

Разработка методического и программного обеспечения для использования на кластерных вычислительных системах гибридной архитектуры, 2015-2016 гг.

А.А. Шеринёв, А.В. Кашковский

А. Реализация НС модуля для суперкомпьютеров с гибридной архитектурой

Был разработан расчетный модуль для моделирования трехмерных нестационарных течений сжимаемого газа на основе решения полных уравнений Навье-Стокса (НС) на структурированной сетке в общих криволинейных координатах, предназначенный для использования на гибридных вычислительных системах. В расчетном модуле для аппроксимации конвективных членов используются схемы сквозного счета высокого порядка точности, в том числе MUSCL (Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws) TVD (Total Variation Diminishing) схема третьего порядка точности. В этом случае значения на гранях расчетных ячеек восстанавливаются из значений в центрах ячеек, после чего используется функция-ограничитель (в частности, используется функция *minmod*) для того чтобы избежать нефизичных осцилляций в окрестностях разрывов газодинамических переменных. Вычисление потоков через грани ячеек выполняется с помощью приближенных солверов для задачи Римана о распаде разрыва, таких как солвер Ван Леера (Van Leer) и солвер Хартена-Лакса-Ван Леера-Эйнфельдта (Harten-Lax-Van Leer-Einfeldt, HLLE). Также реализована WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) схема пятого порядка точности. Для вычисления диффузионных членов используются центральные разности второго порядка точности. Используется явное интегрирование по времени: с помощью схемы Эйлера (первого порядка точности) либо с помощью так называемых TVD схем Рунге-Кутты второго или четвертого порядка точности. Решение стационарных задач производится методом установления.

Архитектура НС модуля

Как следует из изложенного выше, архитектура ГПУ накладывает определенные ограничения и предъявляет некоторые требования к организации расчетного кода. При разработке модуля указанные факторы были по возможности учтены.

Расчетный модуль написан на языке C и API (application programming interface) CUDA с использованием свободных программ и библиотек, таких как NU/Linux, GCC, OpenMP, MPI, zlib, VTK и ориентирован на использование на

гибридных вычислительных кластерах с большим числом ГПУ.

Для распределения данных между ГПУ используется геометрическая декомпозиция расчетной области. Расчетная область делится на куски по числу ГПУ, после чего каждый ГПУ выполняет вычисления в ячейках соответствующей под-области и производит обмен данными с соседними ГПУ на каждом шаге. В пределах одного вычислительного узла управление всеми ГПУ этого узла выполняется с помощью потоков OpenMP threads, а обмен данными проводится через память ЦПУ. Обмен между различными вычислительными узлами использует протокол MPI. Общая схема параллелизации приведена на Рис. 1. Нумерация ячеек организована так, чтобы ячейки с одним и тем же индексом по оси Z лежали в непрерывном куске памяти. Это приводит к схеме, в которой область делится на "партиции" вдоль оси Z, и позволяет уменьшить число используемых буферов обмена.

