

РАСЧЕТ ПРОБЕГОВ ФОТОНОВ ПО ПРОГРАММЕ ПЕРСТ НА МУЛЬТИПРОЦЕССОРНЫХ СИСТЕМАХ С ГРАФИЧЕСКИМИ АРИФМЕТИЧЕСКИМИ УСКОРИТЕЛЯМИ

Т. А. Агапова, Г. М. Елисейев, А. В. Тихонов, А. С. Рыбкин, И. А. Крючков, А. Г. Ломтев

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

1. Программа ПЕРСТ

Во ВНИИЭФ численное моделирование переноса лучистой энергии в различных материалах проводится с использованием матриц средних и многогрупповых пробегов фотонов, которые рассчитываются с помощью программы ПЕРСТ, созданной в математическом отделении ИТМФ. В программе реализованы квантовомеханические расчеты сечений поглощения и рассеяния фотонов связанными и свободными электронами при высоких температурах и плотностях вещества. Рассчитываются сечения тормозного поглощения, фотопоглощения, поглощения в линиях и комптоновское рассеяние на свободных электронах.

Характерной особенностью расчетов в программе ПЕРСТ является необходимость учета большого количества ионов с разным заполнением дискретных уровней электронами. Для веществ с атомными номерами $Z = 40$ и более количество учитываемых конфигураций ионов может достигать, при некоторых условиях, до десятков миллионов. Для каждого иона расчет сечений выполняется независимым образом по одним и тем же формулам с примерно одинаковыми затратами времени центрального процессора (ЦП). Алгоритм программы ПЕРСТ имеет большое количество независимых арифметических вычислений с относительно небольшим количеством обменов.

2. Адаптация программы

Расчет фотосечений выполняется по подпрограмме `cros_bf` на сетке частот фотонов, которая может содержать до 10^9 узлов. Расчет по ней занимает более 95 % от общего времени выполнения всей программы, выполняется в рамках одного MPI-процесса и содержит вычисления, которые могут выполняться параллельно, независимо друг от друга. Поэтому подпрограмма `cros_bf` была оптимизирована для вычислений на арифметических ускорителях (АрУ). В качестве АрУ используются графические процессоры (ГП) фирм NVIDIA и AMD. Подпрограмма расчета сечений `cros_bf` была переписана с языка FORTRAN на язык C с использованием одних из самых популярных технологий для программирования на АрУ CUDA и OpenCL.

Технология CUDA – масштабируемая программно-аппаратная архитектура NVIDIA, которая дает возможность организации доступа к набору инструкций графического ускорителя и управления его памятью при организации параллельных вычислений. Данную технологию поддерживают только АрУ фирмы NVIDIA.

Технология OpenCL – открытый стандарт для универсального параллельного программирования различных типов процессоров, включая как центральный процессор, так и различные виды АрУ.

На рис. 1 приведены первоначальная и адаптированная для АрУ структуры программы.

В первоначальном варианте, при помощи средств MPI, расчет сечения фотопоглощения для каждой конфигурации вычислялся параллельно на множестве MPI-процессов. Расчет фотосечений внутри каждого MPI-процесса выполнялся последовательно.

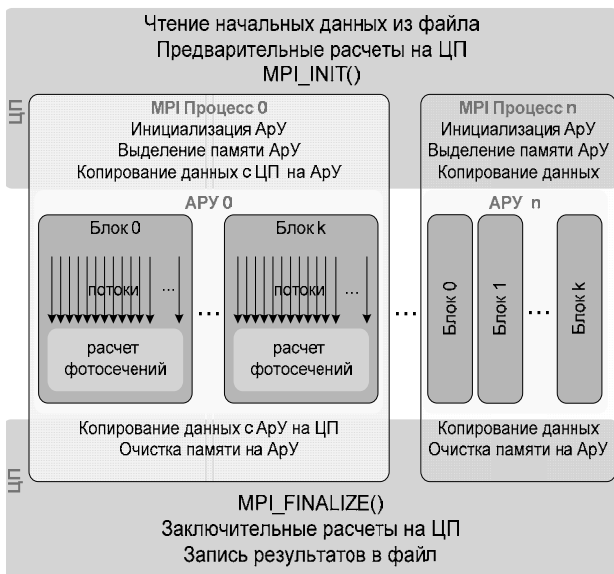
В адаптированной для АрУ программе ПЕРСТ реализовано двухуровневое распараллеливание:

- распараллеливание расчетов сечений для отдельных конфигураций на множество АрУ. Каждый MPI-процесс инициализирует один АрУ;
- распараллеливание расчета фотосечений на множестве исполнительных потоков АрУ.



