

СО-ДИЗАЙН ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ АСТРОФИЗИКИ И ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ НА ГИБРИДНЫХ СУПЕР-ЭВМ

Б. М. Глинский, И. Г. Черных, И. М. Куликов, Д. В. Винс, А. В. Снытников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск

В докладе представлена технология разработки программ математического моделирования на супер-ЭВМ экзафлопсного класса, включающая в себя со-дизайн параллельных алгоритмов, имитационное моделирование и анализ энергоэффективности. В качестве примера использования нашей технологии, рассматривается создание программного обеспечения для решения задач астрофизики и физики плазмы.

Введение

Под со-дизайном [1] мы понимаем адаптацию вычислительного алгоритма и математического метода под архитектуру суперкомпьютера на всех этапах решения задачи. Для разработки научного программного обеспечения мы предлагаем следующие четыре этапа со-дизайна, такие как выбор **физической модели** исходя из постановки задачи и возможности ее реализации на целевой архитектуре суперкомпьютера, выбор **математической модели**, которая будет достоверно описывать исследуемые физические процессы учитывая особенности реализации модели на экзафлопс-компьютере, выбор **вычислительных методов** учитывая особенности реализации модели на экзафлопсной системе и **реализация** параллельного кода для экзафлопс-компьютера.

Содизайн для задач астрофизики

Как уже сказано во введении создание программ для математического моделирования с использованием суперЭВМ петафлопсной для и особенно экзафлопсной производительности является сложной научной задачей и требует комплексного подхода на всех этапах создания численной модели. В концепции рассмотренных четырех этапов, при построении кода для решения астрофизических задач, мы исходили из специфики астрофизических задач и на каждом этапе решали отдельные, но взаимосвязанные задачи. Далее мы подробно опишем каждый этап.

На этапе построения физической модели фактически происходит спецификация решаемой задачи, определяются подсеточные физические процессы. Однако и на этапе формулировки физической модели мы можем добиться задела для следующих этапов. В астрофизических задачах как правило моделируется два физически различных компонента – газовая (для описания межгалактического и галактического газа, а также звезд при моделировании их динамики, например, их коллапс) и бесстолкновительная (для описания звезд и темной материи в галактиках, реже межзвездной пыли) компоненты. С моделированием бесстолкновительной компоненты возникают достаточно большие проблемы. Так при формулировке модели многих тел, которая традиционно используется в качестве модели бесстолкновительной среды, и последующим ее численным решением возникает проблема жесткого ограничения на количество частиц, численные шумы и проблема выбора ядра в методах, основанных на частицах. В качестве мощной альтернативы для модели многих тел может быть использована модель, основанная на первых моментах бесстолкновительного уравнения Больцмана [2, 3]. Такая модель была успешно апробирована на задачах эволюции и столкновения галактик.

Если математическая формулировка газодинамической компоненты проблем не вызывает, то математическая формулировка первых моментов бесстолкновительного уравнения Больцмана может быть записана в разной форме, что связано с рассматриваемыми физическими процессами. Специфика астрофизических задач такова, что учет теплопроводных членов не имеет решающего значения и вся динамика определяется распределением плотности, скорости и функцией энтропии (в случае газовой компоненты это давление, в случае бесстолкновительной компоненты это тензор дисперсии скоростей).

Для численного решения гиперболических уравнений был использован оригинальный численный метод, основанный на комбинации метода Годунова, операторного подхода и кусочно-параболического метода на локальном шаблоне для обеспечения высокого порядка точности. Система уравнений решается в два этапа: эйлеров, на котором решаются уравнения без адвективных членов, и лагранжев, на котором происходит адвективный перенос. На эйлеровом этапе гидродинамические уравнения для обеих компонент записываются в неконсервативной форме и исключаются адвективные члены. В результате такая система на интерфейсе двух ячеек имеет аналитическое решение, которое используется для записи потоков через интерфейс двух ячеек. Для повышения порядка точности используется кусочно-параболический метод (PPML) на локальном шаблоне, который состоит в построении локальных парабол внутри ячеек для каждой гидродинамической величины.