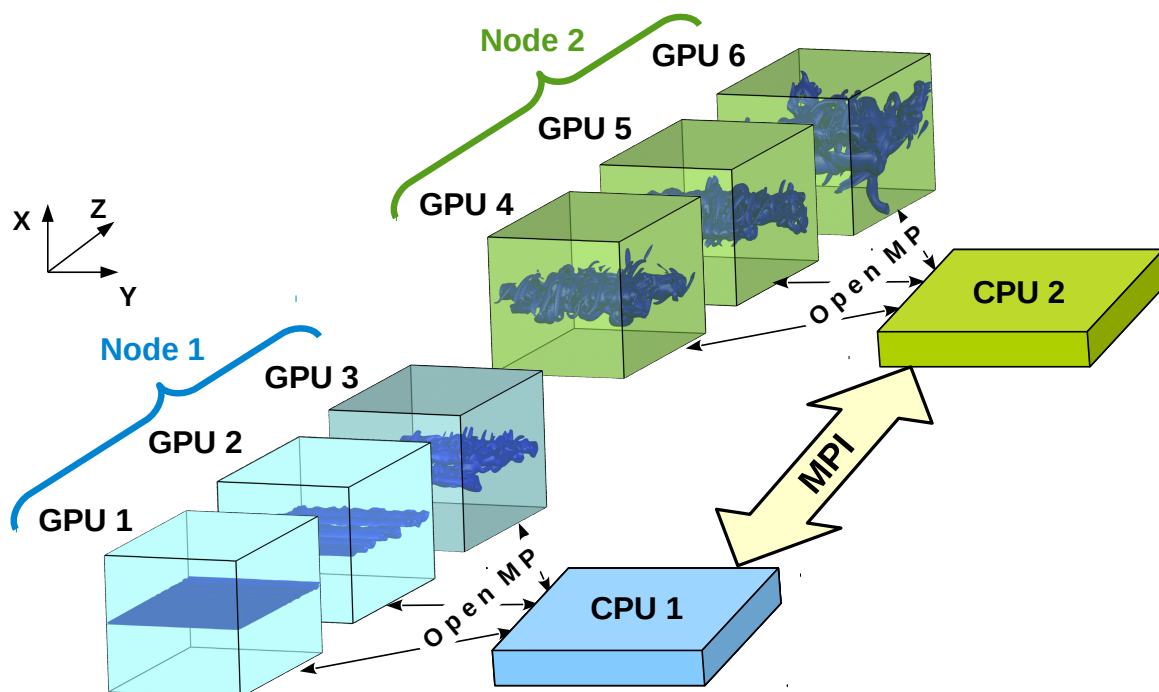


Рис. 1: Схема многоуровневой параллелизации НС модуля.

Для того чтобы уменьшить число обменов между ЦПУ и ГПУ, все необходимые данные передаются на ГПУ в самом начале расчета и используются только там. Обрато на ЦПУ данные передаются только для записи файлов с результатами на диск.

Все вычисления также проводятся только на ГПУ. В процессе вычислений ЦПУ обращается к ГПУ и последовательно запускает ядерные функции, соответствующие различным этапам численного алгоритма. После завершения работы каждой ядерной функции управление возвращается ЦПУ. Подобный подход позволяет гибко оперировать различными вариантами численных методов. На

Рис. 2 приведена временная диаграмма модуля, показывающая в где и когда запускаются различные процедуры, входящие в расчетный модуль.

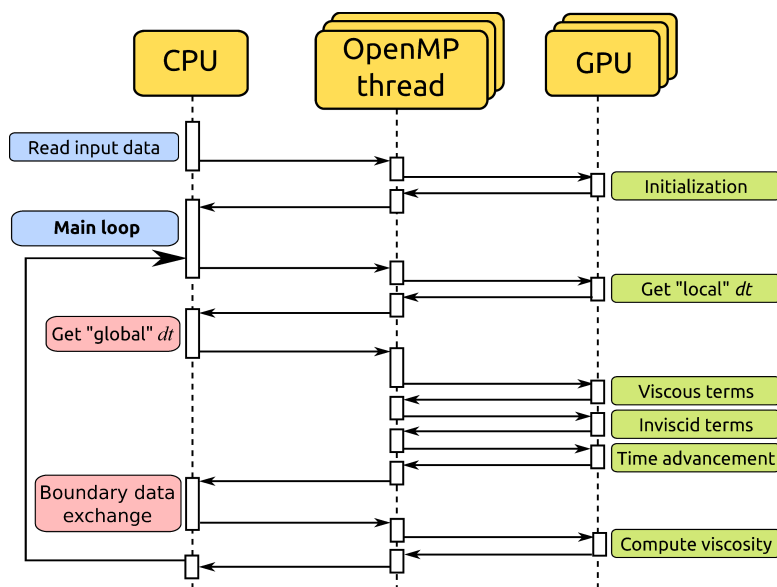


Рис. 2: Временная диаграмма расчетного НС модуля.

Эффективность параллелизации

Измерения параллельного ускорения были проведены для задаче о сверхзвуковом слое смещения, решаемой на фиксированной расчетной сетке из $120 \times 120 \times 1000 = 14.4$ миллионов ячеек. Была проведена серия расчетов на различном числе ГПУ (от 1 до 9). Результаты приведены на Рис. 3. При увеличении числа ГПУ ускорение росло практически линейно вплоть до 6 ГПУ, после чего эффективность снижается. Так для 9 ГПУ эффективность составила порядка 90 %. Однако стоит отметить, что в последнем случае на каждом из 9 ГПУ используется примерно 10% памяти, и затраты на передачу данных между ГПУ становятся сравнимы со временем полезных вычислений. Также в расчетах было измерено распределение вычислительной нагрузки между различными этапами численного алгоритма. Вычисление конвективных членов являлось самой трудоемкой частью алгоритма и заняло 76% времени, вычисление диффузионных членов и MPI обмен заняли по 10%.

