

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ В РАМКАХ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА MASTER PROFESSIONAL

И. А. Крючков, С. В. Павлов, В. В. Руденко, А. С. Рыбкин, Н. А. Халина, В. М. Шабуров

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

Введение

Стратегия развития экономики РФ предусматривает значительный рост использования суперкомпьютерных технологий в различных областях промышленности (авиация, атомная энергетика, автомобильная и ракетно-космическая отрасли). Суперкомпьютеры являются дорогостоящими проектами и требуют серьезных вложений в инфраструктуру, поэтому они доступны ограниченному количеству предприятий.

Получение в рамках персональной ЭВМ на рабочем месте исследователя или разработчика возможностей суперкомпьютера становится возможным благодаря созданию специализированных компактных суперЭВМ. Основной особенностью таких машин является использование арифметических ускорителей, которые обладают на порядок большей производительностью по сравнению с самими современными универсальными процессорами. Специализированность означает необходимость разрабатывать прикладное программное обеспечение, способное использовать все аппаратные возможности компьютера с арифметическими ускорителями.

Программный комплекс MASTER Professional [1] уже давно зарекомендовал себя как удобный современный компьютерный инструмент для проведения расчетно-теоретического моделирования быстротекущих нестационарных многомерных импульсных газо-, гидродинамических и упругопластических процессов.

MASTER Professional представляет собой многозадачную, многооконную интегрированную среду, позволяющую оперативно проводить 1D, 2D и 3D расчеты. Однако выполнение 3D расчетов задач с миллионами счетных точек на универсальных процессорах занимает, как правило, длительное время, что снижает оперативность и лишает программный комплекс свойств оперативного инструмента исследователя.

Существенным прорывом для MASTER Professional и других пользовательских программных комплексов, использующих персональные ЭВМ, явилось появление и использование для ускорения расчетов арифметических ускорителей. Появилась уникальная возможность, сохранив все свойства персональных ЭВМ (самостоятельность расчетов, on-line режим,

визуализация, быстрые и эффективные способы ввода данных и обработки результатов), проводить расчеты в 10–100 раз быстрее. Сочетание пользовательских качеств программы, современных свойств персональных компьютеров и мощных средств ускорения расчетов представляет собой основу для создания современных эффективных аппаратно-программных комплексов.

Вместе с тем, практика показала, что создание параллельного кода для арифметических ускорителей – серьезная трудоемкая задача, требующая значительного перекодирования исходной программы (счетных модулей) и, что существенно, ее структурной реорганизации, необходимой для эффективного использования возможностей арифметических ускорителей. Оптимизация кода для ускорителей – второй этап работы по модернизации исходных численных модулей.

В данной работе рассматриваются результаты первого этапа создания параллельного варианта одной из методик MASTER Professional (методика SPH) и его использование на арифметических ускорителях. Приводится сравнение скорости расчета тестовых задач физики взрыва на ускорителях и универсальном процессоре специализированной компактной суперЭВМ ГВС-14.

1. Гибридные вычислительные системы

Современные вычислительные системы помимо центрального процессора часто обладают высокопроизводительными арифметическими ускорителями на базе графических процессоров. Данный тип вычислителей уже обрел большую популярность.

В настоящее время активно развивается новое направление вычислительных систем – специализированные. Такие машины сложны в освоении. Необходимо разрабатывать специальные прикладные программы, способные использовать огромные вычислительные возможности ускорителей. Однако достоинства также неоспоримы – большая производительность за меньшую стоимость.

На сегодняшний день наиболее перспективным решением признается использование арифметических ускорителей, выполненных на основе графических процессоров фирм NVIDIA, AMD. Нельзя не

отметить, что наиболее интересными с точки зрения программирования являются процессоры фирмы NVIDIA. Исторически именно они, а не AMD, продвинули программирование на графических процессорах вперед. Программируемые продукты NVIDIA ориентированы на рынок высокопроизводительных вычислений, где требования довольно высоки по сравнению с требованиями потребителей видеокарт.

Для сравнения в табл. 1 приведены основные параметры, характеризующие современные универсальные процессоры и арифметические ускорители.

