ASTROPHI: ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ АСТРОФИЗИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ НА ГИБРИДНЫХ СУПЕРЭВМ, ОСНАЩЕННЫХ УСКОРИТЕЛЯМИ INTEL XEON PHI

Б.М. Глинский, И.М. Куликов, И.Г. Черных

В работе представлена специально адаптированная для использования на множестве ускорителей Intel Xeon Phi численная схема, на основе которой создан новый сверхмасштабируемый программный комплекс AstroPhi для моделирования динамики астрофизических объектов. Численный метод решения газодинамических уравнений основан на специально адаптированной для реализации на множестве ускорителей комбинации метода крупных частиц и метода Годунова. Для решения уравнения Пуассона используется быстрое преобразование Фурье. Программная реализация была отдельно протестирована на газодинамических задачах, на задаче решения уравнения Пуассона и на классических задачах гравитационной газовой динамики. Показано ускорение программного комплекса при использовании ускорителей Intel Xeon Phi, уточнено понятие масштабируемости при использовании ускорителей.

Динамика астрофизических объектов в настоящее время активно исследуются теоретически в связи с появлением значительного числа наблюдательных данных. Так явления коллапса имеют место как на начальной стадии звездной эволюции, так и на конечной стадии эволюции звезд (взрывы сверхновых с коллапсирующим ядром). Движение галактик в плотных скоплениях превращает столкновения между ними в важный эволюционный фактор, поскольку за хаббловское время рядовая галактика может испытать до десятка столкновений с другими галактиками своего скопления. Математическое моделирование играет более чем важную роль в теоретическом исследовании таких процессов. С каждым днем требования к астрофизическим моделям всё возрастает и модели, которые несколько лет назад были актуальными, сейчас уже считаются устаревшими. Усложнение астрофизических моделей требует использования всё больших вычислительных ресурсов, а, следовательно, модификации и создания новых вычислительных методов и параллельных алгоритмов для решения таких задач.

В последние два десятилетия из широкого диапазона газодинамических численных методов для решения нестационарных трехмерных астрофизических задач используются два основных подхода. Это лагранжев подход, в основном представленный SPH-методом (Smoothed Particle Hydrodynamics) и эйлеров подход с использование адаптивных сеток или AMR (Adaptive Mesh Refinement). В последние пять лет появился ряд программных пакетов с использованием комбинации лагранжева и эйлерова подходов [1]. В ходе адаптации метода SPH к различным космологическим задачам возникло множество модификаций алгоритма. Для определения гидродинамических величин очень важен выбор радиуса сглаживания, который определяет количество влияющих на частицу соседей. Одним из свойств метода является то, что для получения верных решений необходимо сохранение числа соседей почти равным для всех частиц расчетной области, что не выполняется в случае коллапса. Если число соседей у всех элементов различается на несколько частиц, то результаты расчетов нельзя считать достоверными. Для преодоления такого недостатка метода вводится адаптивный радиус сглаживания, определяемый по числу соседей. Такое определение радиуса сглаживания приводит к ряду вычислительных сложностей, поэтому многие реализации метода допускают большие отклонения в числе соседей от частицы к частице. Таким образом, определение радиуса сглаживания допускает возможность выбора, а значит, оказывает влияние на решение. Авторы программ, использующие AMR, обычно задают величину наиболее подробного шага сетки по пространству, хотя сложно оценить степень необходимого сгущения сетки особенно в случае коллапса, поскольку в зависимости от степени адаптации сетки к решению в случае возникновения особенностей могут оставаться проблемы, характерные для сеток с линиями координат, располагающимися вдоль границ областей решения. Несомненно, разработка эйлеровых сеточных методов, не допускающих влияния сеточных линий на решение, позволит отказаться от методики AMR, а значит, избежать всех вышеперечисленных недостатков этого подхода. Создание таких методов представляет собой более сложную задачу, чем построение адаптивных сеток, но тем не менее возможно. Как известно, уравнения газовой динамики инвариантны относительно некоторой группы точечных преобразований в пространстве независимых и зависимых переменных. Такая инвариантность является следствием инвариантности законов сохранений, из которых вытекают уравнения газовой динамики. Использование расчетной сетки неизбежно вносит не инвариантность в алгоритм расчета, что может оказывать влияние, например, на расчеты особенностей потока (ударных волн, контактных границ, слабых разрывов), которые движутся под различными углами к линиям сетки.