Верификация кода на тестовых задачах

Задача об одномерной ударной трубе

Одной из наиболее популярных тестовых задач, используемых для верификации численного метода при решении задач газовой динамики является задача Сода об одномерной ударной трубе [1]. В данной задаче рассматриваются два состояния газа, разделенных диафрагмой. Параметры слева от диафрагмы —

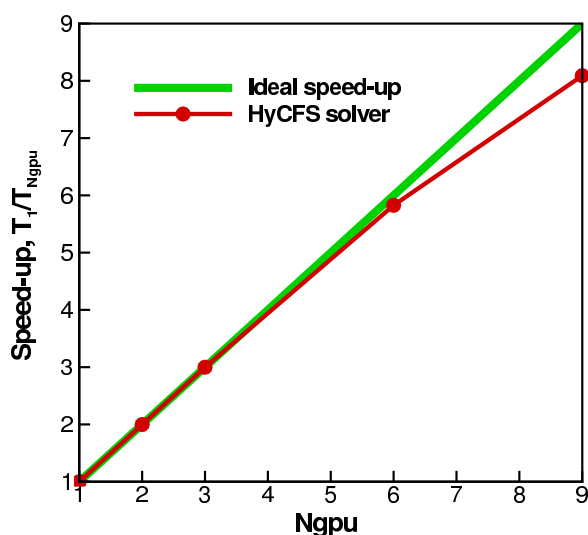


Рис. 3: График параллельного ускорения.

$\rho_L = 1, u_L = 0, p_L = 1$, справа — $\rho_R = 0.125, u_R = 0, p_R = 0.1$ (где ρ, p, u — плотность, давление и скорость, соответственно). После разрушения диафрагмы в начальный момент времени образуется течение с ударной волной и контактными разрывом, бегущими направо и распространяющейся налево волной разрежения. Особенностью данной задачи является то, что в ней присутствуют все явления, связанные с распространением ударных волн, и она имеет аналитическое решение.

Поэтому данная задача была промоделирована с помощью всех реализованных в программном коде численных схем. Ниже проведено сравнение численных расчетов на сетке $3 \times 3 \times 240$ с помощью схем первого и пятого порядка точности с аналитическим решением. Такой размер сечения (3 ячейки) является минимальным для корректного моделирования одномерных задач с помощью рассматриваемого программного кода.

Профили плотности, давления, скорости и температуры, полученные при численном решении задачи Суда с помощью противопоточной схемы первого порядка и WENO схемы 5-го порядка в момент времени $t = 0.2$, представлены на Рис. 4. Точное решение задачи изображено полужирной сплошной линией. Расчет с помощью схемы первого порядка изображен пунктирной линией, а расчет WENO схемой — кружками.

Видно, что результаты обоих расчетов находятся в хорошем согласии с аналитическим решением. В отличие от схемы первого порядка, WENO схема существенно меньше размывает и ударную волну, и контактный разрыв при том же разрешении сетки и дает профили величин, практически неотличимые от теоретических. Особенно хорошо преимущества схемы высокого порядка видны на графиках плотности и температуры.

