

# Алгоритмические особенности создания многосеточного решателя СЛАУ на распределённых вычислительных системах с графическими ускорителями

**Б.И. Краснопольский<sup>1,2</sup>,**  
*[krasnopolsky@imec.msu.ru](mailto:krasnopolsky@imec.msu.ru)*

**А.В. Медведев<sup>2</sup>**  
*[alexey.v.medvedev@gmail.com](mailto:alexey.v.medvedev@gmail.com)*

<sup>1</sup> НИИ механики МГУ, Москва

<sup>2</sup> ЗАО «Т-Сервисы», Москва



## Цели и задачи

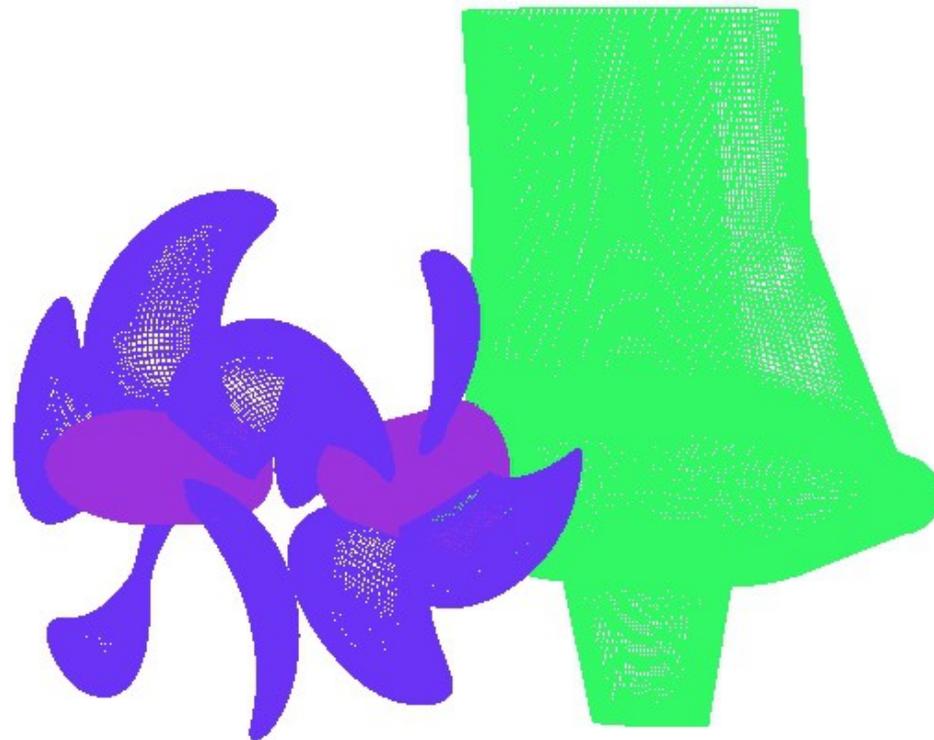
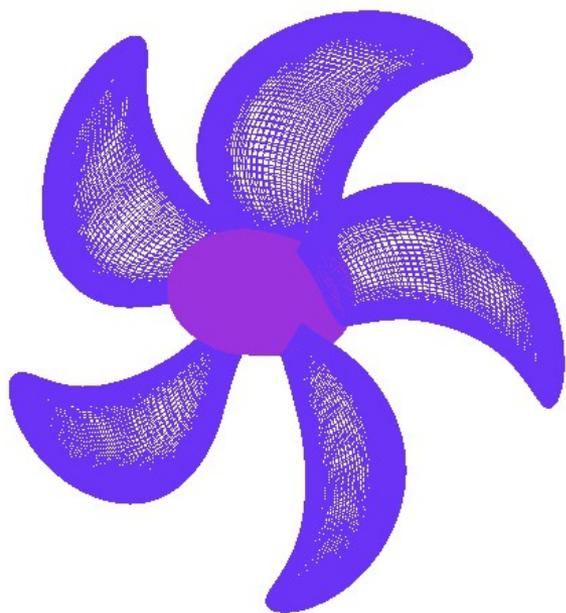
Эффективные методы решения эллиптических уравнений – необходимое условие для решения подавляющего большинства задач механики сплошных сред

Наиболее широко используемые методы для решения больших сильно-разреженных СЛАУ для эллиптических уравнений – итерационные методы подпространства Крылова и/или многосеточные методы

- Поиск и исследование алгоритмов распараллеливания вычислений в связи с реализацией на GPU
- Создание GPU-решателя, способного ускорить вычисления в ряде практических задач:
  - судостроения
  - многофазные многокомпонентные течения (нефтедобыча)

# Моделирование напорных характеристик гребных винтов

## ВИНТОВ



OpenFOAM, расчётные сетки до 100 млн. ячеек

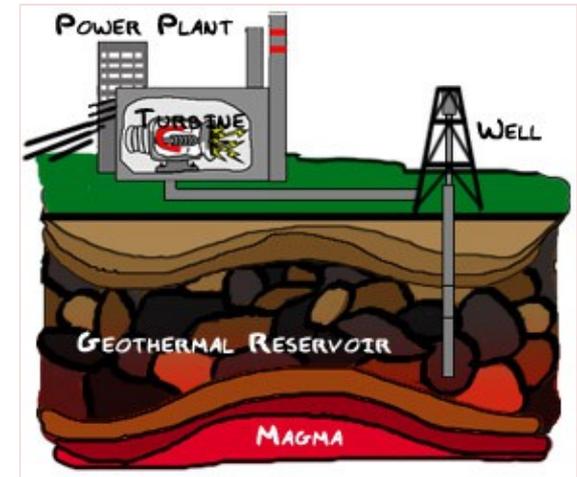
# Моделирование многофазных многокомпонентных течений в пористой среде

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( m \sum_{i=1}^3 \frac{M_{(1)} x_i}{v_i} s_i \right) + \text{div} \left( \sum_{i=1}^3 \frac{M_{(1)} x_i}{v_i} \mathbf{w}_i \right) = 0$$