В рамках лагранжева подхода на основе SPH метода были разработаны пакеты Hydra, Gasoline, GrapeSPH, GADGET-3. В рамках эйлерова подхода (в том числе и с использованием AMR) были разработаны пакеты NIRVANA, FLASH, ZEUS-MP, ENZO, RAMSES, ART, Athena, Pencil Code, Heracles, Orion, Pluto, CASTRO. Эйлеров подход с использованием AMR был впервые использован на гибридных суперкомпьютерах, оснащенных графическими ускорителями, в пакете GAMER. Пакет BETHE-Hydro, AREPO, CHIMERA и пакет PEGAS [1 – 3] основаны на комбинации лагранжева и эйлерова подходов.

Большое количество программных реализаций и численных методов говорит об актуальности исследований в области разработки новых методов и их программных реализаций для решения задач астрофизики. Кроме того, несмотря на развитие астрофизических пакетов в сторону петафлопсных вычислений, таких как PetaGADGET, Enzo-P, PetaART нужно отметить фундаментальные ограничения в масштабируемости AMR и SPH подходов, которые используются в основном числе программных пакетов для решения задач астрофизики. Так в основе обоих подходов лежат алгоритмы поиска по дереву, масштабируемость которых имеет большие ограничения. Целью данной статьи является описание модификации численного метода и особенностей реализации пакета AstroPhi на гибридных суперкомпьютерах, оснащенных ускорителями Intel Xeon Phi и исследование его масштабируемости.

Будем рассматривать 3-х мерную модель динамики самогравитирующего газа в декартовых координатах, включающих в себя расширенную систему уравнений газовой динамики в дивергентной форме, замкнутую уравнением состояния для идеального газа. Система уравнений газовой динамики дополнена уравнением Пуассона для гравитационного потенциала и вкладом в потенциал от центрального тела. За основу метода решения системы уравнений газовой динамики выбран метод крупных частиц [1], уже хорошо зарекомендовавший себя в ходе решения астрофизических задач [2]. Исходная система газодинамических уравнений решается в два этапа. Система уравнений на первом, эйлеровом, этапе описывает процесс изменения параметров газа в произвольной области течения за счет работы сил давления, а также за счет разности потенциалов и охлаждения. Для исключения влияния направлений координатных линий использованы элементы операторного подхода. В его основе определение плотности, давления, потенциала и импульса в ячейках, в узлах ячеек размещаются только вектор скорости. Для дискретных аналогов компонент скорости, определенных в узлах сетки, применяется функция осреднения в ячейку. Значения давления и скорости на всех границах ячеек – есть точное решение линеаризованной системы уравнений эйлерова этапа по каждому из направлений осей координат без учёта вклада потенциала и охлаждения.

Для эйлерова этапа была сделана специальная модификация численного метода. В исходном варианте численного метода использовался подход, связанный с вычислением вклада в соседние ячейки со схемной скоростью [1]. Модификация состоит в независимом рассмотрении потока газодинамических величин с учетом направления скорости такого потока (см. рис. 1).

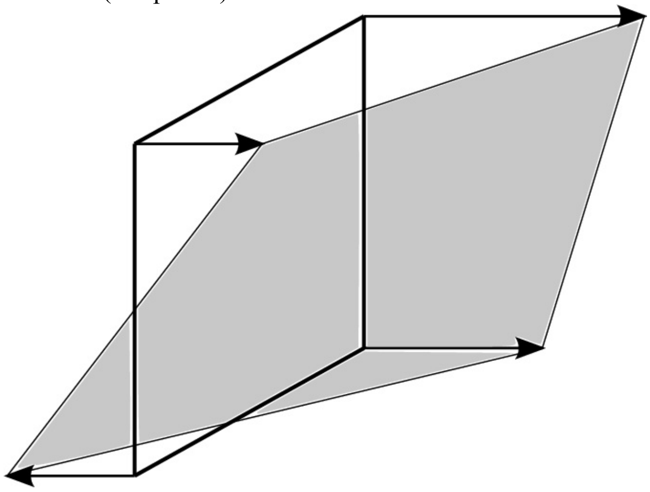

Рис. 1. Поток соответствующий
газодинамической величины через границу
определяется по правилу полной деформации ячейки

Такая модификация позволяет производить вычисления независимо и использовать все ядра ускорителя. Такая численная схема уже была использована в случае графических ускорителей [3] и позволяет использовать более простую схему декомпозиции расчетной области, чем используемой ранее [4].

На каждом временном шаге производится корректировка баланса энергий [5]. С этой целью осуществляется перенормировка схемных скоростей переноса массы, импульса и двух видов энергий на лагранжевом этапе метода таким образом, что происходит корректировка длины вектора скорости при неизменном направлении. После реализации газодинамической системы уравнений решается уравнение Пуассона для гравитационного потенциала. Для его решения используется 27-точечный шаблон. Потенциал и плотность представляется в виде суперпозиции по собственным функциям оператора Лапласа. Детали численного метода описаны в публикациях [1, 3, 5].