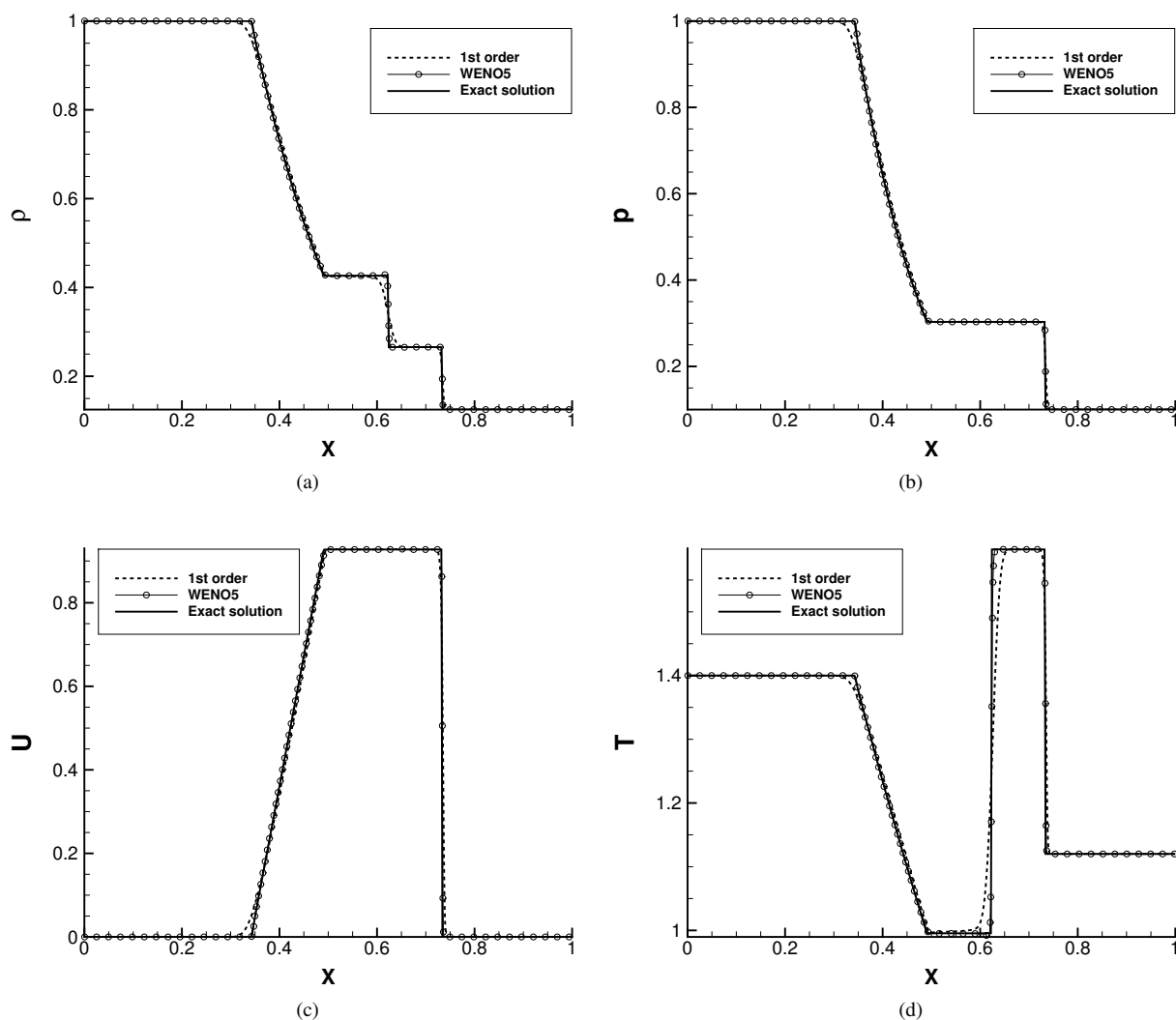


Рис. 4: Задача Сода. Профили: (a) — плотность, (b) — давление, (c) — скорость, (d) — температура.

Сверхзвуковой пограничный слой

Было проведено численное моделирование пограничного слоя на плоской пластине, обтекаемой под нулевым углом атаки сверхзвуковым потоком с числом Маха $M = 2$. В расчетах используется следующий подход: на первом этапе рассчитывается ламинарное основное течение, на которое затем накладываются волны неустойчивости. Использовались две расчетные сетки, состоявшие из $150 \times 64 \times 1152 \approx 11$ миллионов ячеек и $300 \times 80 \times 2250 \approx 54$ миллиона ячеек.

На Рис. 5 и 6 приведены результаты, полученные на первом этапе численного моделирования. Видно, что граничные условия на входной границе вносят пренебрежимо малые возмущения в стационарное основное течение. Профили газодинамических величин находятся в полном согласии с автомодельным решением для сжимаемого пограничного слоя.

На Рис. 7 изображена трехмерная визуализация мгновенного поля течения, полученного в расчете. Рост возмущений, наложенных на входной границе, при-

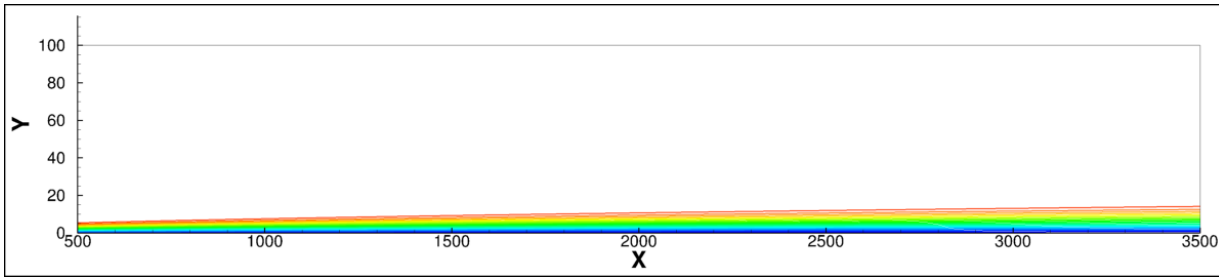


Рис. 5: Сверхзвуковой пограничный слой на плоской пластине. Ламинарное основное течение, изолинии продольной компоненты скорости.

