

Автоматизация конечно-разностного моделирования диффузионных задач на гибридных вычислительных кластерах

Дмитрий Глызин
glyzin@gmail.com

Даниил Фролов
frolovd94@gmail.com

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Таруса, 21-23 апреля 2015 г.

Задача

- Инструмент для моделирования уравнений с запаздыванием, распределенных в одно-, дву- и трехмерных областях (содержащих диффузионный член)
- Поддержка современного оборудования — неоднородные архитектуры с иерархической организацией памяти
- Повышение уровня абстракции — автоматическая генерация шаблонного кода для пользовательских функций
- Интерфейс для управления вычислениями

Существующие проекты

Моделирование уравнений в частных производных (уравнения с запаздыванием не поддерживаются)

- PETSc — Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- DUNE — Distributed and Unified Numerics Environment
- HYPRE — High Performance Preconditioners
- ExaStencils (в разработке)

Структура пакета

- Пользовательский интерфейс
 - создание/модификации проекта
 - управление вычислениями
- Предварительная обработка
 - геометрия и свойства области
 - библиотека пользовательских функций
 - разбиение задачи на блоки и распределение блоков по вычислительным устройствам
- Вычислительное ядро
 - параллельный фреймворк
 - алгоритмы интегрирования и анализа данных

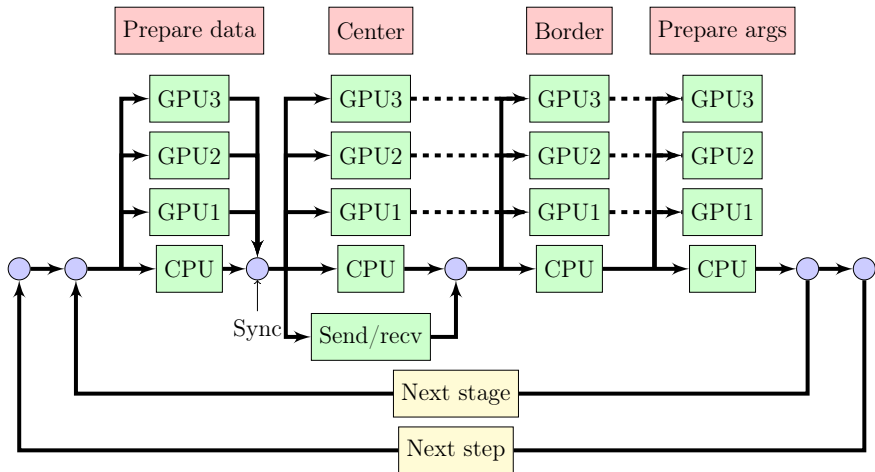
Вычислительное ядро

- Параллельный фреймворк
 - крупнозернистый параллелизм: разбиение задачи на блоки и распределение блоков по устройствам
 - пересылка необходимых данных между устройствами на разных узлах с помощью MPI
 - обмен данными через pinned-память между устройствами на одном узле
 - мелкозернистый параллелизм в рамках блока: работа с общей памятью, OpenMP на CPU и CUDA на GPU
 - использование арифметики двойной точности: CPU дает значительный вклад в общую производительность

Вычислительное ядро

- Алгоритмы интегрирования и анализа данных
 - Явные схемы Рунге-Кутты с контролем точности на шаге
 - Неявные схемы (эффективнее, т.к. задачи жесткие, но сложнее в реализации)
 - Алгоритмы продолжения по параметру для поиска фазовых перестроек
 - Статистический и размерностный анализ аттракторов

