

Тема работы. Создание алгоритмов распределения вычислений на гетерогенных системах с несколькими независимыми устройствами для класса методов PCI SPH.

Состав коллектива:

- Хайрулин Сергей Сергеевич, младший научный сотрудник ИСИ СО РАН, старший преподаватель НГУ.
- Пальянов Андрей Юрьевич, Директор ИСИ СО РАН, с.н.с ИСИ СО РАН, д. ф.-м. н.

Научное содержание работы:

1. Постановка задачи.

Разработка алгоритмов и программных технологий, повышающих эффективность процессов обработки данных в вычислительных машинах и комплексах для семейства алгоритмов моделирования динамики несжимаемой жидкости PCI SPH - за счет использования в параллельном режиме всех доступных вычислительных узлов, интеграции разработанных методов в единую программную систему.

2. Современное состояние проблемы (на момент начала работы).

В рамках проекта OpenWorm, целью которого является полномасштабное моделирование нематоды *C. elegans*, различные системы живого организма моделируются отдельно, и при этом осуществляется обмен данными между ними в процессе симуляции. Так, модель мышечной системы нематоды и ее гидростатический скелет представлены как модель, описанная численным методом PCI SPH - predictor corrector smoothed particle hydrodynamics (модификация метода SPH). Несмотря на большую популярность и гибкость, которую предоставляет метод, в отличие от методов конечных элементов, он обладает таким значительным недостатком, как низкая производительность. В представленной работе предлагается ряд алгоритмов, с помощью которых предполагается увеличить производительность численных методов PCI SPH для задач связанных с моделированием гидродинамики и механики биологических систем и процессов.

Список литературы:

- Caballero, Andrés & Mao, Wenbin & Liang, Liang & Oshinski, John & Primiano, Charles & McKay, Raymond & Kodali, Susheel & Sun, Wei. (2017).
- Modeling Left Ventricular Blood Flow Using Smoothed Particle Hydrodynamics. Cardiovascular Engineering and Technology. 8.

10.1007/s13239-017-0324-z. Horvath, Christopher & Solenthaler, Barbara. (2013).

- Mass Preserving Multi-Scale SPH Pixar Technical Memo #13-04.
- Verma, Kevin & Peng, Chong & Szewc, K. & Wille, Robert. (2018). A Multi-GPU PCISPH Implementation with Efficient Memory Transfers. 10.1109/HPEC.2018.8547542.
- Predictive-Corrective Incompressible SPH B. Solenthaler and R. Pajarola ACM Transactions on Graphics (SIGGRAPH Proceedings),
- 2009 Harlow, F.H. and Welch, J.E., 1965, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. Phys. Fluids, Vol. 8(12), p. 2182-2189.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

При разработке метода, его тестировании и верификации возникает необходимость проведения большого числа расчётов. Кроме того для проверки алгоритма распределения нагрузки вычислений и синхронизации данных необходима проверка его на машинах, имеющих несколько вычислительных узлов (GPU). В основе предлагаемого нами алгоритма лежит идея распределения данных по доменам, при соблюдении условия, что все данные в пределах каждого домена могут обрабатываться независимо. При этом расчёты не производятся для частиц из смежных доменов. В силу специфики задачи данные об изменениях позиций частиц своевременно синхронизируются между устройствами. Предполагается, что параллельные вычисления для каждого домена будут производиться на различных GPU одновременно, кроме того каждый контроллер каждого решателя, запускается в отдельном потоке. Таким образом одна итерация симуляции предполагает несколько стадий:

- Формирование списка соседей для каждой частицы.
- Расчёт изменения физических величин и сглаживание флуктуаций плотности (PCISPH).
- Численное интегрирование (Leapfrog, Semi-implicit Euler)
- Синхронизация данных
 - Сортировка, 1 поток qsort, параллельная — модификация поразрядной сортировки
 - Обновление данных

4. Полученные результаты.