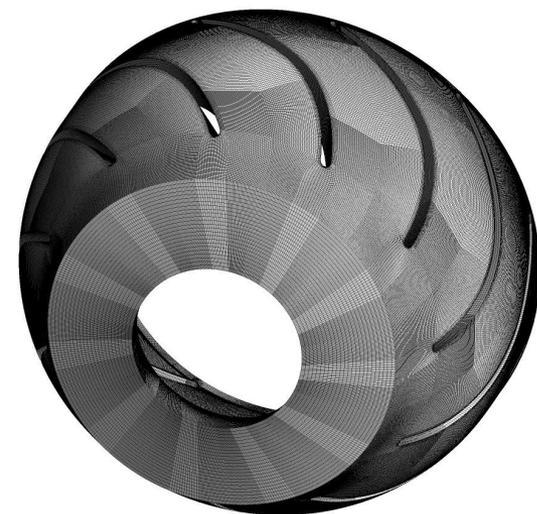
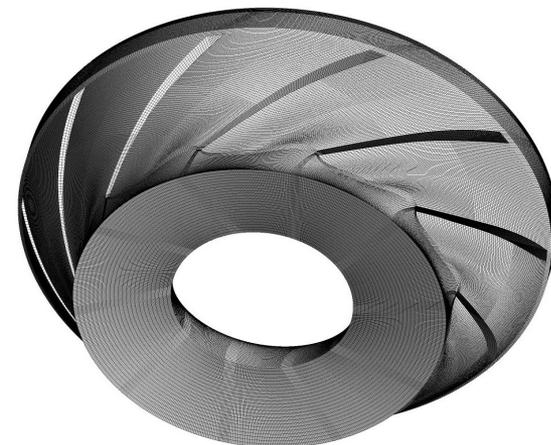
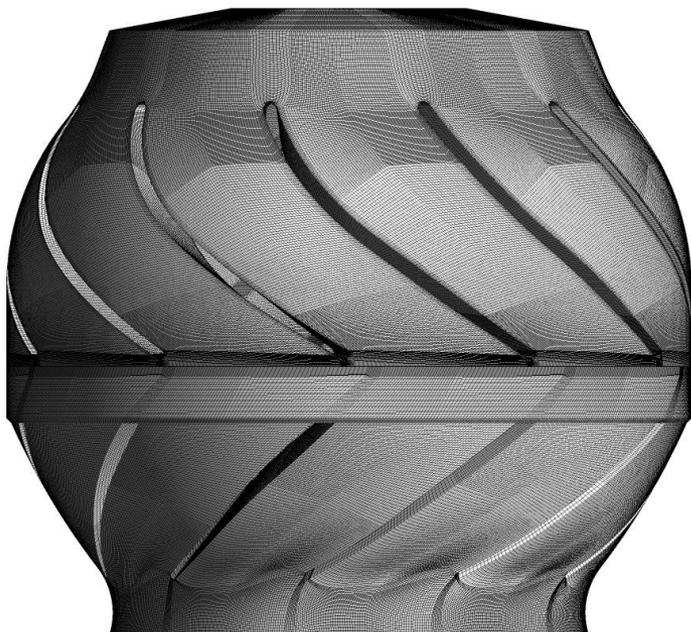
$$\frac{\partial}{\partial t} \left( m \sum_{i=1}^3 \frac{M_{(2)} (1-x_i)}{v_i} s_i \right) + \text{div} \left( \sum_{i=1}^3 \frac{M_{(2)} (1-x_i)}{v_i} \mathbf{w}_i \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( m \sum_{i=1}^3 \frac{e_i}{v_i} s_i + (1-m) \frac{e_s}{v_s} \right) + \text{div} \left( \sum_{i=1}^3 \frac{h_i}{v_i} \mathbf{w}_i - \lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \right) = A_g$$

$$\mathbf{w}_i = -K \frac{f_i}{\mu_i} \left( \frac{\partial P_i}{\partial \mathbf{r}} - \frac{M_i}{v_i} \mathbf{g} \right)$$



## Тестовая задача: ступень погружного насоса



- Две детали: размер сеток 2.7 млн. и 4.9 млн. ячеек
- Сетка построена в ANSYS ICEM CFD, расчет проведен в пакете OpenFOAM

# Итерационные методы

Solver: ***BiCGStab***

Preconditioner: ***Multigrid***, V-cycle

***CAMG:***

Classical Algebraic Multigrid

***SAMG:***

Smoothed Aggregation Multigrid

***CUSP***-based implementation

***hypre***-based implementation

Smoother: ***Chebyshev polynomials***

Polynomial order: **2**

Polynomial order: **2, 3**

## GPU как ускоритель

- Перенести код целиком невозможно
- Стратегия состоит в выделении ключевых блоков алгоритма и реализации в виде “ядер” CUDA
- Другая архитектура памяти – пересмотр всех алгоритмов
- Копирование данных в память GPU и обратно
  - вносит дополнительную латентность вызовов
  - касается и слоя MPI

# Произведение разреженной матрицы на вектор (SpMV)

- Теоретический минимум операций чтения из памяти –  $NNZ + N$
- Формат CRS:  $2*NNZ + 2*N$ 
  - реализация Натана Белла (например, CUSP)
  - MGPU Sparse Library. URL: <http://www.moderngpu.com>
- Формат ELLPACK:  $2S*N+N$ ,  $\min: 2*NNZ+N$ 
  - реализация тривиальна
  - есть множество модификаций, в т.ч. “гибридные”
- Формат DIA:  $ND*N + N$ ,  $\min: \underline{NNZ+N}$ 
  - реализация тривиальна
  - нетривиален алгоритм преобразования в DIA из других форматов
  - *Возможно, “гибридные” модификации перспективны?*

# Время выполнения SpMV: насос, 2.7М, GPU: M2090, 64-bit float, мсек. CUDA Toolkit 5.0

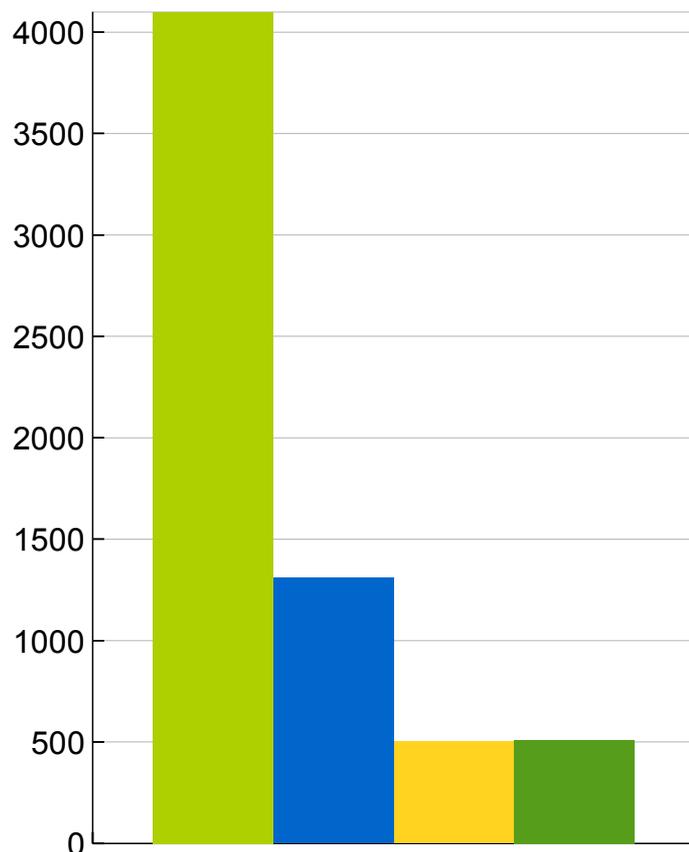
level:	csr (GPU, cusp)	ell (GPU, cusp)	hyb (GPU, cusp)	csr (GPU, CUSPARSE)	csr (1CPU)	CPU/best GPU ratio
0	3.25	2.23	2.23	3.55	38.04	17.06
1	3.92	4.63	3.94	3.53	35.10	9.93
2	2.74	3.32	2.37	2.23	20.44	9.15
3	1.18	1.91	1.39	1.49	12.74	10.77
4	0.51	1.57	0.94	0.93	6.95	13.72
5	0.21	0.78	0.53	0.41	3.08	14.60
6	0.08	0.31	0.44	0.21	1.11	14.64
7	0.03	0.19	0.47	0.07	0.31	10.79
8	0.01	0.11	0.26	0.04	0.09	8.76
9	0.004	0.05	0.06	0.03	0.02	4.38