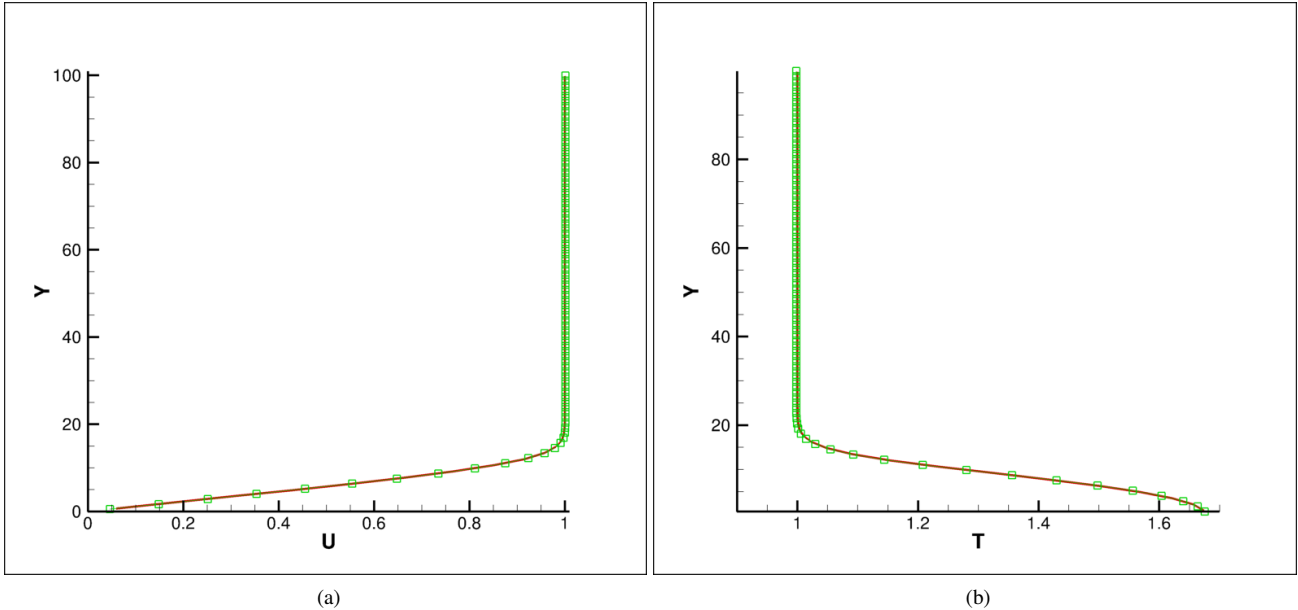


Рис. 6: Сверхзвуковой пограничный слой на плоской пластине. Ламинарное основное течение, профили продольной компоненты скорости (a) и температуры (b).

водит к формированию вторичного течения в виде трехмерных вихревых структур. Типичный размер наблюдаемых продольных структур сравним с толщиной пограничного слоя в нормальном и трансверсальном направлениях. Ниже по потоку наблюдается развитие вторичных неустойчивостей, сопровождаемое быстрым ростом трехмерных возмущений и приводящее в результате к ламинарно-турбулентному переходу. Мгновенные поля газодинамических величин приобретают высокую степень хаотичности, что хорошо видно на Рис. 7.

Б. Разработка ПСМ-модуля для суперкомпьютеров с гибридной архитектурой

Был разработан программный модуль на основе метода прямого статистического моделирования для расчетов на гибридных суперкомпьютерах течений смеси газов с внутренними степенями свободы. Разработаны, реализованы и протестированы алгоритмы динамической балансировки загрузки, позволяющие су-