Главное отличие PPML от классического PPM метода состоит в использовании локального шаблона для вычислений. Это позволяет на этапе параллельной реализации, в основе которой геометрическая декомпозиция расчетной области, использовать только один слой перекрытия подобластей, что упрощает реализацию граничных условий и уменьшает количество пересылок, следовательно способствует росту эффективности параллельной реализации. На лагранжевом этапе используется аналогичный численный подход. На данный момент решение уравнения Пуассона основано на методе быстрого преобразования Фурье. Это связано с тем, что решение уравнения Пуассона занимает несколько процентов от времени счета. После решения уравнения Пуассона и гидродинамических уравнений происходит корректировка решения переопределенной системы уравнений, для этого используется оригинальная процедура для сохранения полной энергии системы и гарантии неубывания энтропии: ренормализация вектора скорости на границе газ-вакуум, а также коррекция энтропии (или внутренней энергии) и тензора дисперсии скоростей.

Основное ограничение астрофизических кодов, которые основаны на методах AMR и SPH, это ограничение на масштабируемость. Это связано с использованием процедуры древовидного поиска в этих методах. Как известно, такие процедуры имеют жесткие ограничения на масштабируемость, что и приводит к ограничениям указанных гидродинамических методов. Также в случае метода AMR существуют значительные проблемы, связанные с пересчетом между сетками, что может привести к искажению численного решения. В представленном подходе используются регулярные сетки.

Основное внимание сосредоточено на трех архитектурах: классическая многопроцессорная архитектура; гибридная архитектура, оснащенная графическими ускорителями NVIDIA Tesla/Kepler, гибридная архитектура, оснащенная ускорителями Intel Xeon Phi. Главной характеристикой в данном случае является топология связей между вычислительными ядрами. В случае классической архитектуры топология связей может быть произвольной, но в большинстве случаев используется многомерная декартова топология. В случае использования графических ускорителей на первый план выходит многоуровневая декартова топология GPU. А в случае ускорителей Intel Xeon Phi имеет место топология «кольцо», что также является декартовой топологией. Таким образом, мы должны сфокусироваться именно на произвольных многомерных декартовых топологиях.

В качестве основного инструмента для разработки параллельного кода использовалась библиотека MPI. Для вычисления на графических ускорителях использовалась технология NVIDIA CUDA. Данный инструмент был выбран в связи с тем, что несмотря на сложность его использования позволяет максимально контролировать процесс вычислений и является низкоуровневым средством передачи данных между CPU and GPU, а также позволяет явно определять топологию вычислительных нитей и контролировать ресурсы исполнения этих нитей. Для вычислений на ускорителях

Intel Xeon Phi в native режиме была использована технология OpenMP для декомпозиции внешних вычислительных циклов по ячейкам подобласти, в случае offload режима использования ускорителя использовано расширение технологии OpenMP, в котором явно указывались передаваемые области памяти и процедуры, выполняемые на ускорителе.

Заключительным элементом концепции со-дизайна, представленной в данном докладе, является имитационное моделирование представленных алгоритмов с помощью пакета AGNES [2]. На рис. 1 показана эффективность распараллеливания в слабом смысле, полученная путем имитационного моделирования по сравнению с реальным расчетом на кластере СпбГУ «Политехник», оснащенный ускорителями вычислений Intel Xeon Phi 5120 D.

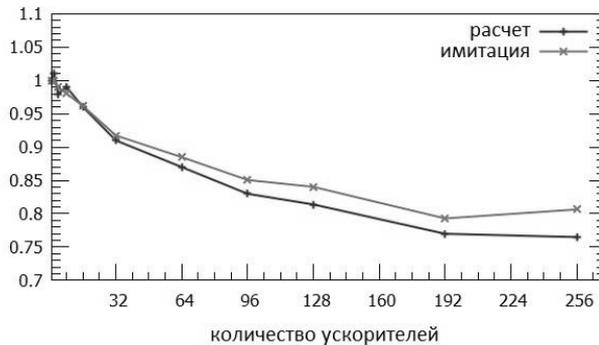


Рис. 1. Эффективность распараллеливания в слабом смысле для астрофизического кода. Сравнение имитационного моделирования («имитация») с реальным расчетом («расчет»)

Также представляет интерес вопрос о том, как выглядит эффективность распараллеливания для большого количества вычислительных ядер. Особенно это важно в том случае, когда готовится вычислительный эксперимент на суперЭВМ эксафлопсного класса: необходимо заранее иметь уверенность в том, что использование такой исключительно дорогой в эксплуатации машины будет эффективным. Ответ на этот вопрос для астрофизического кода показан на рис. 2. На рисунке видно, что с графическими ускорителями эффективность сохраняется для значительно большего количества ядер.