## Операции с векторами

- Используются функции CUSP и thrust:
  - `cusp::blas::axpby()`
  - `thrust::reduce()`, `thrust::transform_reduce()`
- Векторы на GPU представляются как объекты-отражения векторов на CPU
- Прозрачное копирование объектов с CPU на GPU и обратно позволяет сопрягать CPU и GPU код в гибких комбинациях

# BiCGStab CUSP/SLS на 1 GPU

Время выполнения, мсек:



Задача: направляющий аппарат 4.9М

CPU: Intel Xeon E5-2665

GPU: NVIDIA Tesla M2090

20 итераций

- SLS\_CPU (1 thread)
- SLS\_CPU (1 socket)
- CUSP
- SLS\_GPU

**1 CPU socket / 1 GPU = 2.6**

# BiCGStab CUSP на 1 GPU: теоретический максимум

- Задача относится к категории memory-bound

Max. bandwidth Intel Xeon E5-2665, 1 socket: 51,2 Gb/s

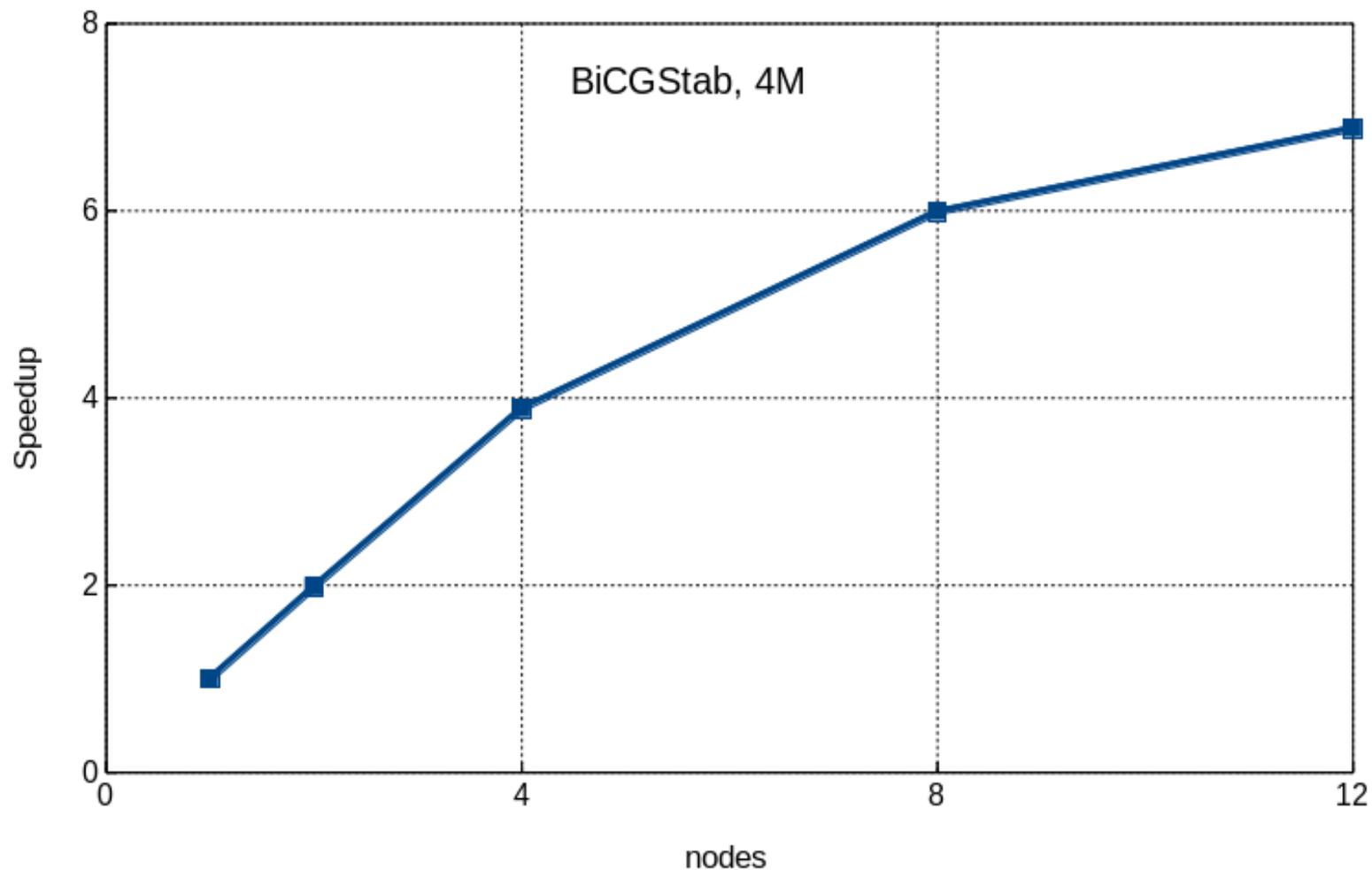
Max. bandwidth NVIDIA Tesla M2090: ECC off: 177 Gb/s