Было проведён ряд тестов для различных моделей описывающих симуляцию обрушения массива жидкости, которое возникает при разрушение дабы (damb break). При этом сами модели отличались размером и, соответственно, количеством частиц - 96368, 844203, 1183724, 3547755, 6904779, 9772237, 14204179, 20078971. Тесты прогонялись для различных конфигураций вычислительно кластера, то есть варьировалось число сопроцессоров в системе от 1 до 8 GPU. При каждом запуске логировалось время выполнения итерации как сумма.

$$T_{total}^i = T_{ns}^i + T_{phys}^i + T_{integration}^i + T_{sync}^i$$

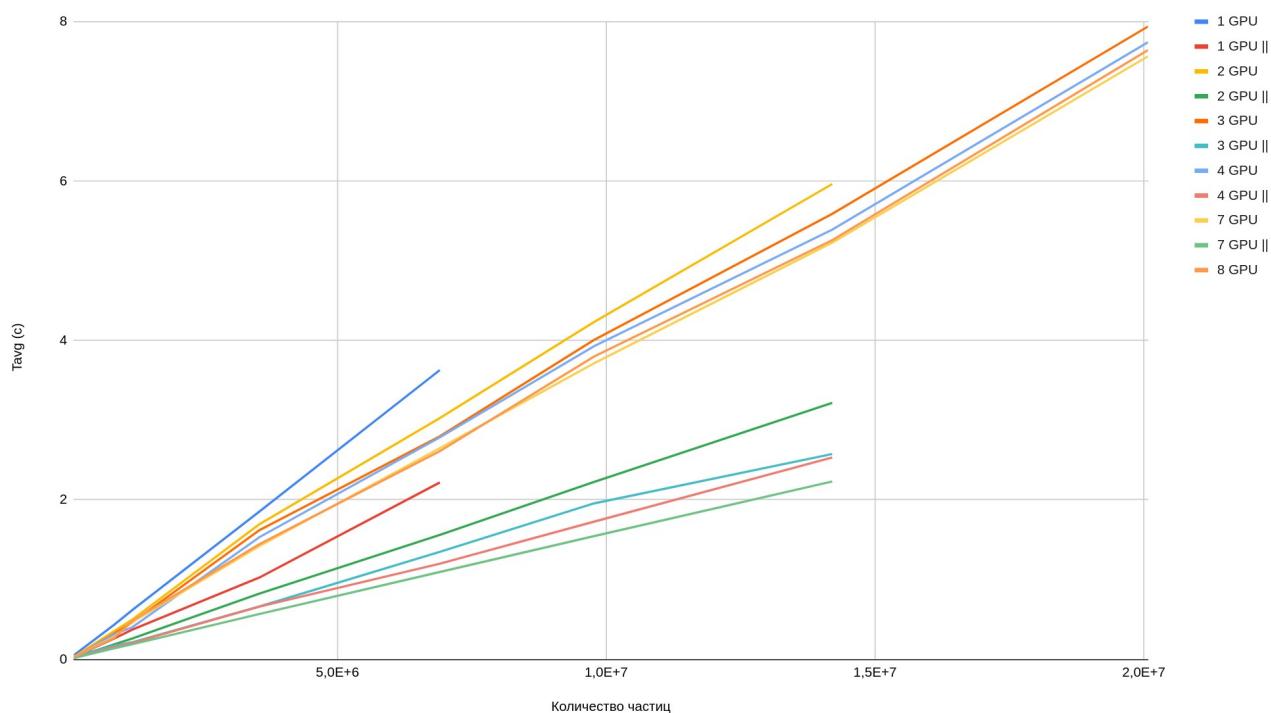
Где T_{total}^i - общее время выполнения итерации i , T_{ns}^i - поиска соседей, T_{phys}^i - обновление физических параметров, $T_{integration}^i$ - численное интегрирование, T_{sync}^i - синхронизация. На этапе синхронизации происходит сортировка массива частиц и распределение новых доменных конфигураций по устройствам. Сортировка может работать в двух режимах последовательном и параллельном. Для каждого теста было произведено фиксированное количество итераций и затем посчитано среднее время выполнения одной итерации как:

$$t_{average} = \frac{\sum_{i=1}^N T_{total}^i}{N} .$$

Полученные результаты позволяю судить о том, что нам удалось достичь значительного ускорения расчётов для дискретных моделей описанных с помощью метода класса PCI SPH.

5. Иллюстрации, визуализация результатов.

1 GPU, 1 GPU ||, 2 GPU, 2 GPU ||, 3 GPU...



Символом || обозначен тесты, в которых для сортировки используется параллельная реализация.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Публикации по данной работе ещё готовятся.

Благодаря качественной документации получилось разобраться с организацией работы на кластере за короткое время. Большая благодарность технической поддержке за своевременную помощь при возникновении проблем.