

Численное решение уравнения переноса с помощью технологий MPI, OpenMP, OpenACC на гибридной многопроцессорной вычислительной системе*

А.В. Старченко¹, С.А. Проханов¹, Е.А. Данилкин¹, Е.В. Семёнов¹

¹Томский государственный университет

Развитие вычислительной техники и разнообразие подходов к построению параллельных алгоритмов подталкивает исследователей к оценке перспективности использования каждого из них или их комбинации для решения своих задач.

В работе [1] на примере модели атмосферы UM (Unified Model UK Met Office) рассматривается эффективность использования гибридного подхода MPI+OpenMP в сравнении с MPI. А также исследуются эффективности выполнения параллельной программы при фиксированном количестве процессов, но изменяющемся количестве задействованных ядер на каждом процессоре. Показано, что использование только технологии MPI оказывается эффективнее на всем диапазоне рассматриваемого количества процессов. В тоже время использование только 12 из 16 ядер на каждом процессоре также позволяет повысить эффективность вычислений на 15-20 процентов. Это происходит за счет следующих факторов: увеличение пропускной способности памяти на активное ядро, сокращение издержек на коммуникации при уменьшении количества процессов MPI и активных ядер, увеличение частоты работы ядер в режиме turbo boost.

В работе [2] рассматривается реализация блока переноса примесей в моделях атмосферы и океана на основе гибридного программирования MPI+OpenMP. В работе показано, что при небольшом количестве задействованных MPI процессов более целесообразно дальнейшее наращивание их количества. В этом случае дополнительное ускорение достигается за счет размещения данных локальных массивов в более быстрой КЭШ памяти процессора. При достаточно большом числе задействованных MPI процессов, наоборот, более эффективным методом ускорения расчетов становится увеличение числа OpenMP нитей. В работе делается акцент на то, что гибридный подход MPI+OpenMP является наиболее универсальным с точки зрения использования ресурсов современных суперкомпьютеров, позволяя оптимизировать число MPI процессов и число нитей OpenMP с учетом задачи и архитектуры вычислительных элементов.

Целью данной работы является проведение вычислительных экспериментов на гибридной вычислительной системе по определению наиболее перспективного использования параллельных вычислительных технологий (MPI, OpenMP, OpenACC) для получения эффективных параллельных программ для решения системы нестационарных трехмерных неоднородных уравнений переноса. Полученные результаты будут использованы при создании параллельной версии развиваемой в Томском государственном университете мезомасштабной метеорологической модели высокого разрешения TSUNM3 для прогнозирования опасных погодных явлений и качества атмосферного воздуха над городом [3].

Для численного решения задачи используются структурированные сетки с равномерным шагом по горизонтальным направлениям Ox и Oy и сгущающиеся к поверхности Земли по вертикальному. При аппроксимации дифференциальной постановки задачи используется метод конечного объема со вторым порядком аппроксимации по пространственным переменным с применением оригинальной монотонизированной схемой для конвективных членов, построенной с использованием интерполяционных весовых сплайнов [4]. Рассматриваемые явно- неявные аппроксимации во времени (Адамса-Бэшфорда и Кранка-Никольсон) обеспечивали второй порядок точности при интегрировании уравнения переноса по времени. Рассматриваемая разностная схема является экономичной и для вычисления значений сеточной функции позволяет использовать метод прогонки. Вычислительное ядро программы расчета значений сеточной функции на новом слое по времени представляет собой одновременное вычисление таких значений на каждой вертикальной сеточной линии с помощью метода прогонки.

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-71-20042).

Для оценки времени работы параллельных программ рассматривалась задача о переносе примеси от постоянно действующего источника в трехмерной области. Расчет проводился на сетке 256x256x32 на одном или двух узлах вычислительного кластера ТГУ Cyberia со следующими характеристиками: 256Gb RAM, 2xIntel® Xeon® CPU E5-2695 v3@2.30Ghz, 2xNVIDIA Tesla K80. Использовался компилятор Portland Group Fortran. Время счета последовательной программы составляло 142 сек. Точность проведения расчета контролировалась по известному аналитическому решению рассматриваемой задачи.