ECC on: 154,9 Gb/s

- Соотношение: **3,0** – это теоретический максимум

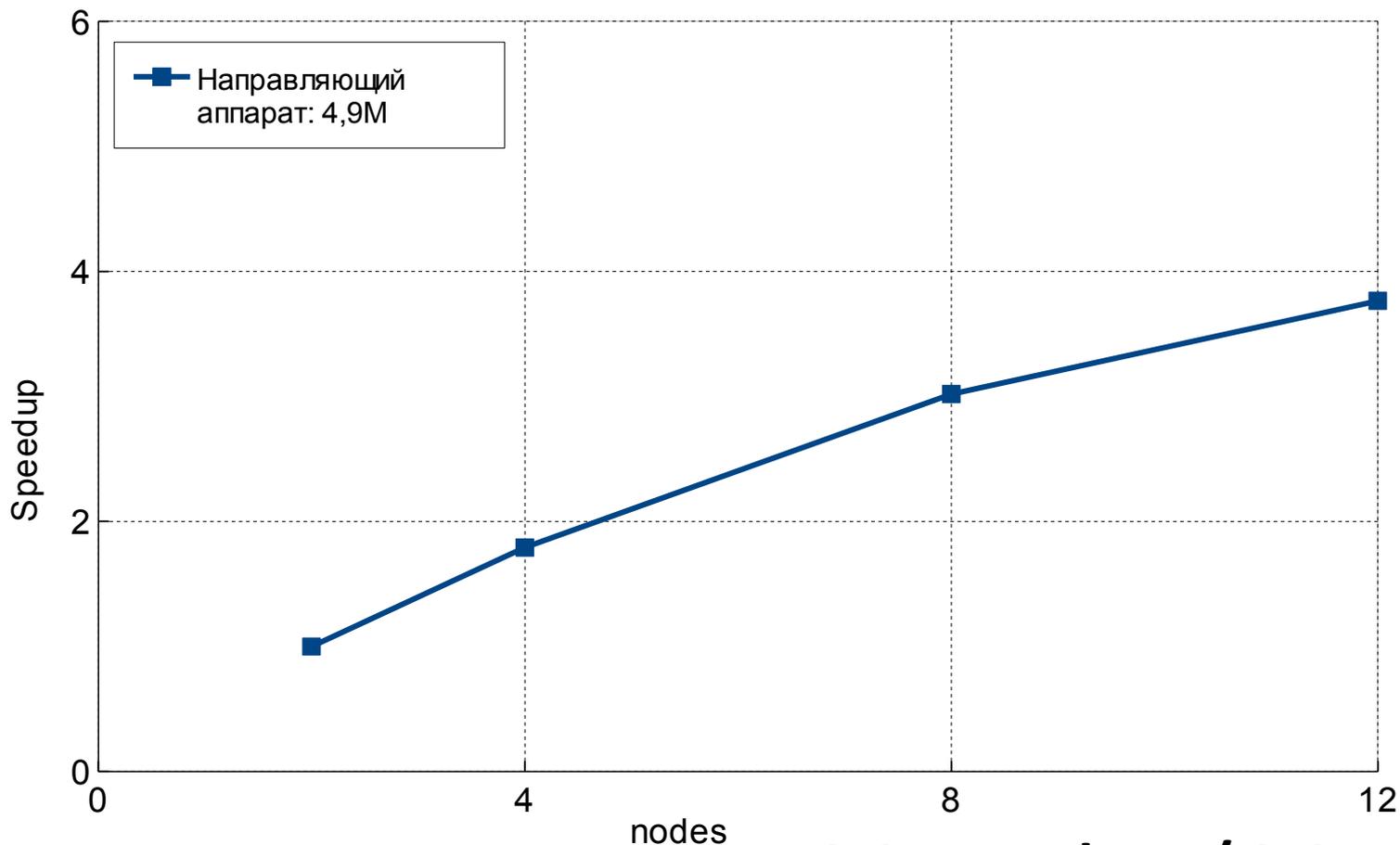
# Масштабируемость BiCGStab SLS\_GPU

Задача: направляющий аппарат 4.9M



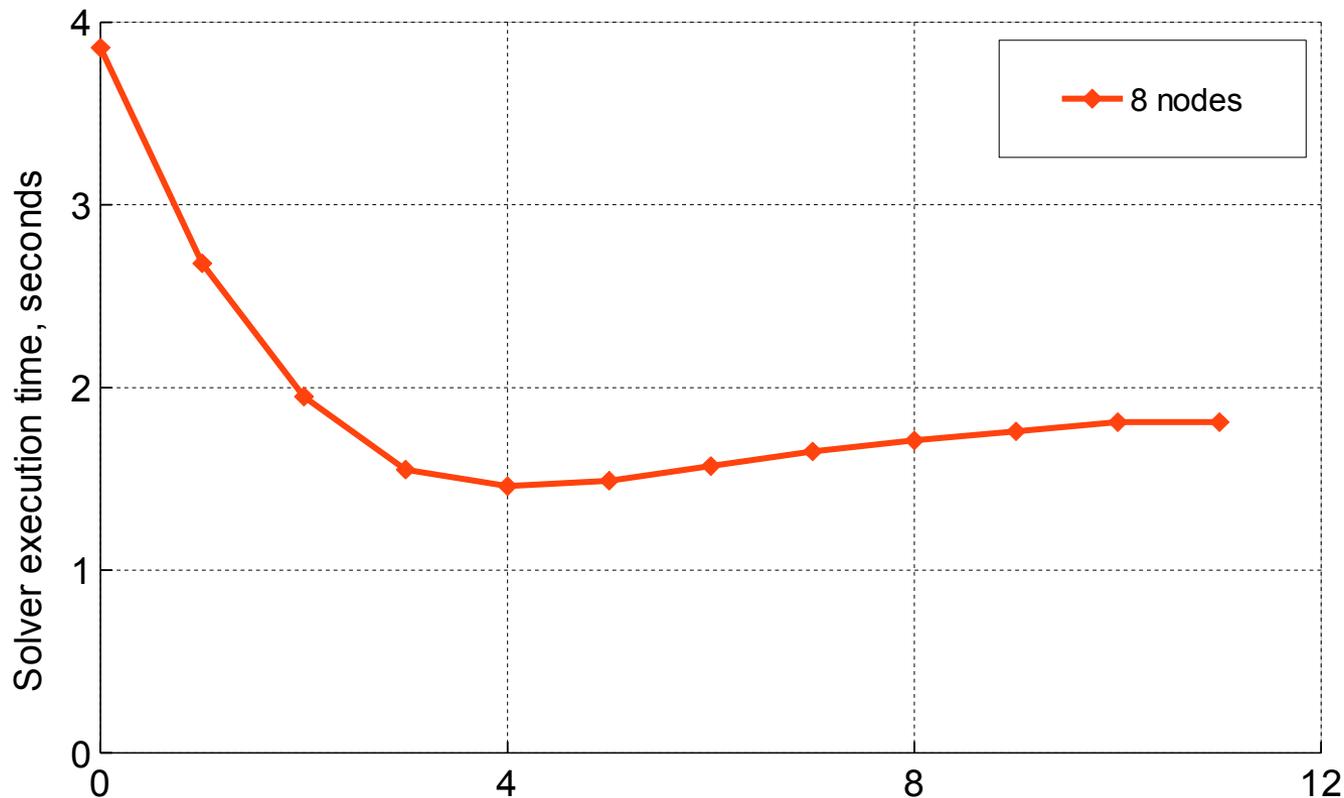
# CAMG солверная часть, масштабируемость