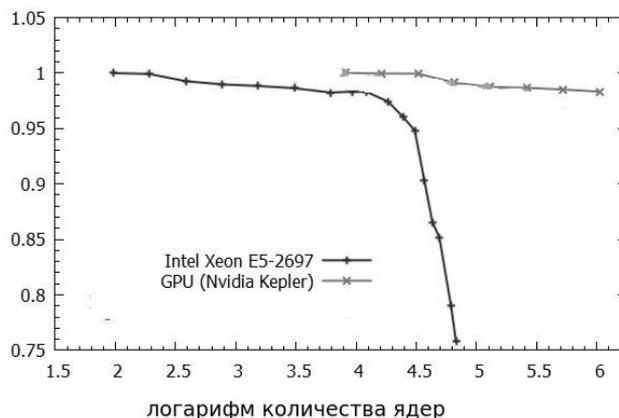


Рис. 2. Эффективность распараллеливания в слабом смысле для астрофизического кода. Результат получен путем имитационного моделирования. Сравнение реализации на процессорах Intel Xeon и графических ускорителях Nvidia Kepler

Со-дизайн для задач физики плазмы

Применение концепции со-дизайна будет продемонстрировано на примере решения задачи о взаимодействии мощного электронного пучка с высокотемпературной плазмой [4]. Физическим приложением таких расчетов могут быть эксперименты на открытой ловушке ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН), схемы быстрого поджига в инерциальном термоядерном синтезе или солнечные вспышки II и III типов.

В данном случае применение со-дизайна начинается непосредственно на этапе физического рассмотрения задачи. Из эксперимента на ГОЛ-3 известно, что модуляция плотности плазмы не превышает 300 % [5]. Это означает, что при использовании метода частиц в ячейках количество модельных частиц в соседних ячейках не может заметно отличаться. Таким образом, при решении конкретной физической задачи нет необходимости в использовании динамической балансировки, что повышает надежность и эффективность параллельного алгоритма.

На этапе разработки численных методов для решения уравнений Максвелла был выбран метод, основанный на разностных аналогах законов Фарадея и Ампера. Таким образом, нет необходимости в решении уравнения Пуассона. Вместо этого, уравнения, представляющие собой численный аналог законов Фарадея и Ампера, решаются с помощью схемы Лэнгдона–Лазински [6]. Таким образом удается реализовать метод решения уравнения поля с фактически неограниченной масштабируемостью.

На этапе выбора архитектуры суперЭВМ важную роль играют особенности метода частиц в ячейках, т. е. выполняется подстройка реализации метода под особенности наиболее оптимальной архитектуры суперЭВМ. Для вычисления новых значений координат и импульсов модельных частиц необходимы значения электрических и магнитных полей в месте нахождения частицы. Каждая из трех компонент, как электрического, так и магнитного полей, хранятся в отдельном трехмерном массиве. Таким образом, на каждом временном шаге для каждой модельной частицы происходит обращение к 6 трехмерным массивам. В силу того, что модельные частицы расположены внутри области случайным образом, то и доступ к массивам также получается неупорядоченным. Это означает, что использование кэш-памяти не может в данном случае сократить время счета. Если часть массива поля была помещена в кэш для расчета движения частицы, то при расчете движения следующей частицы использовать эту помещенную в кэш часть массива будет невозможно в силу того, что другая частица находится в совершенно другой части области. Таким образом целесообразно хранить частицы не единым списком для всей области, а отмортированными по ячейкам, и также дублировать значения электромагнитного поля в ячейках для повышения эффективности использования кэш-памяти.