На текущий момент в мире уже созданы и эксплуатируются высокопроизводительные гибридные вычислительные системы с арифметическими ускорителями на базе графических процессоров.

Подобные системы разрабатываются в РФЯЦ-ВНИИЭФ. На рис. 1 представлены образцы 2009 и 2010 годов ГВС-10 «Кубань» и ГВС-18А [2].

В табл. 2 приведено сравнение основных характеристик компактных гибридных вычислительных систем разработки РФЯЦ-ВНИИЭФ и вычислительной системы Supermicro [3] (типичной для данного класса).

Таблица 1

Характерные параметры ускорителя и универсального процессора

	Универсальный процессор	Арифметический ускоритель	Соотношение
Наименование процессора	AMD Opteron 6168	NVIDIA Tesla C2050	
Тактовая частота процессора, ГГц	1,9	1,15	1,7
Вычислительные ядра, шт.	12	14	1,2
Потребляемая мощность АСР, Вт	80	238	3,0
Теоретическая пиковая производительность (64-бит), ГФлоп/с	91,2	515,2	5,7
Удельная производительность на ватт	1,14	2,16	1,9
Максимальное количество обрабатываемых потоков, шт.	12	21504	1792
Одновременно выполняемых потоков, шт.	12	448	37,3
Пропускная способность памяти, ГБ/с	42,7	144	3,4



а



б

Рис. 1. Специализированные компактные суперЭВМ: а – ГВС-10 «Кубань»; б – ГВС-18А

Характеристики специализированных компактных суперЭВМ

	ГВС-10 «Кубань» 2009 г.	ГВС-18А 2010 г.	ГВС-14 2010 г.	ГВС-14Т 2010 г.	Supermicro США
Теоретическая пиковая производительность (двойная точность), ТФлоп/с	0,7	3,7	0,7	2	2
Теоретическая пиковая производительность (одинарная точность), ТФлоп/с	7	18,5	5,4	4	4
Арифметический ускоритель	NVIDIA	AMD	NVIDIA	NVIDIA	NVIDIA
Количество вычислительных ядер, шт.	244	164	66	66	66
Объем ОЗУ вычислительного модуля, ГБ	12	до 48			
Объем ОЗУ арифметического ускорителя, ГБ	7,2	до 16	до 8	до 24	
Операционная система	Linux / MS Windows				
Акустический уровень шума, дБА	48	до 45			–
Габариты (В × Ш × Г), мм	660 × 250 × 605	495 × 210 × 490			–
Система охлаждения	воздушная/жидкостная			воздушная	
Подключение у локальной сети предприятия	Gigabit Ethernet				
Электропитание	220 В, 50 Гц				
Потребляемая мощность, кВт	до 1,5				
Цена, тыс. руб.	–	до 500	до 400	до 900	1000

Гибридные вычислительные системы обладают целым рядом существенных достоинств:

- высокая производительность;
- низкая стоимость;
- низкое удельное энергопотребление;
- возможность использовать в обычном помещении.

Все эти преимущества и позволяют организовать на рабочем месте пользователя вычислительную систему с возможностями суперЭВМ. Однако, сохраняется существенный недостаток – разработка программ и алгоритмов является относительно сложным и более трудоемким процессом.

2. Программный комплекс Master Professional

Комплекс MASTER Professional разработан в виде единой интегрированной среды, в рамках которой пользователь получил возможность проводить как одномерные, так и многомерные расчеты с общими средствами ввода данных, управления счетом и обработки результатов.

Особое внимание при разработке комплекса MASTER Professional уделено интерфейсу, обеспечению максимальных удобств для пользователя при вводе начальных данных, оперативности управления счетом и обработке результатов.

Первым внедренным в среду MASTER Professional численным многомерным методом был популярный в настоящее время метод сглаженных частиц (SPH). Это решение было вызвано:

- широким использованием этого метода в мире для решения важных прикладных задач;
- практической «безавстности» этого метода;
- возможностью эффективного распараллеливания путем геометрической декомпозиции счетной области.