Задача: направляющий аппарат 4.9M



**2 CPU sockets / 2 GPUs = 1.7**

## CAMG: несколько уровней MG на GPU, 8 nodes



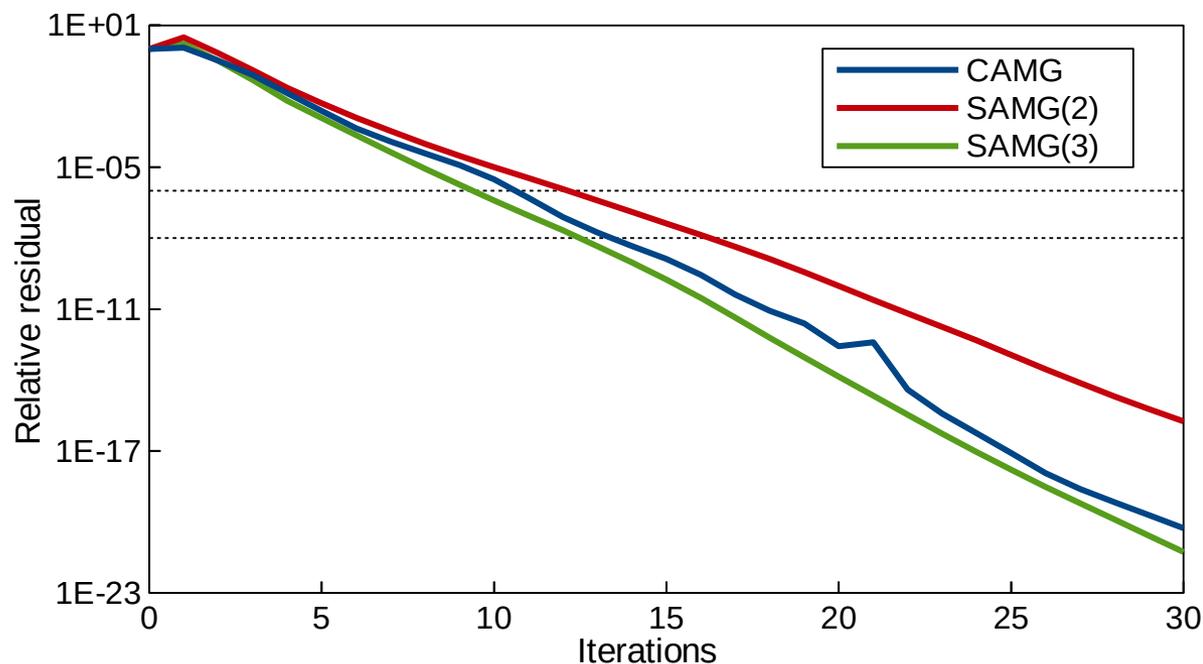
- Оптимально: 4 уровня MG на GPU, остальные на CPU
- Другое соотношение для другого числа узлов и размера матрицы

# Скорость сходимости методов, рабочее колесо 2.7М

#	Размер матрицы	
	CAMG	SAMG
0	2712320	2712320
1	1078627	364846
2	427949	20661
3	181283	1132
4	75393	107
5	28974	24
6	10320	-
7	3464	-
8	1123	-
9	356	-
10	109	-
11	46	-

## SAMG:

- + вдвое быстрее скорость агрегирования при переходе на следующий уровень
- + быстрее построение иерархии матриц
- медленнее скорость сходимости



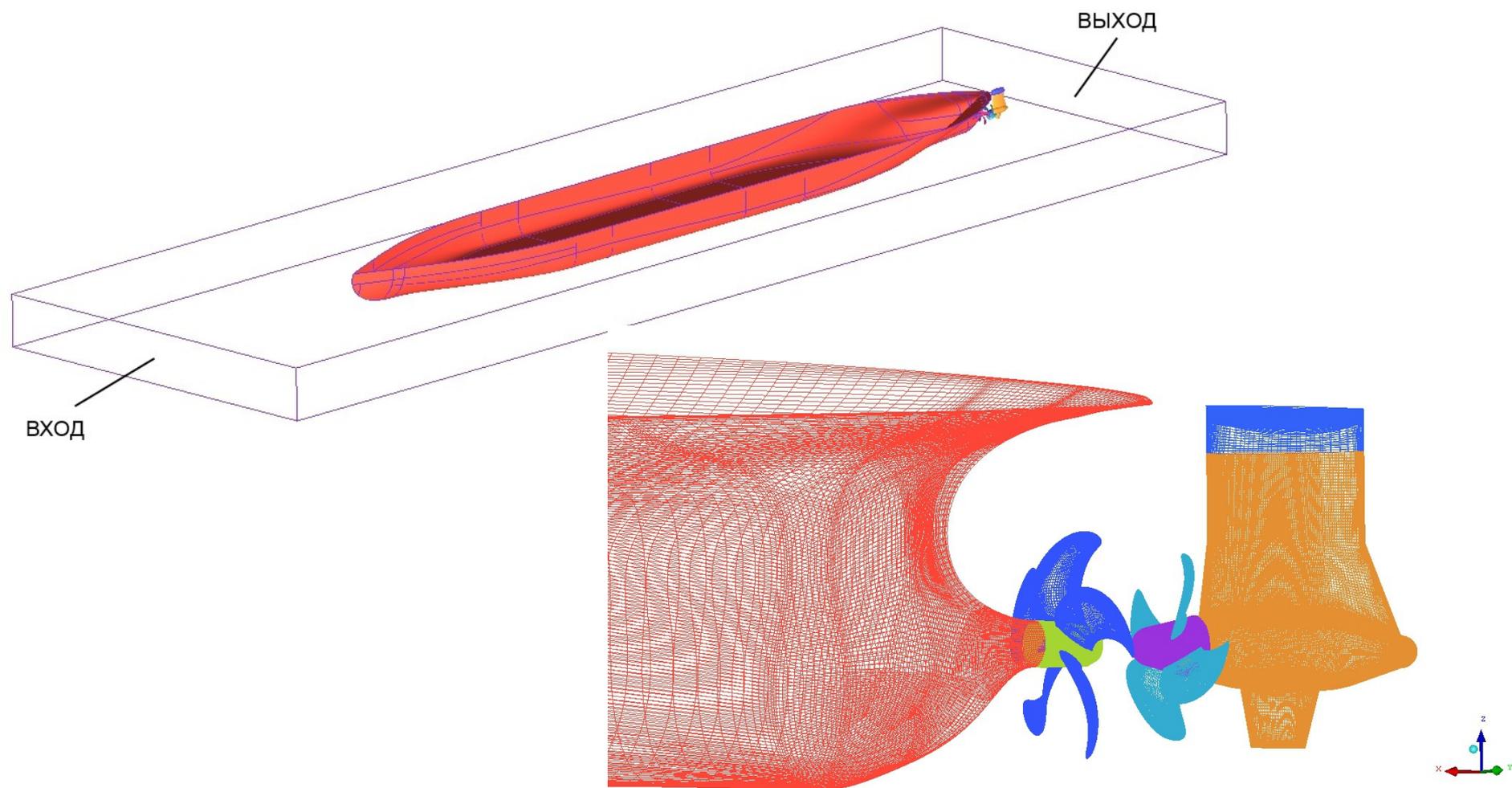
## Результаты, невязка $10^{-8}$

Матрица	Рабочее колесо, 2.7 млн. неизвестных			Направляющий аппарат, 4.9 млн. неизвестных		
	СAMG	SAMG(2)	SAMG(3)	СAMG	SAMG(2)	SAMG(3)
Время расчета 1 итерации	3.45	2.23	2.88	6.16	4.02	5.23
Кол-во итераций	14	17	13	16	19	17
Время решения	48.3	37.9	37.4	98.6	76.4	88.9