При применении технологии Message Passing Interface в качестве основного подхода распараллеливания для вычислительной системы с распределенной памятью выбрана двумерная (по осям O_x и O_y) декомпозиция сеточной области на подобласти и каждому процессорному элементу, задействованному в вычислениях, распределяются значения сеточной функции, принадлежащие локальной подобласти, для вычисления значений на следующем слое по времени с использованием метода прогонки. Проведенные на вычислительном кластере ТГУ Cyberia (использовались узлы с указанными выше характеристиками) расчеты показали быстрое насыщение ускорения, которое оставалось практически неизменным вплоть до 32 процессов (Рис.1).

При проведении расчетов с использованием технологии OpenMP на одном вычислительном узле кластера ТГУ Cyberia были получены следующие результаты ускорения и эффективности разработанной OpenMP-программы (Рис. 1). Из рисунка видно, что в относительных величинах ускорения и эффективности OpenMP-программа опережает MPI-программу, причем и в абсолютных значениях время работы OpenMP-программы для каждого параллельного запуска несколько меньше (различие уменьшается с ростом количества процессов).

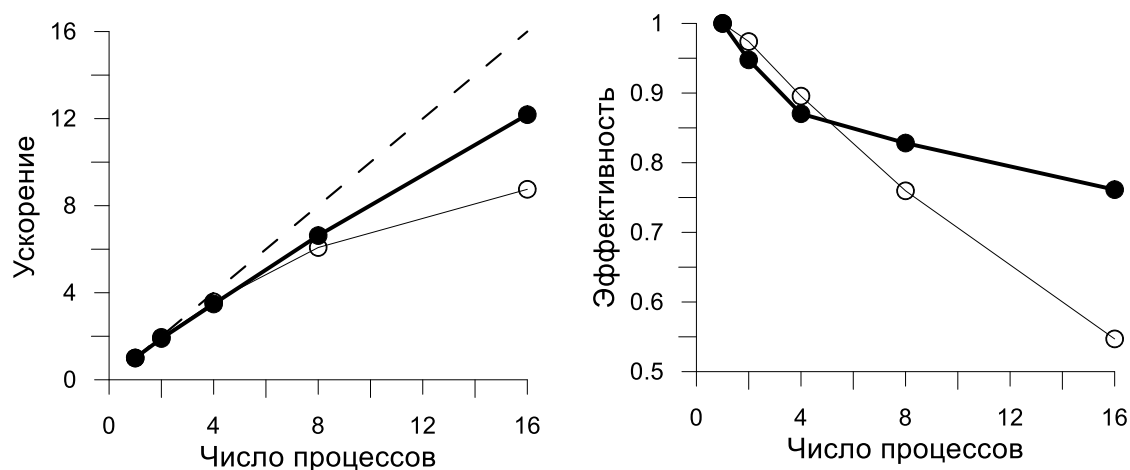


Рис. 1. Ускорение и эффективность MPI (°) и OpenMP (•) программ

Результаты расчетов по параллельной программе, созданной с помощью технологии OpenACC, на одном вычислительном узле кластера ТГУ Cyberia показали время выполнения около 3 секунд, что существенно меньше времени выполнения последовательной программы и в несколько раз меньше времени выполнения MPI- и OpenMP-программ на 16 процессах.

Литература

1. Bermous I., Steinle P. Efficient performance of the Met Office Unified Model v8.2 on Intel Xeon partially used nodes // *Geosci. Model Dev.* 2015. V. 8. P. 769-779.
2. Мортиков Е.В. Программная реализация блока переноса примесей в климатических моделях на основе гибридного программирования MPI-OpenMP // *Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции.* 2016. С. 521-529.
3. Starchenko A.V., Bart A.A., Bogoslovskiy N.N., Danilkin E.A., Terenteva M.A. Mathematical modelling of atmospheric processes above an industrial centre // *Proceedings of SPIE 9292, 20th International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics.* 2014. Vol. 9292. P. 929249-1-929249-30.