На этапе выбора средств разработки было принято решение использовать технологию CUDA. При наличии большого количества технологий параллельного программирования для гибридных суперЭВМ, таких как OpenCL, OpenMP или OpenACC, именно CUDA предоставляет наибольшие возможности для оптимизации и достижения оптимальной производительности.

Также было проведено исследование эффективности кода для большого количества ядер путем имитационного моделирования. Результаты показаны на рис. 3. Как и для астрофизического кода, с графическими ускорителями эффективность сохраняется для значительно большего количества ядер.

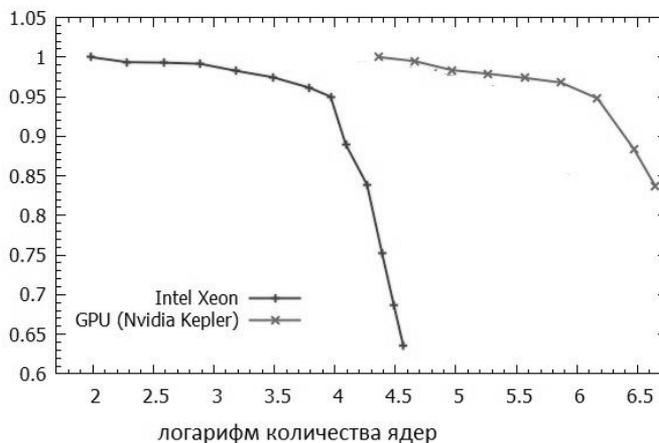


Рис. 3. Эффективность распараллеливания в слабом смысле для плазменного кода. Результат получен путем имитационного моделирования. Сравнение реализации на процессорах Intel Xeon и графических ускорителях Nvidia Kepler

Заключение

Суперкомпьютерное моделирование стало незаменимым инструментом обработки огромного количества наблюдательных и экспериментальных данных, накопленных человечеством. Несмотря на ведущиеся разговоры об архитектуре будущих эксафлопсных систем, уже сейчас нужно создавать алгоритмы и программное обеспечение, которое решает задачи эффективного использования десятков и сотен тысяч процессоров, задачи передачи и хранения большого объема данных. В докладе предложена технология создания такого алгоритмического и программного обеспечения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 16-11-10028. Разработка программы была поддержана грантами РФФИ 14-07-00241, 15-01-00508 и 16-07-00434.

Литература

1. Glinskiy B. M., Kulikov I. M., Snytnikov A. V., Romanenko A. A., Chernykh I. G., Vshivkov V. A. Co-design of parallel numerical methods for plasma physics and astrophysics // *Supercomputing frontiers and innovations*. 2014. Vol. 1, N 3. P. 88–98.
2. Mitchell P. D., Lacey C. G., Baugh C. M., Cole Sh. How well can we really estimate the stellar masses of galaxies from broad-band photometry? // *MNRAS*. 2013. Vol. 435 (1). P. 87–114.
3. Kulikov I. M. GPUPEGAS: A New GPU-accelerated Hydrodynamic Code for Numerical Simulations of Interacting Galaxies // *The Astrophysical Journal Supplement Series*. 2014. Vol. 214, N 1.
4. Lotov K. V., Timofeev I. V., Mesyats E. A., Snytnikov A. V., Vshivkov V. A. Note on quantitatively correct simulations of the kinetic beam-plasma instability // *Physics of Plasmas*. 2015. Vol. 22. 024502.
5. Астрелин В. Т., Бурдаков А. В., Поступаев В. В. Моделирование динамики плотного излучающего плазменного сгустка для установки ГОЛ-3-II // *Сиб. журн. индустр. матем.* 1998. Вып. 1:2. С. 45–50.
6. Langdon A., Lasinski B. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models // *Methods in Computational Physics*. 1976. Vol. 16. P. 327.
7. Podkorytov D., Rodionov A., Sokolova O., Yurgenson A. Using Agent-Oriented Simulation System AGNES for Evaluation of Sensor Networks // *LNCS*. 2010. Vol. 6235. P. 247–250.