## Сопряжение с OpenFOAM

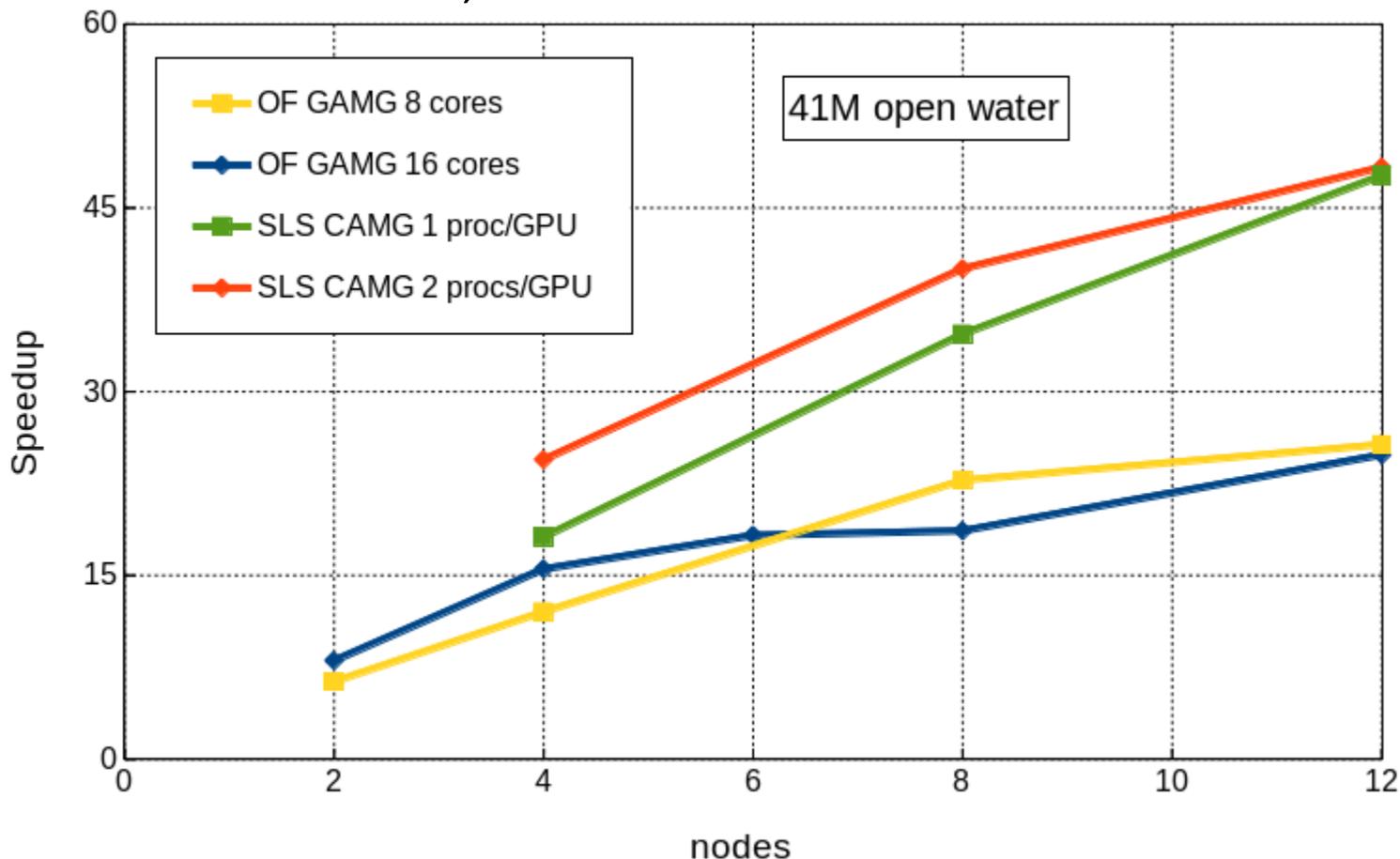
- Создан плагин, позволяющий использовать реализованные методы в ходе расчетов задач в пакете OpenFOAM, в т.ч. MiltiGPU-режим
- Реализована поддержка *processor* и *cyclicAMI*-патчей для расчета задач с вращающимися подобластями в параллельном режиме
- Используемые методы обладают большей робастностью по сравнению с многосеточным методом GAMG из пакета OpenFOAM

