На границе эллипсоида поддерживается постоянное давление

$$P(x,y,t) = 0, \qquad t \geq 0.$$

Временной шаг наращивался от начального значения $\tau = 0{,}01$ до $\tau = 0{,}05$ с коэффициентом геометрической прогрессии $q = 1{,}01$. После достижения значения $\tau = 0{,}05$ шаг по времени оставался неизменным до конца расчета.

Задача решена с количеством точек 900×900 и количеством временных шагов 1 000.

Тест 3. *Задача об остывании бесконечного бруса с квадратным сечением.* В бесконечном брусе с квадратным сечением $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ во всех точках, кроме граничных, в начальный момент времени задана температура

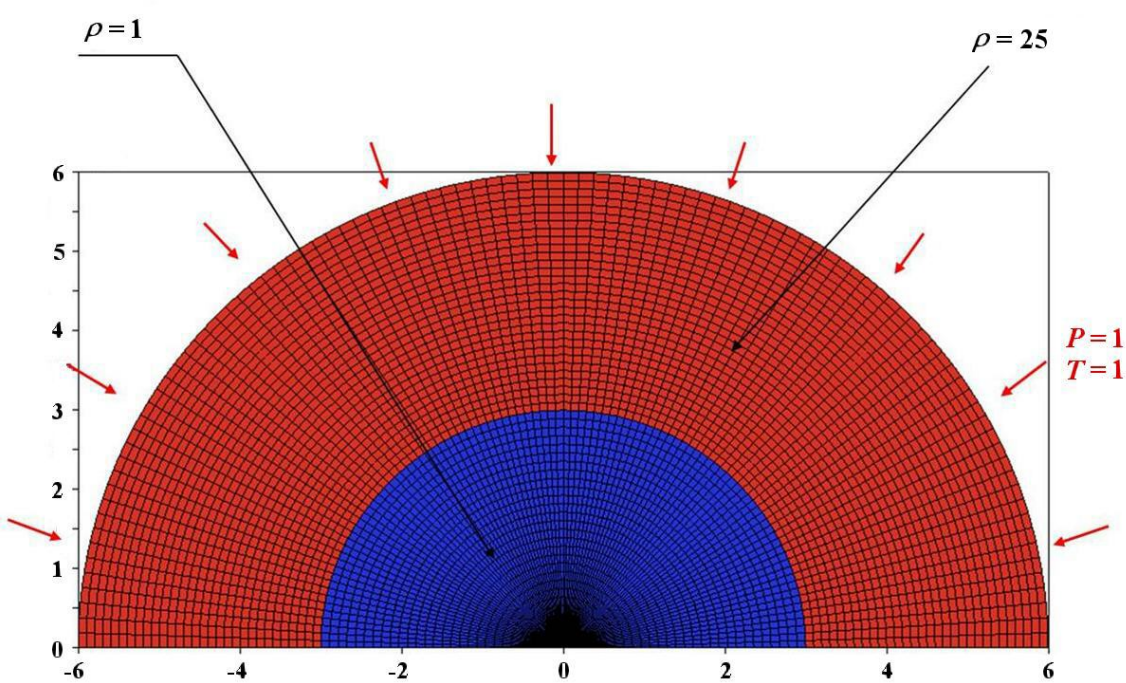

Рис. 3. Постановка тестовой задачи 1

$$T(x, y, 0) = 1.$$

На границе в начальный и все последующие моменты времени поддерживается постоянная нулевая температура:

$$T(x, y, t) = 0, \qquad t \geq 0.$$

Задача имеет аналитическое решение [6]

$$T(x, y, t) = \Psi(x, t)\Psi(y, t),$$

где

$$\Psi\left(x, t\right) = 4 \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{\pi N} \exp\left(-\left(\pi N\right)^2 t\right) \sin\left(\pi N x\right),$$

N – нечетное.

Расчет проводился с постоянным шагом по времени $\tau = 0{,}0005$. Задача решена с количеством точек 900×900 и количеством временных шагов 1 000.

Результаты тестирования

В данном разделе приводятся результаты численного исследования эффективности распараллеливания при использовании от 1 до 32 GPU. Все тестовые задачи были рассчитаны как с использованием GPU, так и без них, т. е. на ядрах ЦП (на однородной ЭВМ). Сравнение полученных результатов показало, что они хорошо согласуются между собой (различие менее 0,1 %).