а

Рис. 1. Структура программы: а – первоначальная; б – адаптированная для АрУ



б

Окончание рис. 1

Вычисления с использованием АрУ можно разбить на несколько этапов:

- чтение начальных данных из файла;
- предварительные расчеты на ЦП;
- инициализация АрУ;
- выделение памяти под данные на АрУ;
- копирование данных с ЦП на АрУ;
- расчет фотосечений на АрУ;
- копирование данных с АрУ на ЦП;
- очистка памяти на АрУ;
- финальные расчеты на ЦП;
- запись результатов в файл.

Для оптимизации вычислений на АрУ в алгоритме расчета фотосечений произведен ряд изменений:

- распараллеливание на потоки АрУ выполнено по итерациям внешнего цикла по сетке частот;
- устранены зависимости при расчете значений от предыдущих итераций цикла;
- минимизированы обмены данными между ЦП и медленной глобальной памятью АрУ за счет уменьшения количества входных и выходных массивов;
- некоторые массивы помещены в константную память АрУ, которая работает быстрее глобальной памяти за счет кэширования;
- минимизировано количество используемых локальных переменных и массивов для того, чтобы компилятор разместил локальные переменные функций в регистрах. Доступ к таким переменным осуществляется с максимальной скоростью;
- добавлена возможность запуска расчетов на множестве АрУ.

3. Тестирование программы ПЕРСТ

Тестирование проводилось в трех модификациях программы:

- первоначальный вариант программы для ЦП;
- адаптированный для АрУ вариант, с использованием технологии CUDA;
- адаптированный для АрУ вариант, с использованием технологии OpenCL.

3.1. Результаты тестирования на ЦП Intel Core i7-920 и АрУ NVIDIA GeForce GTX 480, NVIDIA Tesla C2050, AMD ATI Radeon HD 5970

Программа ПЕРСТ тестировалась на центральном процессоре Intel Core i7-920 и АрУ NVIDIA GeForce GTX 480, NVIDIA Tesla C2050, AMD ATI Radeon HD 5970. Характеристики ЦП и АрУ представлены в табл. 1 и 2 соответственно [1, 2].

Таблица 1

Характеристики ЦП

Параметр	Значение
Тип ЦП	Intel Core i7-920
Тактовая частота, ГГц	2,67
Количество вычислительных ядер	4
Теоретическая пиковая производительность (64-bit), Гфлоп/с	42,72

Таблица 2

Характеристики АрУ

Параметр	Значение		
	NVIDIA GeForce GTX 480	NVIDIA Tesla C2050	AMD ATI Radeon HD 5970
Интерфейс подключения	PCI-Express 2,0x16		
Количество векторных ядер	15	14	20
Количество потоковых процессоров	480	448	320
Тактовая частота, ГГц	1,401	1,15	0,725
Теоретическая пиковая производительность (64-bit), Гфлоп/с	168,1	515,2	928
Тип оперативной памяти	GDDR5		
Емкость оперативной памяти, Гбайт	1,536	2,64	1*2
Разрядность шины памяти, бит	384	384	256*2
Тактовая частота оперативной памяти, ГГц	1,848	3000	1000
Пропускная способность памяти, Гбайт/с	177,4	144	128*2

На рис. 2 представлен график зависимости коэффициента ускорения длительности счета на арифметическом ускорителе по отношению к длительности счета на одном ядре универсального процессора.