Программный комплекс был протестирован на квазиодномерных тестах Годунова, новом тесте Аксенова, допускающем аналитическое решение, тесте Седова, задачах моделирования неустойчивостей Кельвина-Гельмгольца и Рэлея-Тейлора, задаче столкновения газовых сфер, также было проведено сравнение численного решения, полученного с помощью программного комплекса AstroPhi, с результатами других авторов на задачах коллапса.

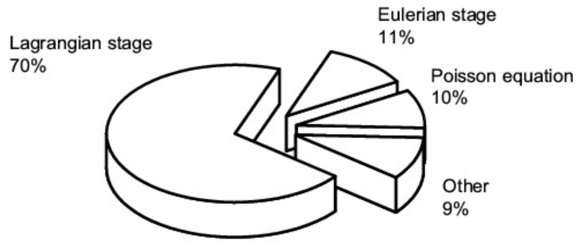

Рис. 2. Процентное соотношение
вычислительных затрат на решение каждого из этапов

Трехмерность модели и нестационарность задачи выдвигают строгие требования к экономичности используемых методов решения. В последнее время бурное развитие вычислительной техники позволило производить ресурсоемкие расчеты и получать физически оправданные результаты для трехмерных программ. Использование суперкомпьютеров позволяет использовать большие объемы данных, на порядки повышать производительность вычислений, а как следствие, и точность. Основные вычислительные затраты приходятся на решение гидродинамических уравнений, решение которых занимает 90 процентов времени (см. рис. 2).В основе параллельной реализации решения гидродинамических уравнений лежит многоуровневая одномерная декомпозиция расчетной области. По одной координате внешнее одномерное разрезание происходит средствами технологии MPI, внутри каждой подобласти разрезание происходит средствами OpenMP, адаптированного для MIC-архитектур (см. рис. 3). Это связано с топологией и архитектурой гибридного суперЭВМ МВС-10П межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, который был использован для вычислительных экспериментов. Модификация численного метода решения гидродинамических уравнений позволяет на каждом этапе численного метода независимо вычислять значения потоков через каждую ячейку. Декомпозиция области на каждом этапе осуществляется с перекрытием одного слоя граничных точек соседних областей.

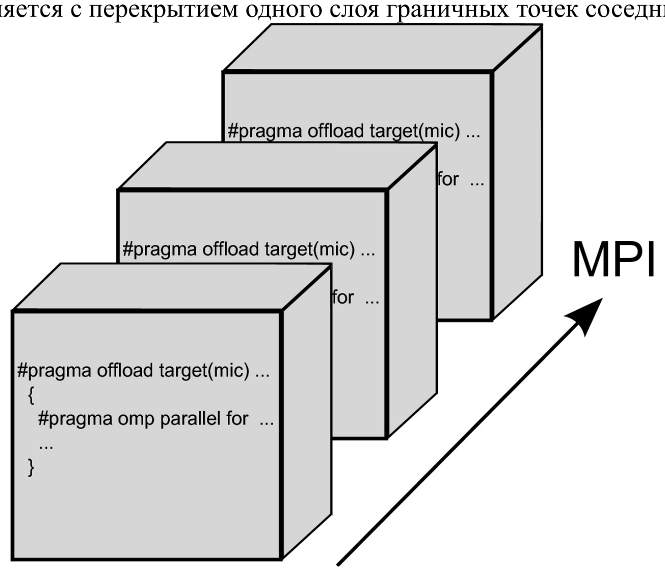

Рис. 3. Декомпозиция расчетной области для
решения гидродинамических уравнений

Трехмерное параллельное быстрое преобразование Фурье выполняется с помощью процедуры из свободно распространяемой библиотеки FFTW. Способ распределения массивов также задается библиотекой. Перекрытие расчётных областей не требуется. В силу малых вычислительных затрат решения уравнения Пуассона относительно решения гидродинамических уравнений ускорители не использовались для решения. Однако, в дальнейшем такая реализация, основанная на архитектуре библиотеки FFTW и адаптированная для решения задачи обязательно будет сделана.

В случае использования гибридной реализации необходимо определить три понятия масштабируемости.