Для измерения эффективности применялся метод умножения, т. е. при увеличении количества процессов в n раз размер теста также увеличивался в n раз. При таком подходе длительность счета всей задачи не должна увеличиваться. Тесты рассчитаны последовательно на 1, 2, 4, 8, 16, 32 GPU. При счете использовались один GPU и одно ядро ЦП каждого узла вычислительной системы.

Результаты тестирования представлены следующими характеристиками:

– ускорение вычислительного процесса на гибридной ЭВМ относительно процесса, выполняемого на однородной ЭВМ: t_p/τ_p;
– эффективность распараллеливания

$$V_p = \frac{\tau_1}{\tau_p} \cdot 100\,\%.$$

Здесь и далее в таблицах используются следующие обозначения: t_p — длительность выполнения программы на однородной ЭВМ, содержащей p ядер (без ускорителей); τ_p — длительность выполнения программы на гибридной ЭВМ, содержащей p ядер и p ускорителей; M — количество ячеек в расчете вдоль первой координаты; K — количество ячеек в расчете вдоль второй координаты.

В табл. 1—3 приведены замеры времени расчета задач на гибридных и однородных ЭВМ, а также значения ускорения.

В табл. 4—6 приведены значения эффективности распараллеливания, полученные в расчетах с GPU.

Заключение

В работе представлены результаты создания адаптированной методики РАМЗЕС-КП, предназначенной для решения задач газовой динамики и теплопроводности на гибридных ЭВМ. Описаны процессы профилирования программ ме-

Таблица 1

Ускорение вычислительного процесса на гибридной ЭВМ относительно процесса, выполняемого на однородной ЭВМ, для теста 1

p	Размер задачи		t_p, с	τ_p, с	t_p/τ_p
	M	K			
1	800	256	4 463,00	158,14	28,22
2	800	512	4 541,13	192,53	23,59
4	800	1 024	4 597,59	206,46	22,27
8	800	2 048	4 619,47	211,59	21,83
16	800	4 096	4 652,80	215,00	21,64
32	800	8 192	4 806,30	222,02	21,65

Таблица 2

Ускорение вычислительного процесса на гибридной ЭВМ относительно процесса, выполняемого на однородной ЭВМ, для теста 2

p	Размер задачи		t_p, с	τ_p, с	t_p/τ_p
	M	K			
1	900	900	1 458,92	90,73	16,08
2	900	1 800	1 507,96	100,74	14,97
4	900	3 600	1 528,05	103,48	14,77
8	900	7 200	1 574,70	113,74	13,84
16	900	14 400	1 677,92	116,60	14,39
32	900	28 800	1 720,86	139,66	12,32

Таблица 3

Ускорение вычислительного процесса на гибридной ЭВМ относительно процесса, выполняемого на однородной ЭВМ, для теста 3

p	Размер задачи		t_p, с	τ_p, с	t_p/τ_p
	M	K			
1	900	900	2 395,33	158,49	15,11
2	1 800	900	2 482,10	176,59	14,06
4	1 800	1 800	2 494,88	182,88	13,64
8	3 600	1 800	2 516,99	185,47	13,57
16	3 600	3 600	2 690,30	187,96	14,31
32	7 200	3 600	2 750,00	190,50	14,44

Таблица 4

Эффективность распараллеливания программ методики на гибридной ЭВМ на тесте 1

p	Размер задачи		Эффективность на GPU, %	Эффективность на ЦП, %
	M	K		
1	800	256	100,00	100,00
2	800	512	82,14	98,28
4	800	1 024	76,59	97,07
8	800	2 048	74,74	96,61
16	800	4 096	73,55	95,92
32	800	8 192	71,23	92,86

Таблица 5

Эффективность распараллеливания программ методики на гибридной ЭВМ на тесте 2

p	Размер задачи		Эффективность на GPU, %	Эффективность на ЦП, %
	M	K		
1	900	900	100,00	100,00
2	900	1 800	90,06	96,75
4	900	3 600	87,68	95,48
8	900	7 200	79,77	92,65
16	900	14 400	77,81	86,95
32	900	28 800	64,96	84,72

тодики, создания версии программ для гибридной ЭВМ, оптимизации кода с целью повышения эффективности распараллеливания. Приведены постановки тестовых задач, представлены значения ускорения вычислений и эффективности распараллеливания.

Результаты расчетов тестовых задач на гибридной ЭВМ практически совпадают с результатами, полученными на однородной ЭВМ: различия составляют менее 0,1 %.