Начальная геометрия и начальные данные задачи вводятся с помощью системы диалогов в режиме ввода и редактирования данных задачи (рис. 2, 3).

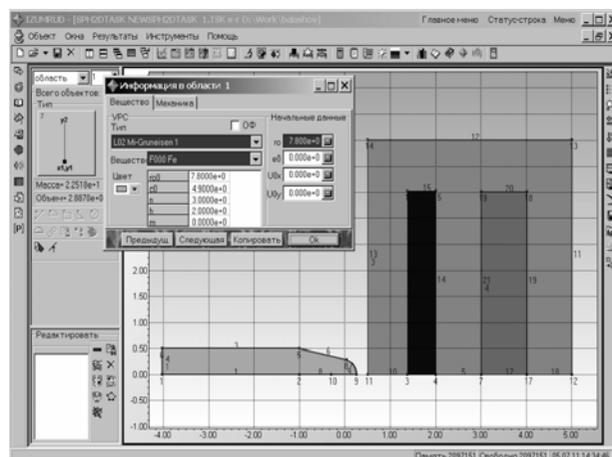


Рис. 2. Ввод данных двумерной осесимметричной задачи

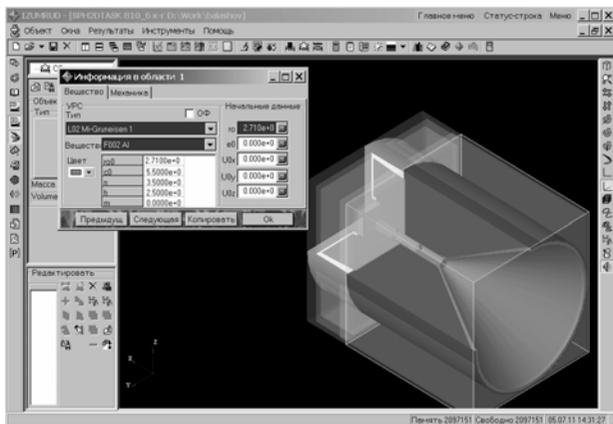


Рис. 3. Ввод данных трехмерной задачи

Далее, на этапе РНД рассчитывается сетка частиц и иницируются рабочие переменные. Все этапы подготовки и редактирования задачи, а также обработка результатов проводятся на процессоре и не переносятся на ускоритель. Таким образом, перекодированию подвергается незначительная часть исходного кода (сервисные модули приблизительно в 50 раз больше функциональных, к которым относятся и численные методики).

Декомпозиция счетных областей производится на стадии РНД, в результате все частицы подразделяются на несколько множеств, каждое из которых обчитывается на отдельном ядре процессора.

При этом основные этапы расчета шага и характерные временные затраты (% времени счетного шага) при использовании единой неразделенной памяти персональной ЭВМ следующие:

- построение списков частиц, находящихся в каждой эйлеровой ячейке (0,35 %);
- расчет удельного сжатия частицы (28,12 %);
- коррекция размера текущего счетного шага (0,01 %);
- расчет новой плотности и термодинамического состояния частицы (0,66 %);
- предварительный расчет размера следующего счетного шага (0,01 %);
- расчет и сохранение новых массовых скоростей частицы (36,22 %);
- копирование новых скоростей (0,32 %);
- расчет удельной энергии частиц и тензора напряжений (33,97 %);
- расчет термодинамического состояния частицы и новых координат (0,33 %);
- окончательный расчет размера следующего счетного шага (0,01 %).

Коэффициент эффективности распараллеливания составляет около 98 % на одно ядро процессора. Высокий суммарный процент временных затрат асинхронных этапов (около 98 %) свидетельствует о хорошей распараллеливаемости алгоритма метода SPH для трехмерных задач.