1. SingleMIC performance (сильная масштабируемость в рамках одного ускорителя Intel Xeon Phi) – уменьшение времени счета одного шага одной и той же задачи при использовании большего числа ядер ускорителя.
2. MultiMIC performance (слабая масштабируемость при использовании многих ускорителей Intel Xeon Phi) – сохранения времени счета одного шага одного и того же объема задачи при одновременном увеличении количества ускорителей.
3. FFTW performance (сильная масштабируемость при использовании библиотеки FFTW) – уменьшение времени счета одного шага одной и той же задачи при использовании большего числа процессоров или ядер.

Результаты эффективности программной реализации приведена на рисунке 4.

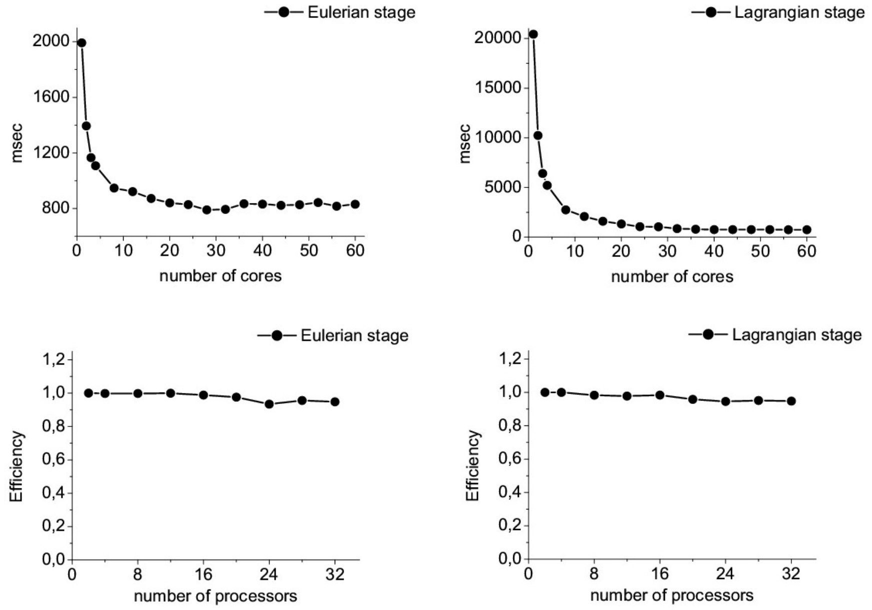

Рис. 4. Время счета эйлерова (сверху слева) и лагранжевого (сверху справа) этапов на одном ускорителе для расчетной сетки 1283 на один ускоритель. Эффективность параллельной реализации каждого из этапов в зависимости от использованных ускорителей (снизу)

Для класса нестационарных задач гравитационной газовой динамики, описан новый вычислительный алгоритм на основе метода крупных частиц и метода Годунова, позволяющий проводить вычислительные эксперименты по изучению динамики самогравитирующего газа в трёхмерной постановке в широком диапазоне параметров. На основе предложенных алгоритмов создан программный комплекс AstroPhi для гибридных суперЭВМ, оснащенных ускорителями Intel Xeon Phi.

Работа поддержана ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России 2009 – 2013» Министерства образования и науки Российской Федерации, грантами РФФИ 13-07-00589а, грантом 12-01-31352 для молодых исследователей, грантом Президента Российской Федерации МК – 4183.2013.9, а также муниципальным грантом г. Новосибирска.

ЛИТЕРАТУРА:

1. V. Vshivkov, G. Lazareva, A. Snytnikov, I. Kulikov, A. Tutukov "Hydrodynamical code for numerical simulation of the gas components of colliding galaxies" // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2011. V. 194, 47. 12 pp.
2. А.В. Тутуков, Г.Г. Лазарева, И.М. Куликов "Газодинамика центрального столкновения двух галактик: слияние, разрушение, пролет, образование новой галактики" // Астрономический журнал. 2011. Т. 88, № 9. С. 837-851.
3. I. Kulikov "PEGAS: Hydrodynamical code for numerical simulation of the gas components of interacting galaxies" // Second Workshop on Numerical and Observational Astrophysics From the First Structures to the Universe Today, 2011. M. E. De Rossi, S. E. Pedrosa and L. J. Pellizza, eds. 2013. pp. 99-103.
4. V. Vshivkov, G. Lazareva, A. Snytnikov, I. Kulikov "Supercomputer Simulation of an Astrophysical Object Collapse by the Fluids-in-Cell Method" // PaCT-2009 proceedings. LNCS, Vol. 5698. 2009. P. 414-422.
5. V. Vshivkov, G. Lazareva, A. Snytnikov, I. Kulikov, A. Tutukov "Computational methods for ill-posed problems of gravitational gasodynamics" // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. 2011. V. 19, I. 1. P. 151-166.