

ОБ ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕХНОЛОГИЙ РЕАЛИЗАЦИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ РЯДА ЗАДАЧ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ

Г.В. Пышнограй, Ю.Б. Трегубова, Н.М. Аветисян, А.Е. Кузнецов,
М.Ю. Толстых, А.Н. Цыганков

В работе исследована эффективность применения различных технологий реализации параллельных вычислений. Рассмотрены возможности пакетов MATLAB и FLUENT для расчета задач вычислительной гидроаэродинамики и статистической механики, изучена эффективность встроенных алгоритмов распараллеливания на примере некоторых задач. Показана эффективность использования технологии CUDA при проведении параллельных вычислений на многопроцессорных системах для моделирования течений несжимаемых и слабосжимаемых сплошных сред с ньютоновским законом поведения.

Ключевые слова: математическое моделирование, параллельные вычисления, CUDA.

ВВЕДЕНИЕ

Течения жидкостей и газов играют ключевую роль в рабочем процессе многих современных инженерных устройств. Проектирование этих устройств на требуемые параметры работы невозможно без надежного прогнозирования характеристик этих течений. Поскольку многие современные инженерные устройства являются дорогостоящими и трудоемкими в изготовлении, физическое моделирование с экспериментальным определением параметров их работы на различных режимах, как правило, требует больших временных и финансовых затрат. Кроме того, вследствие ограниченных возможностей современных экспериментальных датчиков и измерительных приборов экспериментальные наблюдения не дают полного представления об исследуемом явлении.

Эти факторы обуславливают растущий интерес к средствам математического моделирования течений жидкостей и газов.

Все современные пакеты программ вычислительной гидроаэродинамики (ВГАД) решают задачи механики сплошной среды, используя модели, построенные на основе уравнений Навье-Стокса. В основу этих моделей входят уравнения сохранения массы, сохранения импульса и сохранения энергии.

Решение вычислительной гидродинамической задачи в рамках пакета ВГАД происходит в три этапа. На первом создается геометрия, строится вычислительная сетка, задаются граничные условия, на втором этапе происходит решение с использованием решателя, соответствующего конкретной решаемой про-

блеме, и, наконец, с помощью специальных программных инструментов – пост-процессоров, полученные результаты представляются графически и анализируются.

Реальные задачи ВГАД требуют больших вычислительных мощностей и использования кластерных систем с числом вычислительных ядер от сотен до нескольких тысяч. При этом одной из важных проблем становится эффективность использования пакетов программ при параллельных расчетах.

Одним из критериев эффективности является масштабируемость задачи, т.е. сокращение времени расчета в зависимости от числа задействованных в нем процессоров. Эффективность расчета в значительной степени, зависит от процесса генерации сетки и оптимизации процесса распараллеливания сетки для последующего использования мощных кластерных систем.

В свою очередь, эффективность работы в параллельном режиме зависит также от размера задачи или числа узлов сетки, типа элемента, используемого при генерации сетки. Количество узлов на процессор не является жестким; при решении реальной задачи на определенной аппаратной платформе критическое количество узлов может быть больше или меньше.

В случае малых задач разбиение сетки приводит к созданию областей перекрытия в зонах связи между расчетными подобластями задачи. Процентное отношение количества наложенных (перекрытых) узлов расчетной сетки к общему количеству узлов должно быть минимальным, не более 10 %.

ОБ ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕХНОЛОГИЙ РЕАЛИЗАЦИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ РЯДА ЗАДАЧ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ

Масштабируемость в рамках одного узла сильно зависит от размерности задачи. Она падает, когда размерность задачи увеличивается.

Также на производительность многопроцессорной системы влияет интерфейс межузловой коммутации. Чем ниже пропускная способность интерфейса и выше его латентность, тем больше задержки при передаче данных между процессорами и, соответственно, ниже суммарная вычислительная мощность системы.

Технические средства, используемые при оценке эффективности

Основные расчеты проводились на Гибридном кластере НКС-10T+GPU Сибирского Суперкомпьютерного Центра, расположенном на базе Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск.