Замеры временных затрат при расчете задач на одном ускорителе (общая память) дали следующие результаты:

- копирование переменных на ускоритель (10,5 %);
- построение списков частиц, находящихся в каждой эйлеровой ячейке (1,4 %);
- расчет удельного сжатия частицы (18,6 %);
- коррекция размера текущего счетного шага (0,2 %);
- расчет новой плотности и термодинамического состояния частицы (0,12 %);
- предварительный расчет размера следующего счетного шага (0,01 %);
- расчет и сохранение новых массовых скоростей частицы (29,2 %);
- копирование новых скоростей (0,1 %);
- расчет удельной энергии частиц и тензора напряжений (35,1 %);
- расчет термодинамического состояния частицы и новых координат (0,2 %);
- окончательный расчет размера следующего счетного шага (0,01 %);
- копирование переменных с ускорителя (4,5 %).

Полезная доля времени расчета шага составляет 85 %, 15 % – время на обмены переменными между памятью ускорителя и памятью процессора, т. е. плата за использование ускорителей. При использовании нескольких ускорителей появляются неизбежные накладные временные расходы на организацию обменов между ускорителями.

3. Результаты вычислительных экспериментов

3.1. Вычислительная система ГВС-14

В работе в качестве аппаратной базы для моделирования наиболее актуальных физических процессов использована гибридная вычислительная система ГВС-14. Она предназначена для выполнения научных расчетов на арифметических ускорителях. Эта вычислительная система построена на базе системной платы ASUS P6T7 SuperComputer с универсальным процессором Intel Core i7-920 и четырех графических арифметических ускорителей NVIDIA GTX480.

На данном этапе разработки программы реализована возможность выполнения трехмерного моделирования на одном и двух ускорителях. Для ускорителя реализованы наиболее востребованные уравнения состояний (уравнения состояния Ми – Грюнайзена, идеального газа, ВВ кубический, ВВ JWЛ, РОСА). Распараллеливание на два ускорителя выполнено с использованием технологии OpenMP.

Результаты экспериментов представлены в табл. 3–5. Для сравнения приведены длительности выполнения программы на универсальном процессоре Intel Core i7-920 (все ядра с включенным Hyper-Threading) с использованием одного и двух ускорителей.

Для проведения сравнительных экспериментов были выбраны три типичных модельных задачи физики взрыва и удара.

Таблица 3

Длительность выполнения задачи на универсальном процессоре и арифметических ускорителях в секундах

Этап	Точек, шт.	T1 (ЦП)	T2 (1 Ару)	T3 (2 Ару)	K = T1/T2	K = T1/T3
Всего	74101	766	74	56	10,4	13,7
	597912	12739	969	645	13,1	19,8
	1155627	–	2392	1588	–	–
	1590112	–	3581	2359	–	–
Последний шаг	74101	$1,3 \cdot 10$	$1,3 \cdot 10^{-1}$	$1,1 \cdot 10^{-1}$	9,5	11,9
	597912	$1,1 \cdot 10^1$	$9,4 \cdot 10^{-1}$	$6,5 \cdot 10^{-1}$	11,8	16,9
	1155627	–	$1,9 \cdot 10$	$1,3 \cdot 10$	–	–
	1590112	–	$2,5 \cdot 10$	$1,7 \cdot 10$	–	–
1 точка	74101	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-6}$	$1,4 \cdot 10^{-6}$	9,5	11,9
	597912	$1,9 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$	11,8	16,9
	1155627	–	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$	–	–
	1590112	–	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$	–	–

Таблица 4

Длительность выполнения задачи на универсальном процессоре и арифметических ускорителях в секундах

Этап	Точек, шт.	T1 (ЦП)	T2 (1 Ару)	T3 (2 Ару)	K = T1/T2	K = T1/T3
Всего	43092	903,0	98,0	81,0	9,2	11,1
	409602	27066,0	2076,0	1439,0	13,0	18,8
	848046	–	6139,0	3881,0	–	–
	1122290	–	9911,0	6474,0	–	–
Последний шаг	43092	$5,0 \cdot 10^{-1}$	$7,8 \cdot 10^{-2}$	$6,1 \cdot 10^{-2}$	6,4	8,2
	409602	$6,2 \cdot 10$	$7,2 \cdot 10^{-1}$	$4,6 \cdot 10^{-1}$	8,6	13,7
	848046	–	$1,6 \cdot 10$	$1,0 \cdot 10$	–	–
	1122290	–	$2,4 \cdot 10$	$1,5 \cdot 10$	–	–
1 точка	43092	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-6}$	$1,4 \cdot 10^{-6}$	6,4	8,2
	409602	$1,5 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$	8,6	13,7
	848046	–	$1,9 \cdot 10^{-6}$	$1,2 \cdot 10^{-6}$	–	–
	1122290	–	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$1,3 \cdot 10^{-6}$	–	–