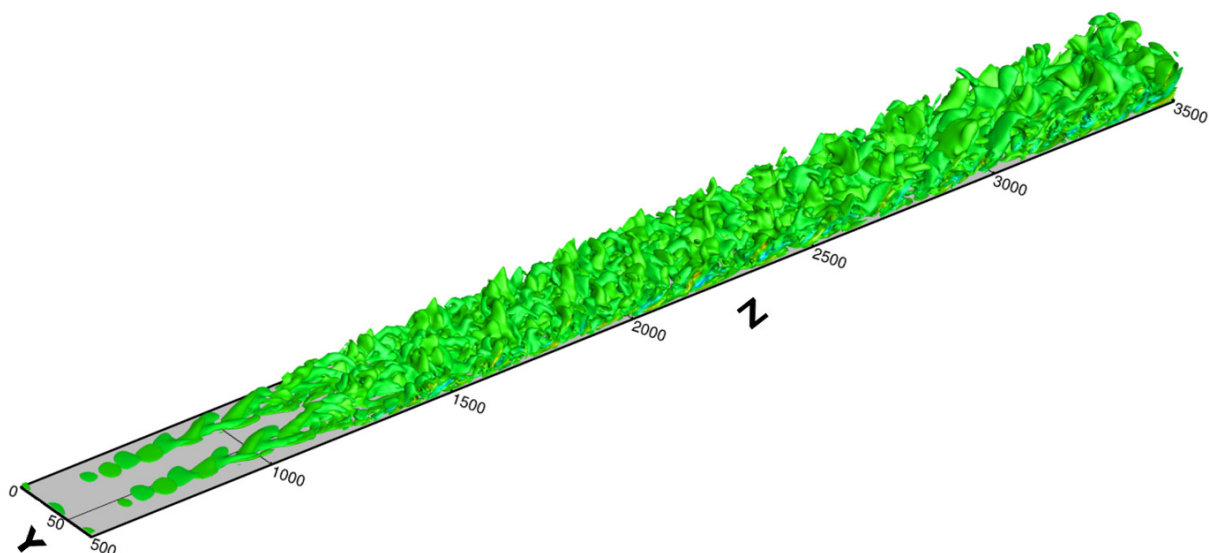


Рис. 7: Сверхзвуковой пограничный слой на плоской пластине. Изоповерхность поперечной компоненты скорости.

щественно повысить вычислительную эффективность разработанного модуля, основанные на двух критериях: на количестве модельных частиц на ГПУ и на продолжительности выполнения этапов моделирования. Показано, что использование динамической балансировки увеличивает эффективность ПСМ-модуля в 1.5-2 раза, а алгоритм на основе таймера, позволяет уменьшить время расчета еще более чем на 10%. В модуле реализованы модели обмена внутренней энергией, основанные на методе Ларсена-Боргнакке. Для вращательно-поступательного энергообмена используется модель с непрерывным представлением энергии, а для колебательно-поступательного энергообмена — с дискретным. Для вычисления вероятности колебательно-поступательного обмена используется формула Милликена-Уайта с высокотемпературной поправкой Парка. Расчетный модуль ПСМ верифицирован на задаче об обтекании спускаемой капсулы «Аполлон». Проведено сравнение с данными, представленными в работе [2]. Получено хорошее совпадение для всех рассмотренных точек траектории с результатами кинетических и континуальных расчетов.

Архитектура ПСМ модуля

Параллельные вычисления в программе на нескольких ГПУ рассчитаны на использование гетерогенной архитектуры, в которой имеется несколько многоядерных вычислительных ЦПУ узлов, на каждом из которых установлено по несколько ГПУ. Узлы связаны между собой высокоскоростной сетью.

Для разделения вычислений между ГПУ используется методика декомпозиции области (domain decomposition): область течения разделяется на подобласти, число которых равно числу ГПУ. Каждый ГПУ производит вычисления в ячейках своей подобласти. На каждом шаге выполняется дополнительный этап

Exchange который пересылает другим ГПУ частицы оказавшиеся после Move в ячейках принадлежащим этим ГПУ. Поскольку в пределах одного ГПУ глобальная память доступна всем нитям, на каждом ГПУ используется методика параллелизация по данным (Data parallelism) – когда все нити выполняют одни и те же инструкции, но над разными группами данных. Параллелизация по данным является наиболее эффективной реализацией SIMD технологии. Но важно обеспечить целостность данных – чтобы разные нити одновременно не записывали результаты в один и тот же фрагмент памяти. В методе DSMC параллелизация по данным отдельных этапов осуществляется следующим образом:

Generate – каждая нить создает одну частицу на границе расчетной области.

Move – каждая нить осуществляет перенос одной частицы. В случае попадания частицы в тело необходимо накапливать статистическую информацию для элемента поверхности, в который попала траектория. Так как в один и тот же элемент поверхности может попасть несколько траекторий, находящихся на разных нитях, то для накопления используются атомарные функции обеспечивающие корректное, последовательное обновление информации.

Index – Построение списка частиц находящихся в каждой ячейке является самым важным алгоритмом параллелизации по данным метода DSMC. Алгоритм основан на использовании атомарных функций.

Collision – Каждая нить моделирует столкновения в одной ячейке. Поскольку одна и та же частица не может одновременно находиться в нескольких ячейках – пересечения данных нет, и поэтому нет необходимости в мерах по обеспечению целостности данных. Sample – Как и в столкновениях, каждая нить накапливает статистическую информацию в одной ячейке.

На рис.8 представлена схема вычислений на двух узлах, на каждом из которых по три ГПУ. Вычислительная область разбивается на 6 подобластей. Обмен данными между ГПУ в пределах одного узла производится через память ГПУ, а между узлами – с помощью протокола MPI. Параллельный запуск заданий на ГПУ осуществляется с помощью технологии OpenMP.