Также расчеты производились на кластере Нижегородского государственного университета и на двух вычислительных компьютерах находящихся в Алтайском государственном техническом университете, г. Барнаул. Первый компьютер – это персональный настольный суперкомпьютер DEPORACEG790R. Он оснащен двумя 64-разрядными процессорами Intel Xeon X5675. Частота работы процессора 3,07 ГГц. Частота шины 6400 МГц. Каждый процессор содержит 6 ядер.

Компьютер строится на базе аппаратной платформы Nvidia Tesla. Оборудован двумя GPU Nvidia Tesla C2075.

Второй компьютер – это персональный настольный суперкомпьютер SUPER MICRO X8DT3. Суперкомпьютер оснащен двумя 64-разрядными процессорами Quad Core Intel Xeon X5620. Частота работы процессора 2,4 ГГц. Частота шины 2933,6 МГц. Каждый процессор содержит 4 ядра, кэш 12 Мб.

Компьютер строится на базе аппаратной платформы SUPER MICRO X8DT3 и Nvidia Tesla. Оборудован одной GPU Nvidia Tesla C2050.

Результаты оценки эффективности

В экспериментах контролировалось время расчета при максимальном числе расчетных узлов, зависимость времени, затраченного на проведение 1000 итераций от числа узлов расчетной сетки (рисунок 1) и изменение невязки с ростом количества итераций (рисунок 2). Исследования проводились по пяти направлениям.

В случае моделирования течения ньютоновской среды в канале с прямоугольным

сечением время вычисления при максимальном числе узлов 70 млн. составило около 32 часов.

При моделировании течения ньютоновской среды в канале с плавным изменением высоты время вычисления при максимальном числе узлов 70 млн. составило около 34 часов.

Для примера моделирование течения ньютоновской среды в канале с внезапным изменением высоты время вычисления при максимальном числе узлов 70 млн. составило около 36 часов.

В случае, когда выполнялось моделирование течения ньютоновской среды в конвергентно-дивергентном канале время вычисления при максимальном числе узлов 70 млн. составило около 34 часов.

Наиболее затратным, с точки зрения времени вычислений оказалось моделирование течения ньютоновской среды в S-образном канале. При этом время вычисления при максимальном числе узлов 70 млн. составило около 36 часов.

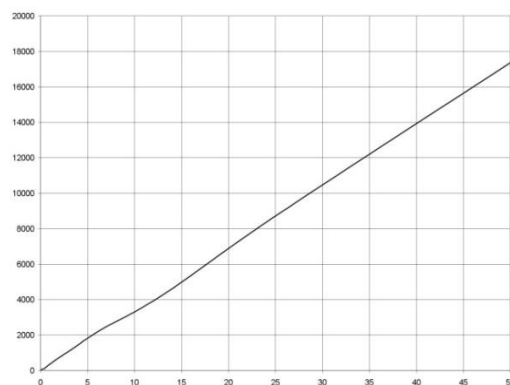


Рисунок 1 – Зависимость времени затраченного на 1000 итераций от числа расчетных ячеек

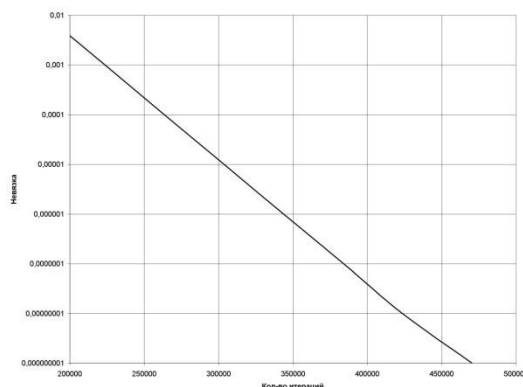


Рисунок 2 – Изменений невязки в зависимости от количества итераций

Следовательно, эмпирическим путем установлено, что, например, время, затрачиваемое на 1000 итераций Программы, составляет 35 секунд для сетки из 288000 ячеек при использовании GPU Tesla M2090. При этом установлена линейная зависимость падения логарифма невязки от роста числа итераций. Это позволяет в рамках использования представления чисел с удвоенной точностью достигнуть требуемой точности вычислений за конечное время.