Таблица 5

Длительность выполнения задачи на универсальном процессоре и арифметических ускорителях в секундах

Этап	Точек, шт.	T1 (ЦП)	T2 (1 Ару)	K = T1/T2
Всего	45260	224,0	48,0	4,7
	428977	6772,0	687,0	9,9
	1013623	–	2533,0	–
	1607448	–	5218	–
Последний шаг	45260	16,9	5,6	3,0
	428977	741,3	73,0	10,2
	1013623	–	260,8	–
	1607448	–	518,16	–
1 точка	45260	$3,7 \cdot 10^{-4}$	$1,2 \cdot 10^{-4}$	3,0
	428977	$1,7 \cdot 10^{-3}$	$1,7 \cdot 10^{-4}$	10,2
	1013623	–	$2,6 \cdot 10^{-4}$	–
	1607448	–	$3,2 \cdot 10^{-4}$	–

3.2. Задача проникания стального ударника в алюминиевую преграду

Стальной ударник налетает на массивную алюминиевую плиту с начальной скоростью 1 км/с под углом 45° к поверхности преграды (угол атаки 45°). Уравнения состояния в форме Ми – Грюнайзена с константами стали и алюминия. Расчет производится с учетом модели упругопластического деформирования Вилкинса без использования моделей разрушения до времени 300 мкс.

На рис. 4 приведены отдельные кадры процесса проникания.

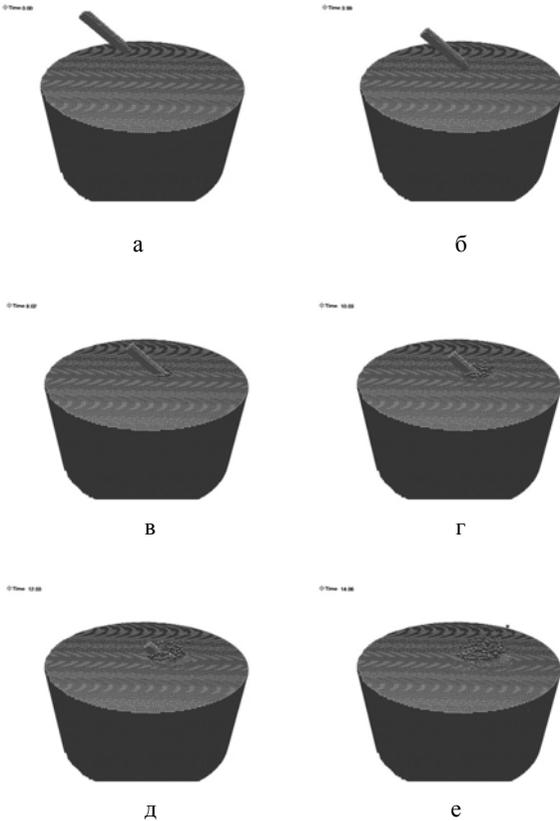


Рис. 4. Процесс проникания: а – 0,0 мкс; б – 40 мкс; в – 80 мкс; г – 100 мкс; д – 120 мкс; е – 140 мкс

Выполнен анализ зависимостей кинетической энергии от времени на универсальном процессоре и АрУ, а также визуальные картины, отражающие динамику процессов. Результат позволяет утверждать, что расчеты на ускорителе и процессоре совпадают.

В табл. 3 приведены длительности выполнения расчета на универсальном процессоре и арифметических ускорителях (одном и двух).