Таблица 6

Эффективность распараллеливания программ методики на гибридной ЭВМ на тесте 3

p	Размер задачи		Эффективность на GPU, %	Эффективность на ЦП, %
	M	K		
1	900	900	100,00	100,00
2	1 800	900	89,75	96,50
4	1 800	1 800	86,67	96,01
8	3 600	1 800	85,46	95,17
16	3 600	3 600	84,32	89,04
32	7 200	3 600	83,20	87,10

Использование GPU позволяет ускорить вычисления по сравнению с однородной ЭВМ от 10 до 30 раз. Эффективность распараллеливания в приведенных тестах составляет 60—80 %. Это на 15—20 % меньше значений эффективности распараллеливания, достигаемых при тех же условиях на однородной ЭВМ, и приемлемо для практического применения.

Список литературы

1. *Быков А. Н., Веселов В. А., Воронин Б. Л., Ерофеев А. М.* Методика РАМЗЕС-КП для расчета пространственных движений многокомпонентных теплопроводных сред в эйлеро-лагранжевых коородинатах // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 13. С. 50—57.
2. *Рыбакин Б. П., Егоров Е. В., Стамов Л. И.* Решение задач газодинамики с химической кинетикой на графических процессорах // Тр. межд. суперкомп. конф. "Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее" (17—22 сентября 2012 г., Новороссийск). М.: Изд-во Московского ун-та, 2012. С. 483—490.
3. *Niemeyer K. E., Sungy C. J.* Accelerating reactive flow simulations using graphics processing units // 51st AIAA Aerospace Sciences Meeting. Grapevine, Texas, USA. January 6—10, 2013. P. 1—13.
4. *Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н. и др.* Решение задач газовой дина-

мики и теплообмена на графических процессорах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 4. С. 22—34.

5. *Геллер О. В., Васильев М. О., Холодов Я. А.* Построение высокопроизводительного вычислительного комплекса для моделирования задач газовой динамики // Компьютерные исследования и моделирование. 2010. Т. 2, № 3. С. 309—317.
6. *Чупраков Е. Е.* Реализация двумерной газодинамической методики Д на гибридной вычислительной системе // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 1. С. 69—77.
7. *Гордеев Д. Г., Голубкова Е. Ф., Гударенко Л. Ф. и др.* Современное состояние пакета программ УРС-ОФ для расчета термодинамических и механических свойств веществ // Тр. межд. конф. "XI Забабахинские научные чтения". http://www.vniitf.ru/images/zst/2012/s6/6-17.pdf.
8. *Быков А. Н., Гордеев Д. Г., Куделькин В. Г. и др.* Организация взаимодействия прикладных программ и библиотеки УРС-ОФ расчета теплофизических свойств веществ на ЭВМ с арифметическими ускорителями // Супервычисления и математическое моделирование. Тр. XIV межд. конф. 1—5 октября 2012. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2013. С. 120—128.
9. *Быков А. Н., Ерофеев А. М., Сизов Е. А., Фёдоров А. А.* Метод распараллеливания прогонки на гибридных ЭВМ // Вычислительные методы и программирование. 2013. Т. 14, разд. 2. С. 43—47.
10. *Яненко Н. Н., Коновалов А. Н., Бугров А. Н., Шустов Г. В.* Об организации параллельных вычислений и "распараллеливании" прогонки // Числ. методы мех. спл. среды. 1978. Т. 9, № 7. С. 139—146.
11. *Сахарных Н. А., Березин С. Б., Пасконов В. М.* Моделирование течений в акватории Белого моря: применение массивно-параллельной архитектуры GPU // Суперкомпьютеры. 2011. № 2(6). С. 51—55.
12. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др.* Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 1. Требования к тестам. Тесты 1—7 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 3—9.
13. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др.* Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 2. Тесты 8—15 // Там же. С. 10—14.

Статья поступила в редакцию 16.09.16.

RAMZES-KP CODE ON HYBRID PARALLEL COMPUTERS WITH GRAPHICS ACCELERATORS / A. N. Bykov, D. G. Gordeyev, V. G. Kudel'kin, E. A. Sizov, A. A. Fedorov (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod region)

The paper describes the RAMZES-KP code (for gas dynamic equations with regard to heat conduction) for a hybrid-architecture parallel computer comprising general-purpose processors and graphics accelerators. Program profiling and optimization results are presented. The paralleling efficiency values achieved by using a homogeneous multiprocessor (with general-purpose processors only) and a hybrid computer to solve the same problems are given.

Keywords: RAMZES-KP, graphics accelerators, arithmetic accelerators, acceleration, paralleling, MPI, efficiency, implicit gas dynamics, heat conduction.