Было проведено сравнение разработанной программы, реализующей технологию CUDA, с профессиональными пакетами, STAR-CD и FLUENT.

Моделирование течений в пакете FLUENT

Моделирование в пакете Fluent производилось на S-образном канале (рисунок 3) количество ячеек в котором задавалось по длине канала (координата x) – 400, по высоте (координата y) – 90, по ширине (координата z) – 30. Для построения сетки канала использовался графический препроцессор Gambit.

Сетка имеет следующие параметры: 672000 ячеек, 2052400 граней, 1417862 узла. Размеры S-канала: длина 1×10^{-3} м, высота – 12×10^{-5} м, ширина – 6×10^{-5} м.

Для расчета использовалась модель, основанная на неявном алгоритме установления со стационарным течением жидкости и с абсолютной системой координат, задающей скорости жидкости в пространстве. В качестве жидкости использовалась вода с плотностью $\rho = 1000 \text{ кг/м}^3$ и вязкостью $0.2 \cdot 10^{-3} \text{ кг/м}\cdot\text{с}$.

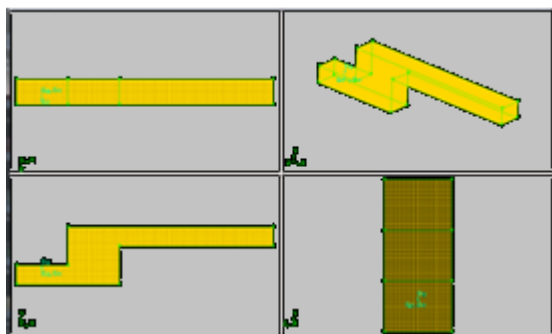


Рисунок 3 – Изображение сетки S-образного канала в Gambit

Граничные условия задавались следующим образом: на выходной границе канала задавалось давление жидкости равное 0 и скорость входного потока жидкости на входной границе канала. Поскольку скорость потока перпендикулярна входной границе кана-

158

ла, то задавалась скорость по координате x : $V_x = 0.416 \text{ м/с}$. Остальные компоненты скорости считались равными нулю: $V_y = 0 \text{ м/с}$, $V_z = 0 \text{ м/с}$.

Считалось, что стенки канала неподвижны относительно области течения, к которой она принадлежит.

Параметры, установленные в решателе пакета Fluent, были следующими:

1) уравнение движения жидкости – Flow;
2) схема дискретизации первого порядка точности;

3) алгоритм simple, основанный на простейшей схеме увязки полей скоростей и давлений, для решения связки уравнения движения и неразрывности, определяющих поля давлений и скоростей.

Первоначально для запуска решателя устанавливалось 2000 итераций, и в качестве невязок для уравнения непрерывности использовалась величина 0.0001. В качестве значений невязок по координатам скорости использовалось значение: $1 \cdot 10^{-7}$.

Решатель запускался на 8 ядрах двух процессоров Xeon.

При скорости входного потока $V_x = 0.416 \text{ м/с}$ решение достаточно быстро сходилось в течение 13 минут.

Линии тока скорости изображены на рисунке 4.

Таким образом, процесс решения при указанной скорости достаточно успешно сходится.

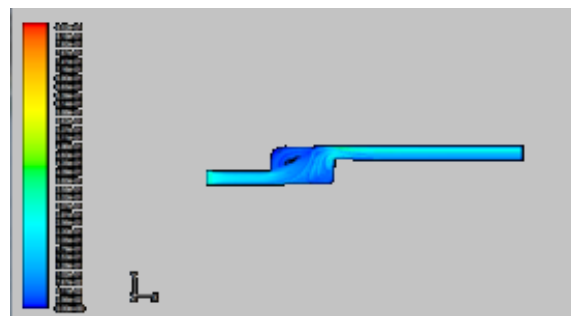


Рисунок 4 – Линии тока скорости в S-образном канале

Установлено, что время, затрачиваемое в пакете FLUENT на проведение 1000 итераций, составляет 840 секунд для сетки, состоящей из 288000 ячеек на компьютере, оснащенном двумя 64-разрядными процессорами Quad Core Intel Xeon X5620, что в 24 раза превышает время аналогичного расчета, причем при проведении расчетов были задействованы все 8 ядер двух процессоров компьютера.