В результате на данной задаче получено ускорение на одном ускорителе от 10 до 13 раз и на двух ускорителях от 11 до 20 раз по сравнению с универсальным процессором. Расчеты на процессоре выполнены на задачах до 600 тыс. частиц, так как выполнение задач большего размера заняло бы значительное календарное время. Косвенно ускорение можно оценить по длительности расчета одной точ-

ки. Показано, что длительность расчета одной точки на АрУ в 10–20 меньше, чем на универсальном процессоре. Эффективность распараллеливания на два ускорителя около 50 %. Максимальная сосчитанная задача в 1600 тыс. точек ограничена памятью ускорителя.

3.3. Задача соударения двух трубчатых ударников

Трубчатый ударник из тантала налетает со скоростью 1 км/с под углом 90° на покоящийся трубчатый элемент из алюминия. Уравнения состояния в форме Ми – Грюнайзена с константами тантала и алюминия. Расчет производится с учетом модели упругопластического деформирования Вилкинса без использования моделей разрушения до времени 200 мкс.

На рис. 5 приведены отдельные кадры процесса соударения.

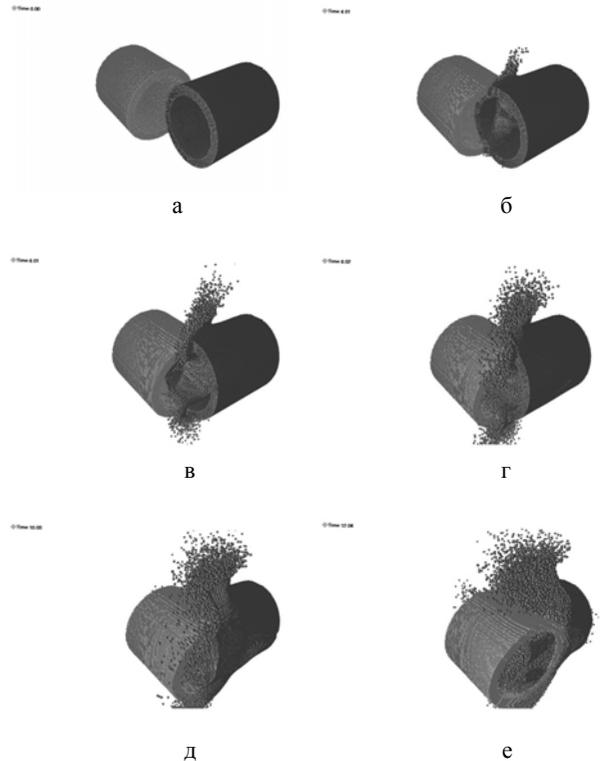


Рис. 5. Процесс соударения ударников: а – 0 мкс; б – 40 мкс; в – 60 мкс; г – 80 мкс; д – 100 мкс; е – 120 мкс

Проведена проверка и сравнение качества результатов. Результаты на универсальном процессоре и ускорителях совпадают.

В табл. 4 приведены длительности выполнения расчета на универсальном процессоре и арифметических ускорителях (одном и двух).

В результате на данной задаче получено ускорение на одном ускорителе от 9 до 13 раз и на двух ускорителях от 11 до 19 раз по сравнению со всем универсальным процессором. Расчеты на процессоре выполнены на задачах до 500 тыс. частиц, так как выполнение задач большего размера заняло бы значительное календарное время. Длительность расчета

одной точки на АрУ в 10–20 меньше, чем на универсальном процессоре. Эффективность распараллеливания на два ускорителя более 60 %. Максимальная сосчитанная задача в 1120 тыс. точек ограничена памятью ускорителя.

3.4. Задача взрыва ВВ в цилиндрической трубе

Цилиндрическая стальная труба с боковым отверстием заполнена в начальный момент взрывчатым веществом, которое инициируется в начальный момент. Продукты ВВ воздействуют на цилиндрическую трубу. Воздействие ВВ приводит к существенной деформации стальной трубы и ее упругопластическому нагружению. Уравнение состояния в форме Ми – Грюнайзена с константами железа. Расчет производится с учетом модели упругопластического деформирования Вилкинса без использования моделей разрушения до времени 70 мкс. Уравнение состояния для ВВ стандартное кубическое. Начальная плотность ВВ $1,67 \text{ г/см}^3$, calorийность – 3,6 кДж/г.