# Моделирование напорных характеристик винтов



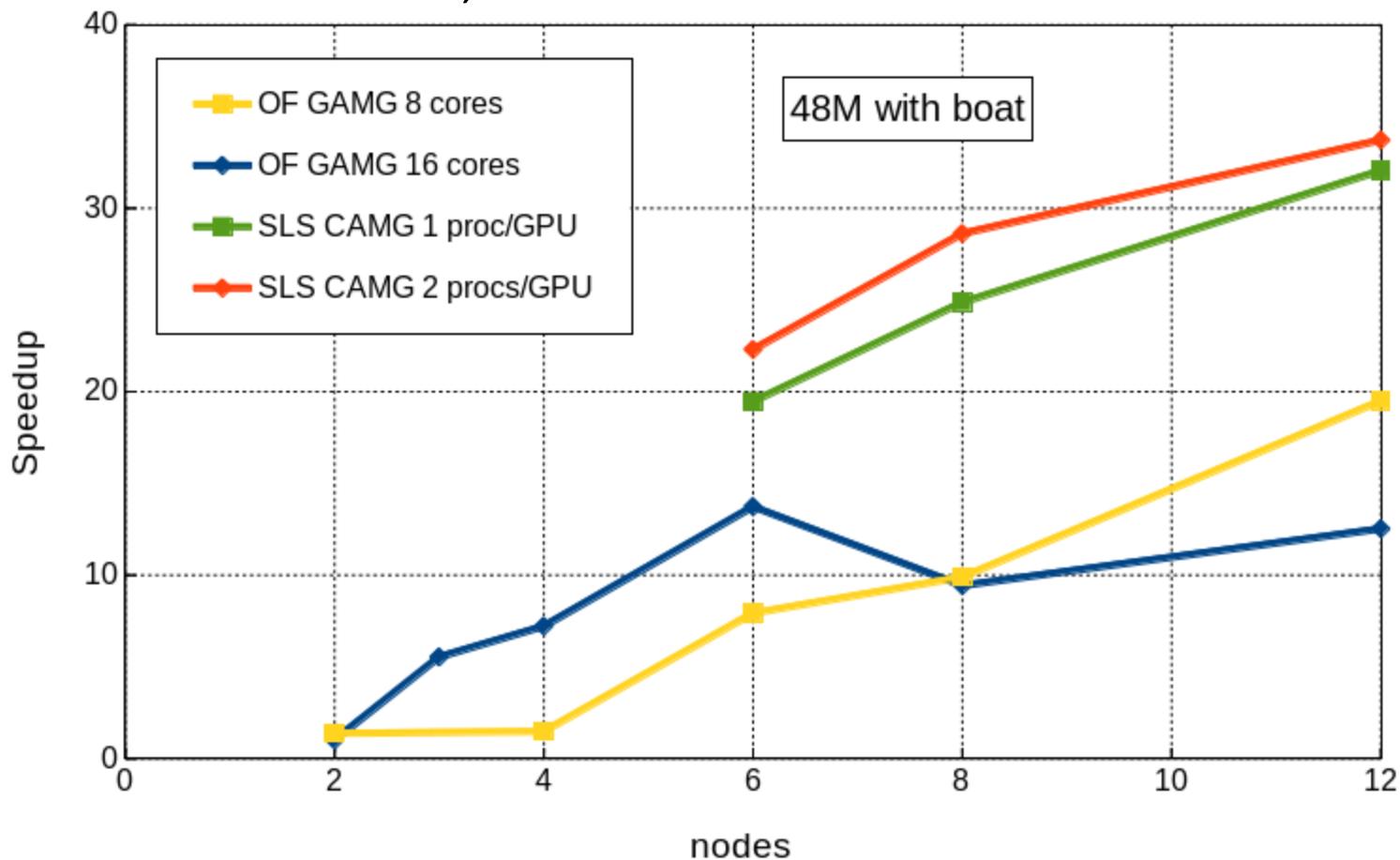
# Моделирование характеристик винтов в OF: постановка задачи в открытой воде

CPU: Intel Xeon E5-2665; GPU: NVIDIA Tesla M2090



# Моделирование характеристик винтов в OF: постановка задачи с корпусом судна

CPU: Intel Xeon E5-2665; GPU: NVIDIA Tesla M2090

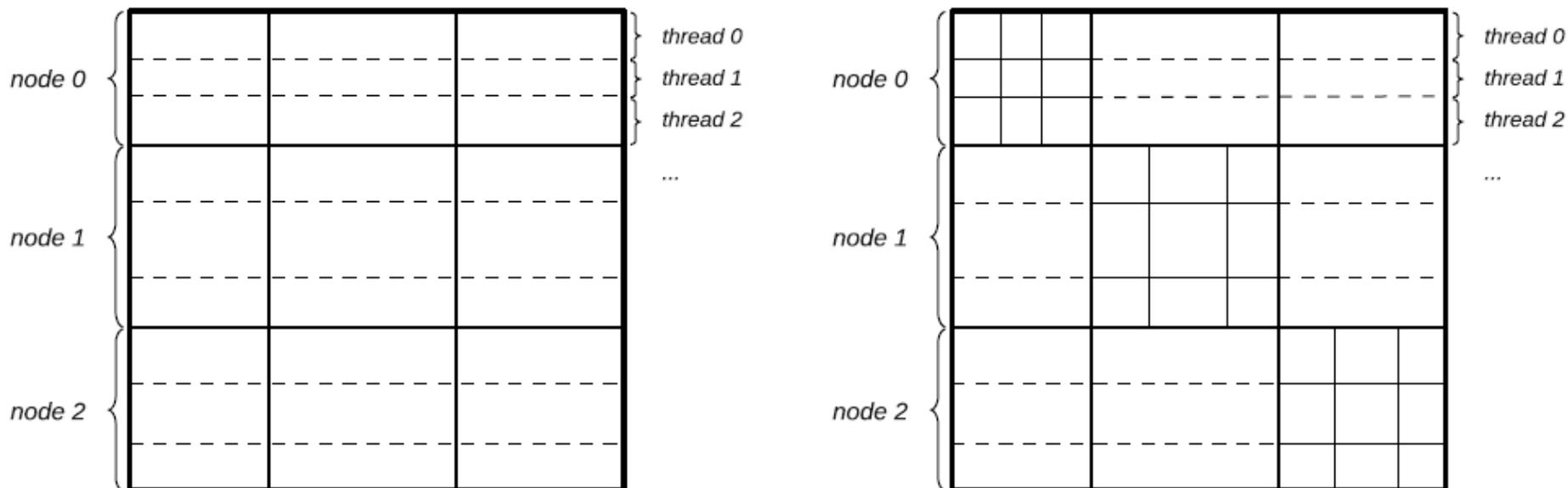


## Перспективы дальнейшего развития

- Поиск форматов представления матриц в применении к GPU, разработка гибридных форматов
- Уменьшение объёмов чтения из основной памяти: 16-битные индекс-векторы, 32-битные числа с плавающей точкой
- Перенос setup-части
- Совершенствование схемы сопряжения с OpenFOAM
- Адаптация к Kepler
- ...