ОБ ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕХНОЛОГИЙ РЕАЛИЗАЦИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ РЯДА ЗАДАЧ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ

Отметим, что результаты для пакета STAR-CD получаются аналогичными.

Таким образом, получены данные, свидетельствующие об эффективности использования технологии CUDA для проведения гидродинамических расчетов.

Моделирование динамики макромолекулы средствами MATLAB

Всякая макромолекула может быть эффективно представлена как цепочка связанных броуновских частиц (так называемая модель гауссовых субцепей или шариков и пружинок [6]). При этом макромолекула разбивается на N субцепей длиной M/N каждая, а поведение макромолекулы описывается движением линейной цепочки из $N+1$ броуновских частиц, связанных между собой последовательно упругими силами.

Динамика единичной цепочки описывается набором стохастических уравнений, подробно рассмотренных в [7].

Решения уравнений были получены в виде значений величины смещения центра масс макромолекулы методом Рунге-Кутты.

Результаты вычислений не зависят от числа N ($N > 10$) субцепей в моделируемой макромолекуле, что позволяет утверждать о корректности выбранной модели макромолекулы и схемы описания динамики ее поведения. Поэтому для простоты итоговые вычисления проводились для $N = 20$.

Расчеты велись на персональном настольном суперкомпьютере SUPERMICROX8DT3.

Так как компьютер имеет более одного ядра, было проведено распараллеливание задачи по реализациям

Распараллеливание проводилось встроенными средствами пакета MATLAB – технологией Parallel Computing Toolbox. Данная технология позволяет использовать многоядерные процессоры, графические процессоры (GPU) и кластеры для выполнения вычислительно-сложных расчетов и расчетов с большими объемами данных.

В данном случае, вместо цикла for использовался parfor. Конструкция parfor (параллельный цикл for) позволяет автоматически распределить независимые задачи на нескольких работниках MATLAB. Она автоматически определяет наличие работников и выполняется последовательно, если их нет. Под «работником» понимается выделенный процесс MATLAB, работающий независимо от основного процесса MATLAB. Заметим, что используемое при расчетах программное обеспечение не позволяет открывать и использовать

пользовать для задачи число процессов, превышающее количество физических ядер процессора, поэтому в данной работе термины ядро и процесс в большинстве случаев взаимозаменяемы.

Было проведено усреднение полученных смещений центра масс макромолекулы.

Время, затрачиваемое на расчет, с увеличением количества реализаций растет практически линейно. Линейный рост времени выполнения расчета наблюдается при использовании различного числа открываемых потоков. Причем скорость увеличения времени выполнения растет тем быстрее, чем меньше используется расчетных потоков.

С увеличением количества реализаций (рисунок 5) кривая усредненного численного решения становится все более гладкой, сохраняя все характеристические особенности, что еще раз косвенно подтверждает корректность выбранной математической модели.

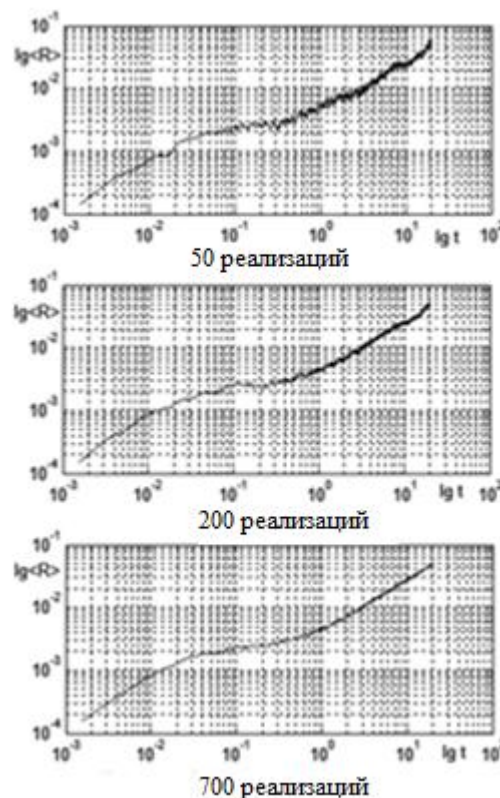


Рисунок 5 – График усредненного численного решения при различном количестве реализаций