На рис. 9 представлена временная диаграмма производства вычислений на одном вычислительном узле. Сначала, ЦПУ производит чтение и инициализацию исходных данных. Один из процессоров производит разделение области между ГПУ, и пересылает карту (для каждой ячейки номер ГПУ которому она принадлежит) такого разделения на остальные узлы. Далее, посредством OpenMP создаются параллельные процессы, число которых равно числу ГПУ на этом узле. Каждый процесс подключается к своему ГПУ, создает и копирует в его память исходные данные. После этого, ЦПУ запускает главный цикл, который пошагово производит вычисления. На каждом шаге снова посредством OpenMP инициализируются параллельные потоки, каждый из которых запускает на при-

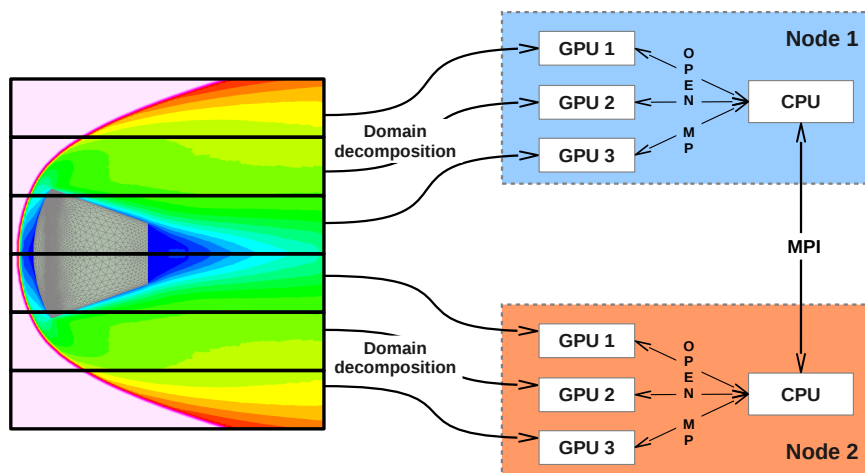


Рис. 8: Схема параллелизации.

надлежащем ему ГПУ ядра выполняющие вычисления. Не обязательно, чтобы каждый этап DSMC выполнялся одним ядром. В CUDA рекомендуется использовать небольшие ядра, что позволяет выполнять вычисления более эффективно. Поэтому, например, этап Индексация выполняется 3-я последовательными ядрами.

После этапа перемещения OpenMP поток копирует в память ЦПУ буфер с частицами (GetBuffer), которые необходимо переслать на другие ГПУ. Затем управление возвращается ЦПУ – производится синхронизация вычислений. Далее производится обмен буферов между узлами с помощью MPI (Exchange). После чего опять запускаются OpenMP потоки, которые копируют переданные им частицы в память ГПУ (PutBuffer), и выполняют оставшиеся этапы.

В конце каждого шага с заданной периодичностью выполняются вспомогательные вычисления, осуществляющие выдачу записей в протокол, адаптацию сетки к потоку, перестроение декомпозиции области для повышения эффективности параллелизации и т.д.

Когда все шаги сделаны, производится копирование результатов с ГПУ в память ЦПУ, производится сборка и формирование файлов-результатов. На этом, вычисления заканчиваются.

Верификация разработанного кода

Для тестирования и верификации разработанного кода, результаты численного моделирования сравниваются с опубликованными данными из статьи J. Moss et al., 2006 [2], в которой моделировался спуск капсулы «Аполлон». Расчеты были проведены для 8 точек траектории, для высот от 120 до 85 км. Во всех расчетах рассматривался воздух, скорость потока равна 9600 м/с, угол атаки был равен -25° , поверхность считалась некаталитичной. Результаты, получен-

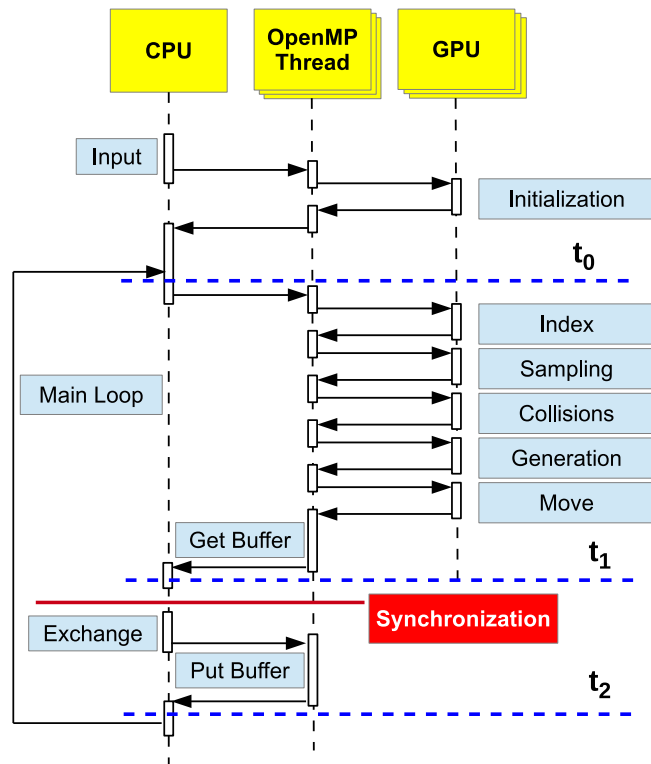


Рис. 9: Временная диаграмма.