Параллельная обработка

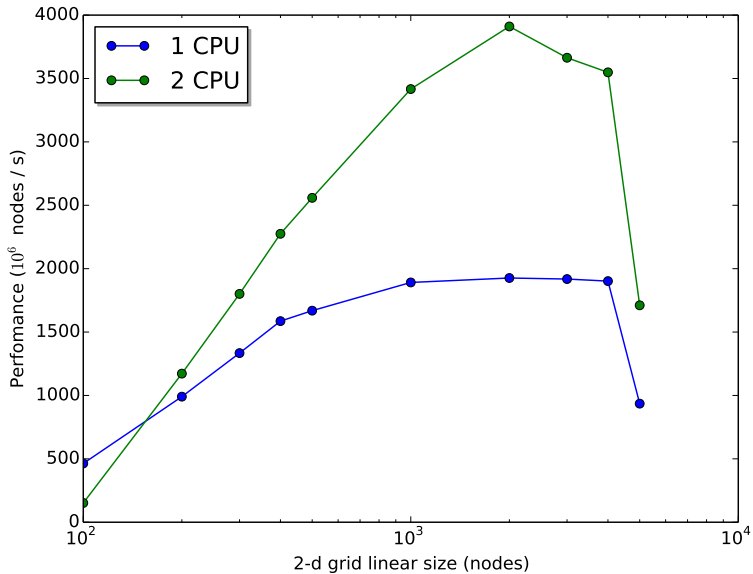


Тестирование производительности

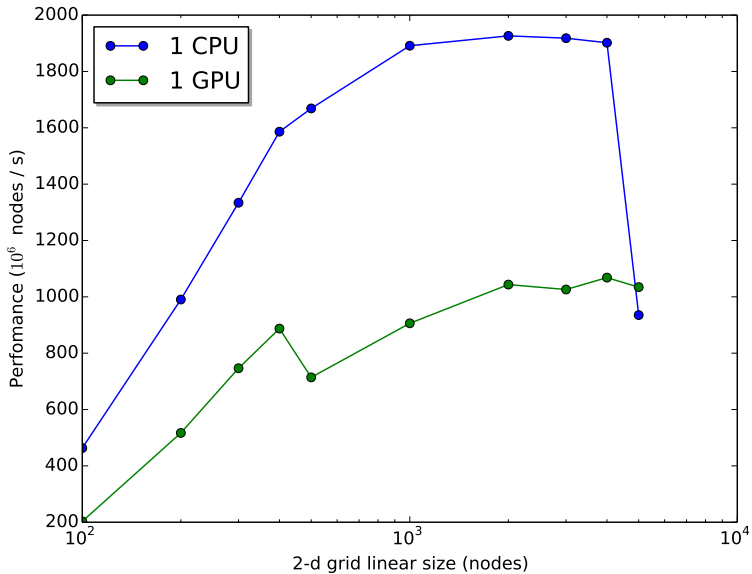
- Оборудование: 2 узла: 2xCPU E5-2690 (8 ядер, 2.9ГГц), 3xGPU Tesla M2090, Infiniband QDR 40Gbps
- ПО: SLES 12, gcc 4.8, Mellanox OFED 2.4, OpenMPI 1.8, CUDA Toolkit 7.0, SLURM 14.11
- Тестовая задача: уравнение теплопроводности
- Метод Эйлера, постоянный шаг

В дальнейшем 2 центральных процессора (16 ядер) в рамках одного узла используются как единое вычислительное устройство, обозначенное CPU.

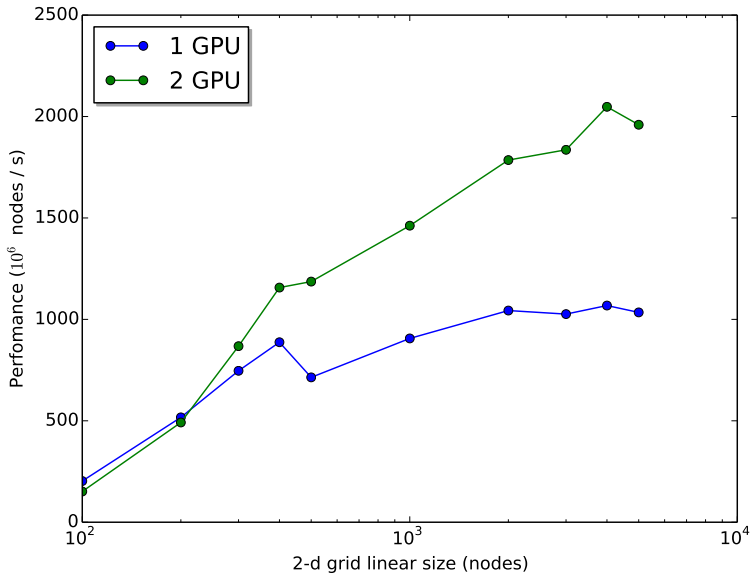
CPU, 1 и 2 узла



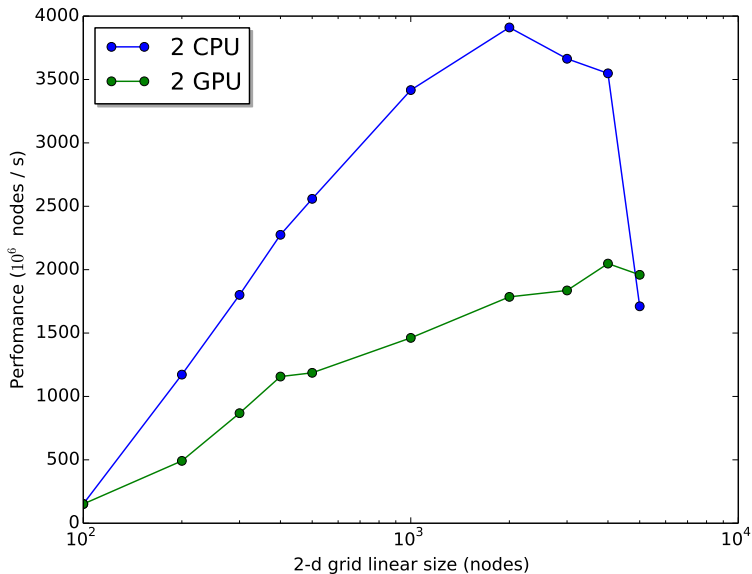
GPU и CPU



1 и 2 GPU на 1 узле



CPU на 2 узлах и 2 GPU на 1 узле



Итоговое сравнение

