

УДК 004.051

Белезко А. А., Кучумов Р. И., Фаткина А. И.,
Ганкевич И. Г.

Применение технологий параллельного программирования в задаче моделирования волн в программе MASNUM WAVE

1. Введение. Ветровые волны создаются в результате воздействия ветра на поверхность воды и могут перемещаться на большие расстояния пока не достигнут суши. Так как их размер может достигать нескольких десятков метров, они оказывают большое влияние на безопасность морской навигации и прибрежных территорий. Кроме этого, ветровые волны являются причиной изменения климата, так как несколько кубических метров воды имеют значительно большую теплоемкость, чем такой же объем воздуха.

Рост потребности предсказания ветровых волн обуславливает развитие гидрологии, создание математических моделей и разработку программного обеспечения. Точность результатов вычислений этих математических моделей зависит от рассматриваемого разрешения в пространстве и времени. Однако, с ростом разрешения растут и требования к вычислительным системам.

В данной статье рассмотрено ускорение пакета для моделирования ветровых волн по Земному шару Masnum Wave (MARine Science and NUMerical Modeling) [1]. Кроме этого, описаны особенности параллельной реализации программ на китайском суперкомпьютере Sunway TaihuLight.

2. Моделирование волн в Masnum Wave. Модель Masnum Wave основана на уравнении баланса волновой энергии в сферических координатах. В качестве параметров модели используются

Белезко Алексей Анатольевич – студент, Санкт-Петербургский государственный университет; e-mail: st058509@student.spbu.ru, тел.: +7(812)428-47-83

Кучумов Руслан Ильдусович – студент, Санкт-Петербургский государственный университет; e-mail: st058444@student.spbu.ru, тел.: +7(812)428-47-83

Фаткина Анна Игоревна – студент, Санкт-Петербургский государственный университет; e-mail: st035020@student.spbu.ru, тел.: +7(812)428-47-83

Ганкевич Иван Геннадьевич – ассистент, Санкт-Петербургский государственный университет; e-mail: i.gankevich@spbu.ru, тел.: +7(812)428-47-83

функции, описывающие рассеивание волн, влияние ветра, рассеивание из-за трения об океанское дно, взаимодействие между волнами и влияние подводных течений.

Была использована оригинальная реализация Masnum Wave на языке Fortran 90 с технологией MPI. Каждый MPI процесс выполняет итерации, содержащие следующие этапы: чтение данных функций внешнего воздействия, вычисление продвижения волн, синхронизация граничных областей и сохранение результатов. На этапе продвижения волн вычисляются координаты и волновые числа волнового пакета на границах временного интервала и спектр энергии интерполируется между этими значениями. На этапе синхронизации граничных областей MPI процессы, вычисляющие смежные области, обмениваются значениями на их границах. На этапе сохранения результата Masnum Wave записывает спектр, волновое смещение и контрольные точки в файлы.

3. Используемое аппаратное и программное обеспечение.

Работа с пакетом Masnum Wave осуществлялась на вычислительном кластере Sunway TaihuLight, занявшим в 2016 году первое место в рейтинге наиболее производительных суперкомпьютеров мира TOP500 [2].

Sunway TaihuLight состоит из вычислительных узлов с процессорами Shenwei 26010. Каждый процессор содержит по 4 гетерогенные процессорные группы, содержащие по одному управляющему (Management Processing Element, MPE) и по 64 вычислительных ядра (Computing Processing Elements, CPE). Тактовая частота всех ядер 1,45 ГГц. У каждого вычислительного ядра имеется локальный кэш размером 64 Кб.

Для работы с Sunway TaihuLight и вышеописанным процессорными разработчиками предоставлены такие технологии, как MPI 3.0, OpenACC 2.0, Accelerated Multithread library (аналог PThreads) [3].

Чтобы использовать все доступные вычислительные ресурсы, было изменено количество процессов MPI и добавлены в исходный код директивы OpenACC. При использовании OpenACC ядра MPE будут выполнять последовательные части кода, создавать задачи, доступные для параллельного выполнения на CPE, и записывать данные, необходимые для их выполнения, в локальный кэш. Ядра CPE, в свою очередь, будут получать эти задачи, выполнять их и возвращать результат MPE.

4. Анализ и применение технологий параллельного программирования. Проведена оценка времени выполнения функций и процедур, вызываемых при работе Masnum Wave. Замеры времени выполнения каждого этапа показали, что вычисление продвижения волн является одним из наиболее затратных. Стадия записи в файл также занимала достаточно много времени, но ее не учитывали, так как фактическая запись происходила только один раз за моделируемый день и ее периодичность может быть настроена. Время синхронизации MPI процессов было незначительным.