Таким образом, на сегодняшний день всё большее значение приобретают различные технологии реализации параллельных вычислений. Многие современные пакеты, которые используются для решения задач

вычислительной гидроаэродинамики имеют встроенные средства для реализации таких вычислений. При этом наиболее перспективной выглядит реализация технологии CUDA параллельных вычислений на многопроцессорных графических картах. Именно эта технология показала наибольшую эффективность вычислений при решении рассмотренных задач.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-41-04003). Также авторы выражают признательность Сибирскому суперкомпьютерному центру и кластеру Нижегородского государственного университета за возможность проведения расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sharma, G. MATLAB: A Language for Parallel Computing [Текст] / G. Sharma, J. Martin // International Journal of Parallel Programming. – 2009. – V. 37. – Issue 1. – P. 3–36.
2. Gulati, K. GPU Architecture and the CUDA Programming Model [Текст] / K. Gulati, S. P. Khatri // Hardware Acceleration of EDA Algorithms. – 2010. – P. 23–30.
3. Molochnikov, V. M. Simulation of subsonic flows with separation using the FLUENT program package: software applicability study [Текст] / V. M. Molochnikov, N. I. Mikheev, O. A. Dushina // Thermophysics and Aeromechanics. – 2009. – V. 16. – Issue 3. – P. 367–373.
4. Liu, X. Research and Comparison of CUDA GPU Programming in MATLAB and Mathematica [Текст] / X. Liu, L. Cheng, Q. Zhou // Proceedings of 2013 Chinese Intelligent Automation Conference. – 2013. – P. 251–257.
5. Zhang, S. High performance calculation of GPU CUDA [Текст] / S. Zhang, Y. Chu, K. Zhao, // China Water Conservancy and Hydropower Press. – 2009.
6. Pokrovskii, V. N. A justification of the reputation-tube dynamics of a linear macromolecule in the mesoscopic approach [Текст] / V. N. Pokrovskii // Physica. – 2006. – V. A366. – P. 88–106.
7. Трегубова, Ю. Б. К обоснованию рептационного механизма диффузии линейной макромолекулы в теории микровязкоупругости [Текст] / Ю. Б. Трегубова, И. В. Третьяков, Ю. А. Алтухов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т. 8, № 4.– С. 27–31.
8. Поисковые исследования в области разработки программного обеспечения современных высокопроизводительных систем для гидродинамического моделирования течения сплошной среды на основе мезоскопического подхода, позволяющего получать достоверные результаты вблизи границ применимости гидродинамического описания [Текст]: отчет о НИР (промежуточ.): 2012-1.4-07-514-0014-001/ АлтГТУ; рук. Пышноград Г. В.; исполн.: Алтухов Ю.А. [и др.]. – Барнаул, 2012. – 199 с. – № ГР 01201266358. – Инв. № 01201351127.

Пышноград Г.В. – д.ф.-м.н., профессор,
зав. кафедрой «Математического анализа и
прикладной математики», АГПУ,

E-mail: pyshnograi@mail.ru

Трегубова Ю.Б. – ст. преподаватель,
кафедра «Прикладная математика»,
АГТУ им. И.И. Ползунова,

E-mail: jtregubova@gmail.com

Аветисян Н.М. – аспирант РИИ АГТУ

E-mail: tcyan@mail.ru

Кузнецов А.Е. – аспирант АГТУ

E-mail: san-smith@mail.ru

Толстых М.Ю. – аспирант АГТУ

E-mail: mister.tolstykh.m@mail.ru

Цыганков А.Н. – аспирант РИИ АГТУ

E-mail: tcyan@mail.ru