

АДАПТАЦИЯ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ РАМЗЕС-КП ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ГИБРИДНЫХ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЭВМ

***А.А. Федоров, А.Н. Быков, Е.А. Сизов, В.Г. Куделькин,
Н.Н. Жильникова, Д.Г. Гордеев***

*Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский НИИ экспериментальной
физики, Саров*

Введение

В институте теоретической и математической физики (ИТМФ) РФЯЦ-ВНИИЭФ для решения научно-технических и технологических задач разработаны различные прикладные программы. Одна из них основана на эйлерово-лагранжевой методике РАМЗЕС-КП численного решения трехмерных нестационарных задач газовой динамики с учетом теплопроводности. Среди особенностей этой методики можно выделить наличие многокомпонентности (присутствие в одной ячейке нескольких веществ) и использование неявной разностной схемы при решении не только уравнения теплопроводности, но и системы уравнений газовой динамики.

В 2011 году начались работы по адаптации методики РАМЗЕС-КП для счета задач на гибридных ЭВМ с АрУ (арифметическими ускорителями). За прошедшее время были переписаны программы газовой динамики и теплопроводности для работы на нескольких ускорителях, реализована связь с библиотекой УРС-ОФ, которая предназначена для расчета уравнений состояний и пробегов фотонов в веществе, разработаны методы решения СЛАУ для работы на нескольких ускорителях.

В работе будут приведены доказательства работоспособности полученной программы, результаты численных экспериментов по исследованию эффективности распараллеливания и сравнение времени счета задачи на АрУ и времени счета задачи на ЦП (центральный процессор).

1. Реализация программ на АрУ

В самом начале работы было проведено профилирование комплекса программ РАМЗЕС-КП, которое показало, что в коде нет «горячих пятен», то есть нельзя получить высокое ускорение за счет переписывания только некоторых программ.

Распараллеливание программ было проведено в основном поточечным методом, то есть каждую точку обчисляет отдельная нить. Также следует отметить, что ЦП используется лишь для обмена сообщениями между процессами.

В ходе адаптации программ для гибридных параллельных ЭВМ было реализовано следующее:

1. Логическое связывание ускорителя с ядром ЦП, чтобы каждый АрУ работал только с одним ядром ЦП.
2. Обмен данными между ЦП и АрУ для программ, содержащих MPI-обмены.
3. Для реализации метода прогонки, использующегося для нахождения решения систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, которая возникает из-за использования неявной схемы, на нескольких АрУ, был реализован метод распараллеливания прогонки, предложенный Н.Н. Яненко.

4. Обработка списочных массивов, использующихся для хранения информации о смешанных ячейках (содержащих несколько веществ), была организована с помощью атомарных операций.

2. Оптимизация реализованных программ

После первых полученных характеристик эффективности распараллеливания началась работа по оптимизации кода. Существенную часть счёта на АрУ занимал обмен данными между ЦП и АрУ. Значительно сократить долю такого обмена нам позволили следующие действия:

1. Оптимизация объемов копирования информации между ЦП и АрУ.
2. Использование pinned-памяти для временных массивов, которые создаются на ЦП при работе с АрУ, в два раза сокращает время их копирования. Такие массивы возникают при выполнении операций на ЦП над данными, которые были рассчитаны на АрУ (основные массивы в комплексе РАМЗЕС-КП объявлены с атрибутом save, поэтому для них, к сожалению, нельзя использовать атрибут pinned).
3. Использование константной памяти для некоторых переменных, которые задаются при считывании файла расчета начальных данных задачи и не меняются в процессе расчёта.
4. Передача данных по значению в аргументах функций. Это параметры, которые используются только для чтения и управления внутри ядер, их можно явно не копировать.
5. Наиболее эффективным, но при этом и самым трудоёмким процессом, стала реализация асинхронного копирования при обмене данными между ЦП и АрУ там, где это было возможно.

Помимо вышеперечисленных действий для уменьшения времени работы на АрУ прогонки по первому направлению реализовано транспонирование исходной трехдиагональной матрицы и метод встречных прогонок, что позволило уменьшить время работы этого участка примерно в 2 раза.

3. Результаты тестирования

Программа тестировалась на задаче обжата легкого вещества тяжелой оболочкой. Задача была посчитана как на ускорителях, так и на ядрах ЦП с числом точек 256×800 и числом временных шагов 1400. Для измерения эффективности задача считалась методом умножения последовательно на 1, 2, 4, 8, 16, 32 ускорителях. Ускорение на гибридной ЭВМ по сравнению с многопроцессорной ЭВМ составило от 10,74 на 32-х ускорителях до 15,57 на одном ускорителе, эффективность распараллеливания составила не ниже 59%.

Литература

1. Быков А.Н., Веселов В.А., Воронин Б.Л., Ерофеев А.М. Методика РАМЗЕС-КП для расчета пространственных движений многокомпонентных теплопроводных сред в эйлери-лагранжевых координатах. – Сб. Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Саров, вып. 13, 2008. С. 50-57.
2. Яненко Н.Н., Коновалов А.Н., Бугров А.Н., Шустов Г.В. Об организации параллельных вычислений и “распараллеливании” прогонки. - Сб. Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1978. Т.9, №7. С. 139-146.
3. Новаев Д.А., Бартенев Ю.Г., Липов Д.И. и др. Программные средства STK для исследования эффективности выполнения параллельных приложений // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып.4. С. 72-81.

4. Федоров А.А., Быков А.Н., Сизов Е.А. Метод распараллеливания прогонки на гибридных ЭВМ // Вычислительные методы и программирование. 2013. Раздел 2. С. 43-47.