Функция, вычисляющая продвижение волн содержит четыре вложенных цикла, каждый из которых итерирует по координатам фазового пространства. Итерации этих циклов не содержат зависимостей по данным и поэтому могут выполняться параллельно на CPE ядрах. Все необходимые для этой функции данные могут быть скопированы в кеш CPE, потому что, во-первых, с ростом числа процессов размер вычислительной области каждого процесса уменьшается и поэтому требует меньше памяти и, во-вторых, OpenACC позволяет копировать массивы частично. Кроме этого, некоторые массивы (такие как координаты, волновые числа и частоты) имеет смысл сохранять в кэше между вызовами функции продвижения волн.

Для Sunway TaihuLight есть собственная реализация OpenACC, в которой, как утверждается в [3], доступны все функции стандарта версии 2.0. Однако в ходе использования OpenACC выяснилось, что директивы для копирования данных в кэш память вычислительных узлов не работают. Эта особенность не позволяет задействовать весь потенциал платформы, так как вычислители используют общую память, что замедляет этот процесс.

Помимо этого возникли следующие сложности:

- отсутствует документация и руководства пользователя. Многие сообщения компилятора выводились по-китайски, на C++ или в бинарном формате;
- компилятор не обрабатывает директивы OpenACC, находящиеся в отдельных файлах `.inc`. Для решения этой проблемы, необходимо было вручную переместить содержимое этих файлов в файлы с исходным кодом (`.f90`);
- компилятор не поддерживает определенные в стандарте директивы для управления памятью (`data`);
- компилятор не может определить размер массива и скопировать его в кеш CPE, если память под него выделяется в другом

объектном файле. Чтобы обойти эту проблему, была изменена архитектура некоторых модулей и переписали функции инициализации и выделения памяти.

- не поддерживается вложенный параллелизм.

5. Полученные результаты. После применения описанной в предыдущем разделе модификации были получены результаты, которые представлены в таблице.

Таблица. Результаты расчетов. M — количество MPI процессов, N — количество потоков OpenACC

| Версия программы | M | N | Время, с. | Ускорение |
|------------------|-----|-----|-----------|-----------|
| Последовательная | 1 | 1 | 71 | 1 |
| MPI + OpenACC | 1 | 64 | 284 | 0,25 |
| MPI | 64 | 1 | 0,55 | 129 |
| MPI + OpenACC | 64 | 64 | 1,54 | 46 |

После модификации Masnum Wave были обнаружены некоторые не документированные проблемы компилятора, которые не позволили полноценно использовать многие возможности процессоров суперкомпьютера. Несмотря на то, что некоторые из них удалось обойти, ускорение было получено только при увеличении количества вычислительных узлов, а не при использовании специальных вычислительных ядер.

Во второй строке таблицы представлено время работы одного MPI процесса с применением OpenACC. При таких условиях загрузка программа имеет наибольшее время работы. Это связано с невозможностью копирования данных в кэш CPE, что вызывает большие накладные расходы.

Из таблицы видно, что наиболее производительный результат был получен при использовании 64 потоков MPI без использования OpenACC. Такой результат объясняется тем, что программа хорошо параллелизуема.

6. Заключение. Рассмотрена программа для моделирования волн по всему Земному шару Masnum Wave. В ней используются MPI процессы, каждый из которых в своей области выполняет итерационную процедуру численного решения уравнения.

Проанализирована работа этой программы на первом в мире по производительности китайском суперкомпьютере Sunway TaihuLight.

Выявлены наиболее затратные этапы вычислений и предложен способ для их оптимизации с учетом особенностей этого суперкомпьютера. Кроме того, программа была модифицирована с использованием реализации стандарта OpenACC 2.0, доступного на используемом аппаратном обеспечении.

Литература

1. Fangli Qiao, Wei Zhao, Xunqiang Yin et al. A highly effective global surface wave numerical simulation with ultra-high resolution // SC'16 Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis. Salt Lake City: IEEE Press Piscataway. 2016. P. 46–56.
2. The TOP500 List. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.top500.org/lists/2016/11/> (дата обращения: 01.03.17).
3. Report on the Sunway TaihuLight System. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.netlib.org/utk/people/JackDongarra/PAPERS/sunway-report-2016.pdf> (дата обращения: 1.03.17).