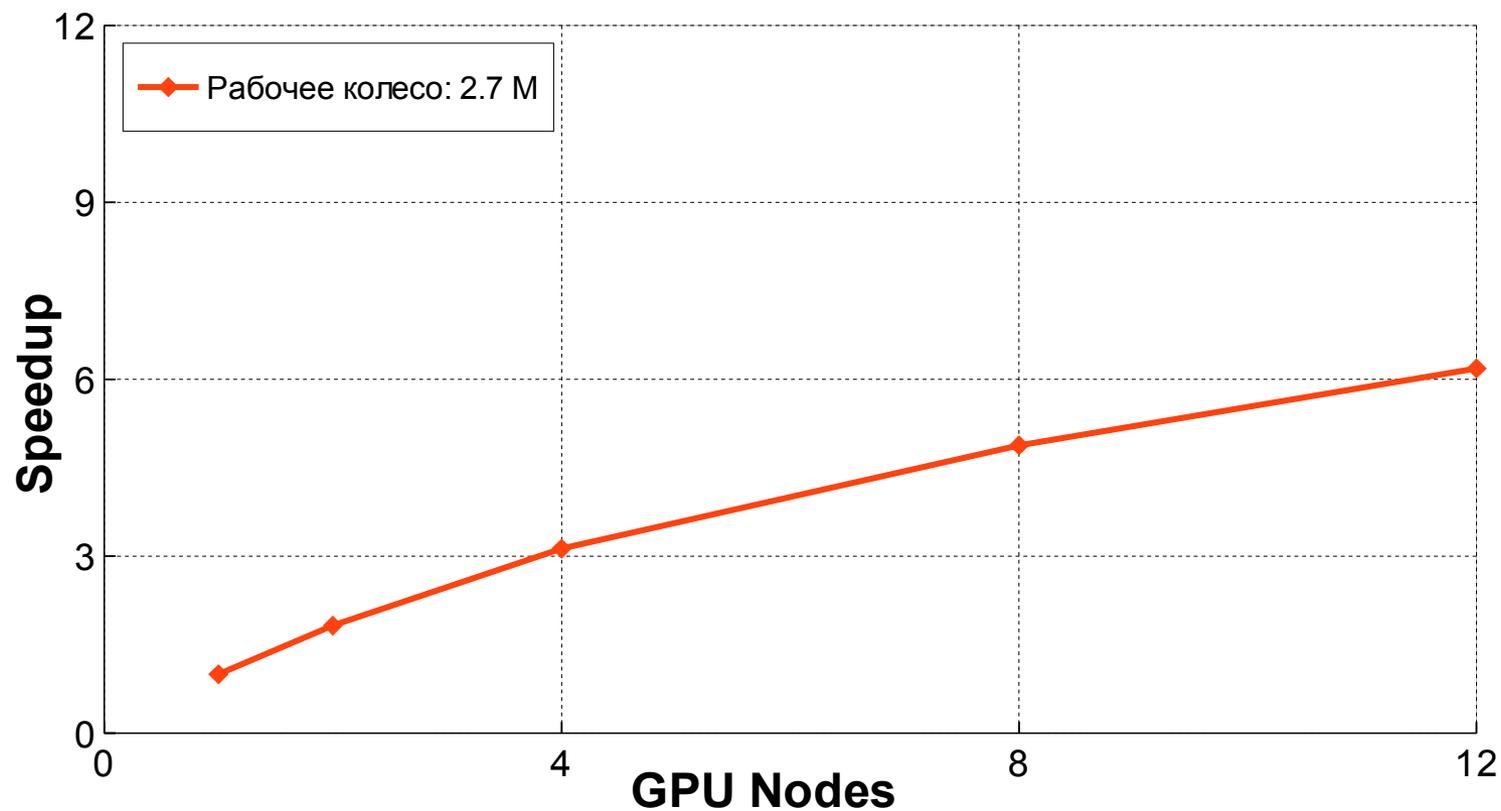
**Спасибо за внимание!**

# SparseLinearSol (SLS), иерархическая структура



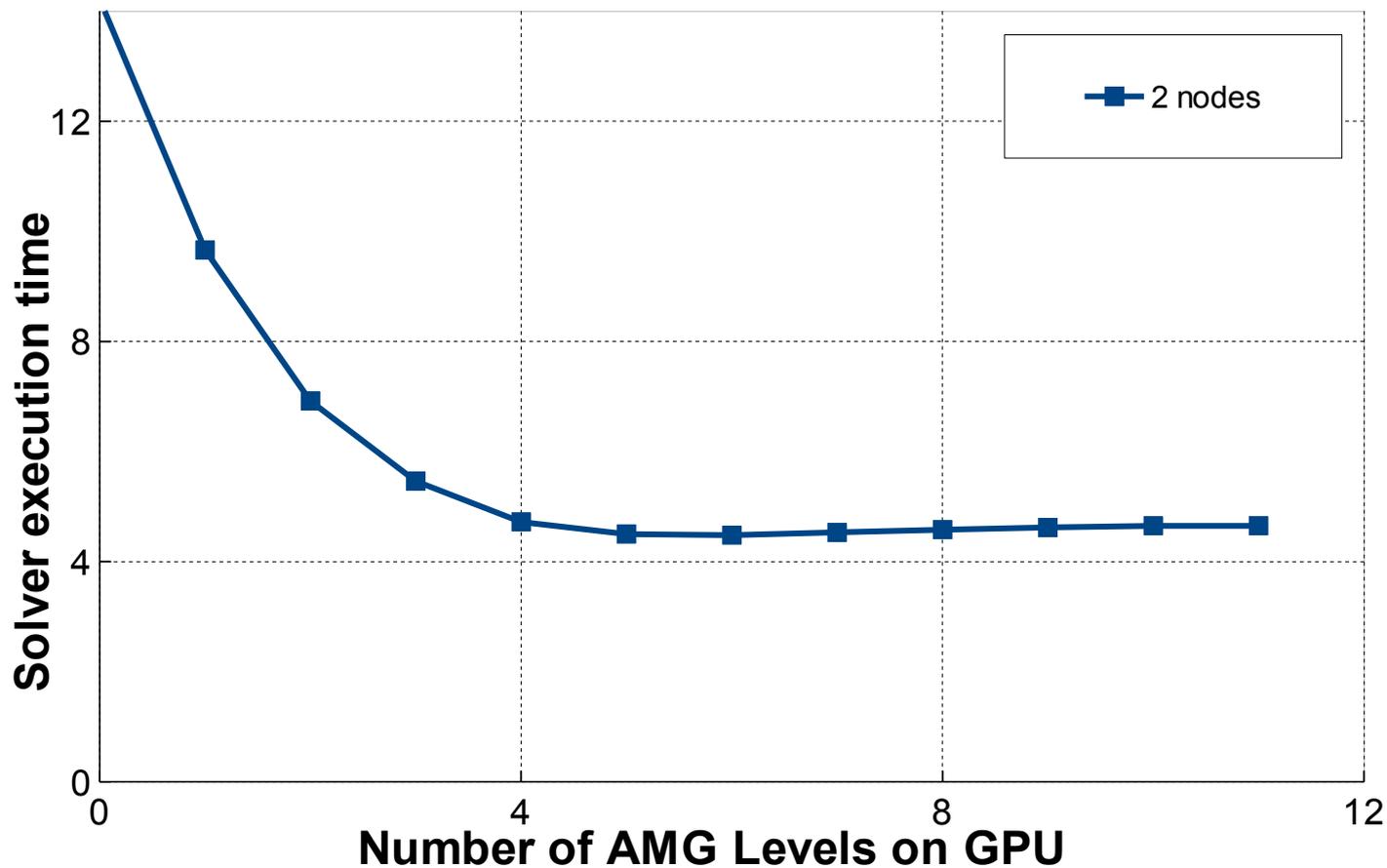
- Многоуровневое разделение данных внутри узла
- На каждом уровне разделения своя реализация синхронизации процессов

## CAMG solver part 2M scalability



**1 CPU socket / 1 GPU = 1.8**

## CAMG: несколько уровней на GPU, 2 nodes



## Выводы, дальнейшая работа

- Большое количество алгоритмических сложностей:
  - поиск форматов в применении к GPU, разработка гибридных форматов
  - уменьшение объёмов чтения из основной памяти: 16-битные индекс-векторы, 32-битные числа с плавающей точкой
  - GPU-алгоритмы сегментирования
- Ближайшие планы: multi-GPU AMG солвер
- Интеграция с OpenFOAM
- Адаптация к Kepler...