

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МАСШТАБИРОВАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПАКЕТА LS-DYNA НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ С РАЗЛИЧНОЙ АРХИТЕКТУРОЙ

С.К. Черников, А.Н. Ашихмин

Казанский физико-технический институт

В настоящее время получили широкое распространение технологии компьютерного моделирования и исследования различных объектов и явлений. Особенно интенсивное внедрение таких технологий происходит в области разработки и проектирования. На сегодняшний день разработано и широко используется в различных отраслях значительное число программных пакетов. Одним из таких пакетов является пакет для анализа нелинейных и быстротекущих процессов LS-DYNA, разработанный Livermore Software Technology Corporation.

Одной из проблем, возникающих при применении таких пакетов, является эффективность использования ресурсов вычислительной системы. Особенно такая проблема становится актуальной при наличии различного рода ограничений при выборе вычислительной системы. Эффективность пакета программ во многом будет определяться особенностями его реализации, которые зачастую оптимизируются для конкретной архитектуры вычислительной системы.

Целью настоящей работы являлось исследование способности масштабирования пакета LS-DYNA на многопроцессорных вычислительных системах с разной архитектурой: системе с неоднородным доступом к общей памяти (NUMA) и кластерной системой (MPP).

Конфигурация вычислительных стендов

Конфигурация вычислительной системы с неоднородным доступом к общей памяти:

- 2 процессора AMD Opteron X12 6174, что дает 24 вычислительных ядра, которые сгруппированы в 4 NUMA узла, связанных шиной HyperTransport;
- 64 Гб оперативной памяти, распределенные в два 4-канальных банка памяти;
- 1 Тб жесткий диск;
- 64-битная операционная система CentOS 6 с установленной коммуникационной средой OpenMPI.

В кластерной вычислительной системе было задействовано 6 вычислительных узлов, связанных шинами Gigabit Ethernet и InfiniBand.

Конфигурация вычислительного узла кластера

- процессор INTEL Core i7-950 (4 вычислительных ядра или 8 виртуальных вычислительных ядер при использовании режима Hyper-Threading);
- 6 Гб 3-канальной оперативной памяти;
- 1 Тб жесткий диск;
- 64-битная операционная система CentOS 6 с установленной коммуникационной средой OpenMPI.

Исследование масштабируемости пакета LS-DYNA

В качестве тестового примера взят расчет фрагмента тонкостенной металлической конструкции, сминаемой недеформируемой плитой, перемещающейся с заданной скоростью. Расчетная модель содержала 427 тыс. элементов и 450 тыс. узлов. Расчет выполнялся с использованием пакета LS-DYNA версии 9.71 R5.1.1 с одинарной (REAL*4) точностью, оптимизированным под архитектуру вычислительной системы.

Для оценки масштабируемости вычислительных возможностей рассматриваемого пакета программ были проведены серии расчетов на каждом из вычислительных устройств. В каждой из таких серий количество вычислительных процессов (потоков), которые были задействованы для решения задачи, варьировалось от 1 до 24. Максимальное число в 24 потока обусловлено ограничениями располагаемой лицензии на пакет LS-DYNA. На NUMA-системе, кроме серии расчетов версией пакета, для общей памяти (SMP) была проведена серия расчетов и версией пакета для распределенной памяти (MPP).

В табл. 1 приведено уменьшение времени расчета описанной задачи для заданного временного участка при решении в несколько вычислительных потоков, по сравнению с решением в один вычислительный поток. Уменьшение времени определялось в каждой из серий, как отношение времени решения задачи ко времени ее решения в одном вычислительном потоке в этой же серии.

В первой строке приведено количество вычислительных потоков, во второй строке таблицы представлены результаты серии расчетов на NUMA-системе при использовании SMP-версии пакета LS-DYNA. В третьей строке представлены результаты серии расчетов на NUMA-системе при использовании MPP-версии пакета LS-DYNA. В последней строке показаны результаты серии расчетов на кластере при использовании MPP-версии пакета LS-DYNA. При проведении расчетов на кластере, вычислительные процессы для случаев расчета в 2 и 4 потока располагались на одном узле. В остальных случаях расчеты на кластере выполнялись при 4-х вычислительных потоках на одном узле.

Таблица 1. Относительное изменение времени решения при увеличении числа вычислительных потоков

Число потоков вычислений	2	4	8	16	24
NUMA – SMP LS-DYNA	1.66	2.35	2.52	2.70	2.12
NUMA – MMP LS-DYNA	1.89	3.60	3.43	3.58	2.88
MPP – MMP LS-DYNA	2.00	2.25	2.90	6.38	9.10

Анализ результатов

Как видно из приведенных результатов, при решении рассмотренной задачи на NUMA-системе существенное ускорение процесса вычислений происходит только для незначительного числа вычислительных потоков: 4-8. При дальнейшем увеличении числа вычислительных потоков заметного сокращения времени решения не происходит, а увеличение числа потоков более 16 приводит даже к его увеличению. Такое поведение на NUMA-системе характерно как для SMP-версии, так и MPP-версии пакета LS-DYNA.

Снижение скорости решения на NUMA-системе при увеличении числа вычислительных потоков более 8, даже при наличии достаточного количества вычислительных ядер процессора, скорее всего связано со значительными затратами на разрешение коллизий при обращении к оперативной памяти. Кроме того, на рассматриваемой вычислительной системе отсутствуют достаточные средства для управления привязкой вы-

числительных потоков SMP-приложений к конкретным вычислительным ядрам и областям в оперативной памяти. Такие средства управления вычислительным процессом позволили бы несколько повысить эффективность SMP-приложений на NUMA-системе. Повышение эффективности MPP-версии пакета на NUMA-системе по сравнению с SMP-версией отчасти обусловлено привязкой вычислительных процессов к вычислительным ядрам процессора и соответствующим этим ядрам областям оперативной памяти.

Результаты, полученные при расчете на кластере в пределах одного узла, подобны результатам, полученным на NUMA-системе. Однако при подключении к расчетам третьего и последующих узлов эффективность кластерной системы существенно отличается от эффективности NUMA-системы. Эффективность кластерной системы становится пропорциональной числу подключенных вычислительных узлов кластера. Коммуникационные издержки InfiniBand остаются практически постоянными и оказывают заметное влияние только при подключении 2-го узла.

Выводы

Таким образом, исходя из полученных результатов, можно выработать ряд рекомендаций по выбору вычислительного устройства для проведения расчетов пакетом LS-DYNA. В первую очередь необходимо отметить, что при решении задач как SMP-версией пакета, так и MPP-версией, необходимо обеспечить достаточную скорость обмена между вычислительными процессами (потоками) одного решения. Для вычислительной NUMA-системы необходимо наличие достаточного количества прямых каналов взаимодействия вычислительных ядер процессоров с банками оперативной памяти системы. Для кластерных систем необходимо наличие высокоскоростной коммуникационной среды, подобной, например, InfiniBand. При небольшом числе планируемых вычислительных потоков целесообразнее использовать в качестве вычислителя NUMA-систему, как более доступную и простую. При числе вычислительных потоков 16 и более эффективность кластерной системы с числом задействованных узлов более 4 становится выше, чем аналогичная по числу вычислительных ядер NUMA-система. При этом надо учитывать, что нецелесообразно запускать на выполнение более 4-х вычислительных процессов на 1 узле, если он не представляет из себя NUMA-системы с эффективной системой распределения таких вычислительных ресурсов, как вычислительные ядра процессора и оперативная память.