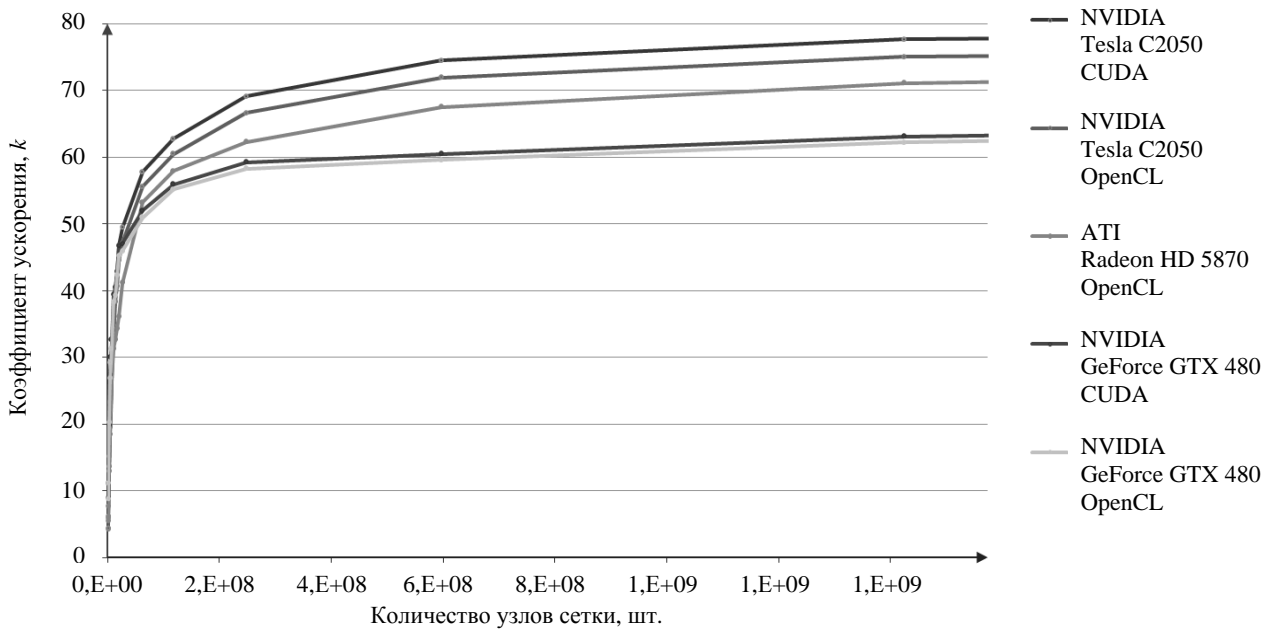


Рис. 2. Зависимость коэффициента ускорения длительности счета от количества узлов сетки на различных арифметических ускорителях

3.2. Результаты тестирования на ГВС-14

Проведено тестирование на вычислительной системе ГВС-14, имеющей гибридную архитектуру, которая состоит из четырех АpУ NVIDIA GeForce GTX 480 и одного ЦП Intel Core i7-920.

На рис. 3 представлен график зависимости коэффициента ускорения длительности счета на арифметических ускорителях по отношению к длительности счета на четырех ядрах универсального процессора.

3.3. Результаты тестирования на ГВС-18А

Проведено тестирование на вычислительной системе ГВС-18А, имеющей гибридную архитектуру, которая состоит из четырех двухчиповых АpУ AMD ATI Radeon HD 5970 и одного ЦП Intel Core i7-920.

На рис. 4 представлен график зависимости коэффициента ускорения длительности счета на графических процессорах АpУ по отношению к длительности счета на четырех ядрах универсального процессора.