ные с помощью разработанного ПСМ-модуля, сравнивались данными ПСМ и с численными решениями полных уравнений Навье-Стокса для 5-ти, 7-ми и 11-ти компонентных химически-реагирующих смесей.

На рис. 10 приведены поле поступательной температуры (слева) и поля отношений вращательной (в центре) и колебательной (справа) температур к поступательной в расчете для высоты 90 км. Хорошо заметно неравновесие между различными степенями свободы молекул.

Рисунок 11 демонстрирует, что для всех рассмотренных точек траектории выше 85 км наблюдается очень хорошее согласие данных. Отличие в таких аэродинамических характеристиках, как коэффициент сопротивления, подъемная сила и момент тангажа составляет не более 5%.

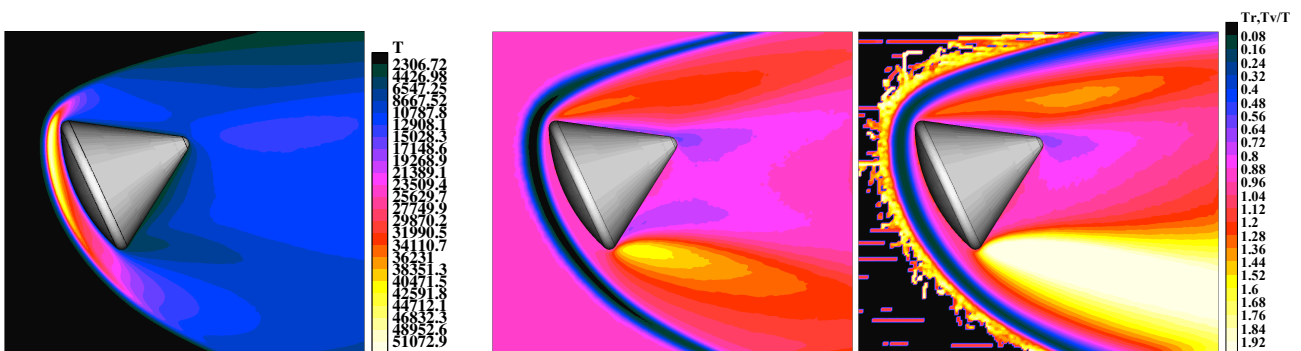


Рис. 10: Поля температуры. Расчет созданным ПСМ-модулем для высоты 90 км.

На высоте 85 км наблюдается небольшое отличие коэффициента подъемной силы CD между тремя различными подходами. Однако, как указано в [2], в расчетах методом ПСМ для этой высоты разрешение сетки и число частиц были меньше необходимых, и погрешность вычислений была достаточно велика. Поэтому для данной высоты авторы также провели расчеты с помощью кода LAURA, решающего уравнения Навье-Стокса для химически-реагирующей смеси газов.

Из этого можно заключить, что отличие между двумя ПСМ расчетами объясняется более корректным выбором параметров метода, а отличие от данных континуального расчета, по всей видимости, объясняется химическими реакциями, которые не учитывались в разработанном ПСМ-модуле.

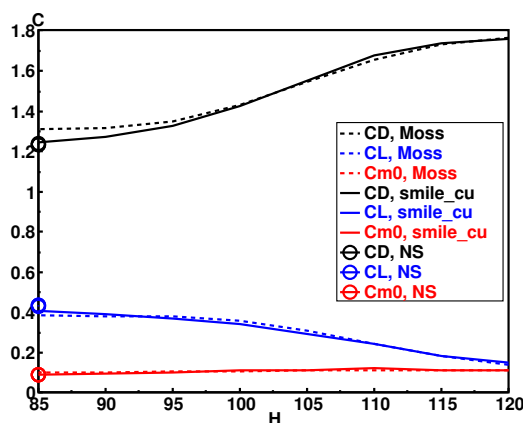


Рис. 11: Сравнение коэффициента сопротивления, подъемной силы и момента тангажа.

Список литературы

- [1] Sod G. A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. J. Comput. Phys. 1978., V. 27, pp. 1–31.
- [2] J.N. Moss, C.E. Flass, and F.A. Greene. DSMC Simulation of Apollo Capsule Aerodynamics for Hypersonic Rarefied Conditions, AIAA 2006-3577, 2006.