На рис. 6 приведены отдельные кадры процесса взрыва в цилиндрической трубе в расчете.

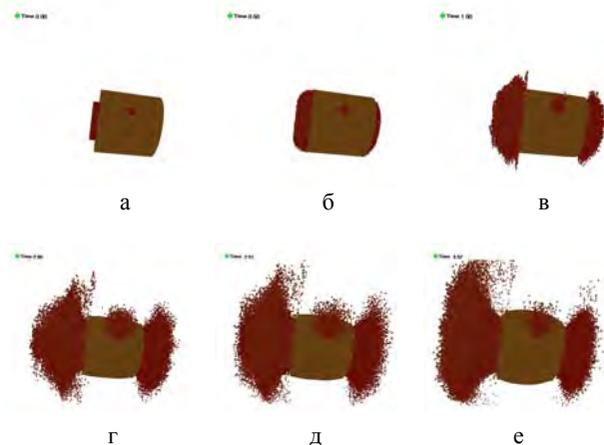


Рис. 6. Процесс воздействия ВВ на цилиндрическую трубу: а – 0 мкс; б – 5 мкс; в – 10 мкс; г – 20 мкс; д – 25 мкс; е – 35 мкс

Выполнено качественное сравнение результатов расчетов универсального процессора и арифметических ускорителей.

В табл. 5 приведены длительности выполнения расчета на различных аппаратных вычислителях.

В результате на данной задаче получено ускорение на одном ускорителе от 3 до 10 раз. Расчеты на процессоре выполнены на задачах до 450 тыс. частиц, так как выполнение задач большего размера заняло бы значительное календарное время. Длительность расчета одной точки на АрУ до 10 раз меньше, чем на универсальном процессоре. Максимально посчитанный размер в 1600 тыс. точек ограничен памятью ускорителя.

Заключение

В работе изложены результаты первого этапа разработки и реализации параллельного варианта методики SPH программного комплекса MASTER Professional для моделирования задач физики взрыва и удара на гибридных вычислительных системах с арифметическими ускорителями.

Проведен анализ алгоритмов моделирования трехмерных задач, приведены значения длительностей выполнения расчетов нескольких характерных задач при моделировании гидродинамических, упругопластических и детонационных процессов, показаны полученные ускорения, дана оценка результатов.

При выполнении работы на различных задачах получены ускорения относительно универсального процессора (четыре ядра Intel Core i7-920):

- на задаче проникания до 20 раз;
- на задаче соударения до 19 раз;
- на задаче воздействия ВВ до 10 раз.

В результате работы до 98 % длительности выполнения расчета производится на ускорителе. Эффективность распараллеливания на двух ускорителях на данном этапе составляет от 40 до 60 %.

Эффективное использование двух и более арифметических ускорителей позволяет рассчитывать на ускорение до 40–50 раз по сравнению с целым универсальным процессором.

Литература

1. Давыдов И. А., Пискунов В. Н., Мешков Е. Е. и др. Программный комплекс MASTER – интегрированная среда визуального компьютерного моделирования процессов физики сплошных сред // Сборник тезисов XVII Всероссийской конференции «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов и решение задач математической физики с приложением к многопроцессорным системам». Абрау-Дюрсо, 2008.

2. Специализированные компактные суперЭВМ [Электронный ресурс] <http://www.vniief.ru/directions/grazrab/catalog/infprod/razrabotki/super-evm.html>.

3. Super Micro Computer, Inc. [Электронный ресурс] <http://www.supermicro.com>.

4. Tchekhounov E., Roudenko V., Chabourov M. Tutorial and Research Package MASTER on Continuum Mechanics. Proc. Second European Conference // Physics Teaching in Engineering Education. Budapest. Hungary, 2000.

5. Башуров В. В., Крючков И. А., Павлов С. В. и др. Визуальное численное моделирование процессов физики взрыва и удара в программном комплексе MASTER Professional // Сб. материалов докладов Международной конференции «Седьмые Окуневские чтения». Санкт-Петербург, 2011.