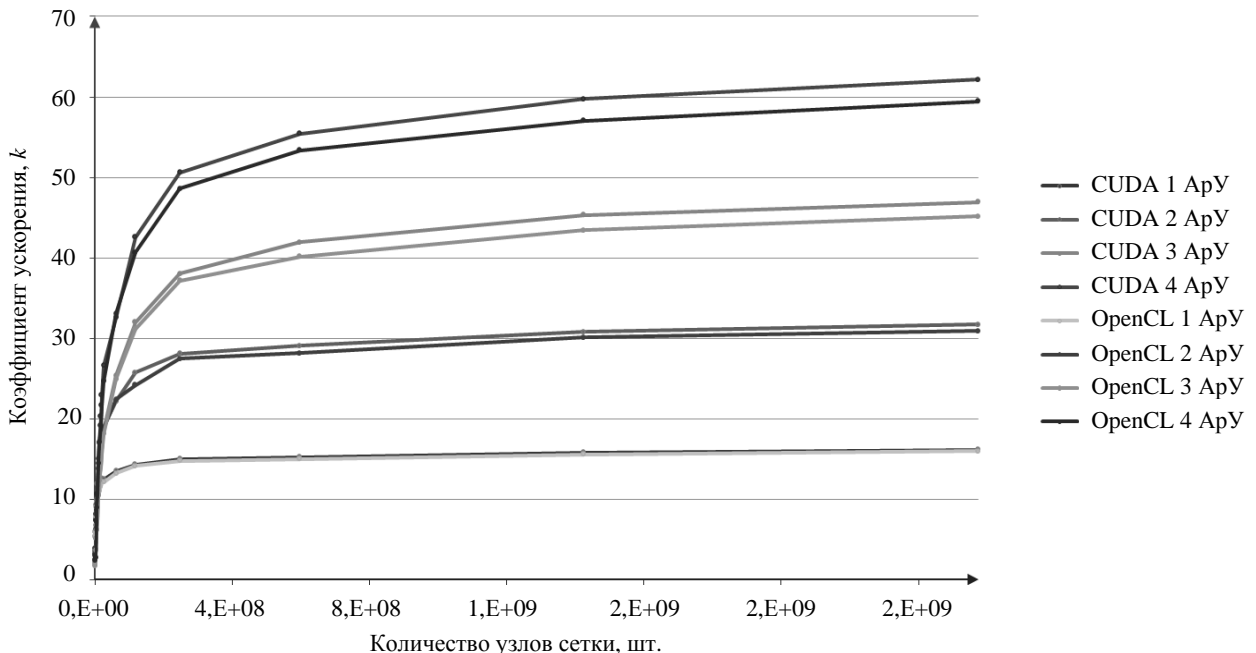


Рис. 3. Зависимость коэффициента ускорения длительности счета от количества узлов сетки на ГВС-14

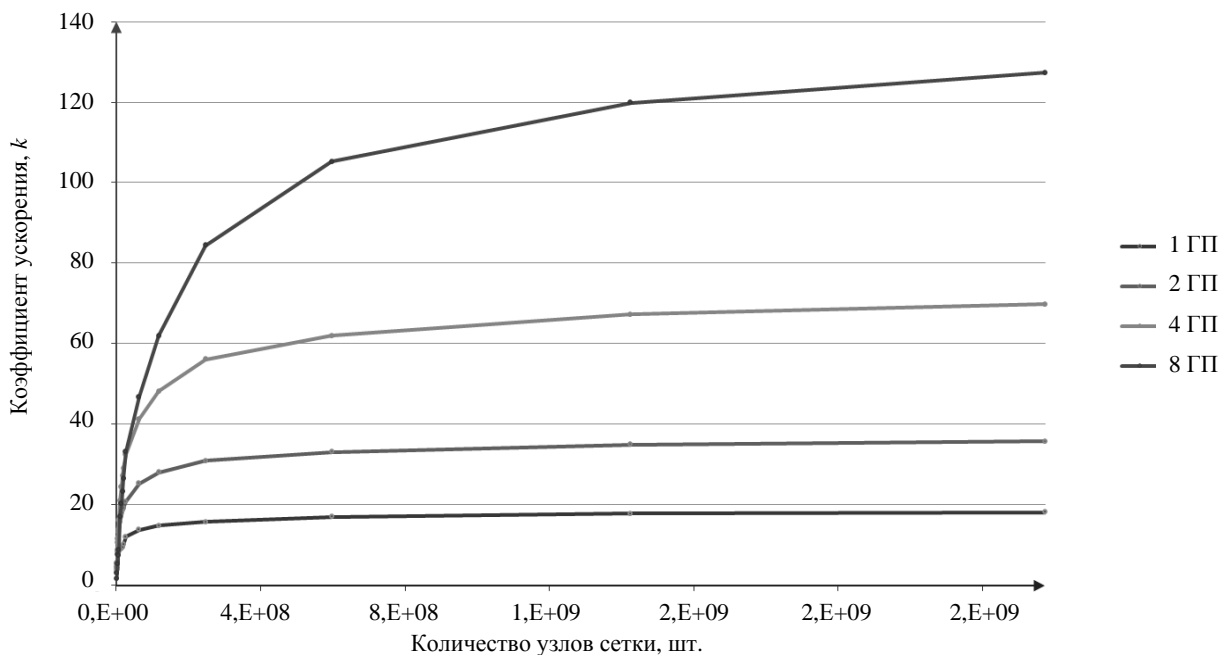


Рис. 4. Зависимость коэффициента ускорения длительности счета от количества узлов сетки на ГВС-18А

Заклучение

Полученные результаты тестирования показывают возможность и перспективность применения АрУ для расчета фотосечений по программе ПЕРСТ.

Программа может использоваться для расчетов на мультипроцессорных системах с арифметическими ускорителями. Применение АрУ позволяет значительно уменьшить длительность счета и получить

результаты в точках, требующих больших временных затрат.

Литература

1. NVIDIA CUDA C Programming Guide Version 4.0, 2011.
2. AMD APP OpenCL Programming Guide Version 1.3, 2011.