

RGrid – библиотека для распараллеливания явных методов на структурированных сетках

А.М. Иванов, Н.И. Хохлов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Существует широкая область задач, в которых используются явные методы на структурированных расчетных сетках. Во многих случаях, задачи такого рода требуют большого количества вычислительных ресурсов. В силу того, что явные методы на структурированных сетках хорошо поддаются распараллеливанию, зачастую прибегают к различным технологиям параллельного программирования. В данной работе была разработана библиотека распараллеливания расчетов такого рода, которая позволит как можно сильнее абстрагироваться от распараллеливания вычислений и решать задачу в терминах привычных последовательных вычислений. Здесь рассматривается применение библиотеки на примере задач сейсмического моделирования [1].

Библиотека RGrid позволяет писать параллельные программы для систем с общей памятью [2], для графических процессоров с использованием технологии OpenCL [3], для систем с распределенной памятью с использованием MPI, а также для гетерогенных систем на основе этих технологий.

В библиотеке используется три уровня абстракции (рис. 1). На самом нижнем уровне находится структура данных DArray, с которой пользователь работает как с обычным массивом (одномерным, двумерным или трехмерным). На следующей ступени они объединяются в рамках одного хоста и представляют участки одной расчетной сетки (локальное разбиение). При этом пользователь имеет возможность выбирать, вдоль каких координатных осей делить сетку на части. На этой ступени абстракции производится распараллеливание в системах с общей памятью. И, наконец, верхний уровень (глобальный) позволяет распределять участки одной сетки между хостами, эффективно производить чтение и запись промежуточных данных на диск для последующей обработки.

Разбиение на локальном уровне может задаваться различным образом на разных хостах для одной задачи. На каждом шаге по времени пользовательский код работает с участком сетки так, как он работал бы в последовательном случае. Между шагами по времени производится синхронизация между участками расчетной области как на локальном, так и на глобальном уровне.

Таким образом, библиотека RGrid позволяет избежать основных проблем, возникающих при решении вычислительно трудоемких задач. Первая из них – проблема нехватки памяти для хранения всей расчетной области на одном хосте – решается путем разбиения сетки на части, при этом ни в какой момент времени расчетная область не хранится в памяти одного хоста целиком. Вторая проблема – эффективность распараллеливания задач. Она возникает вследствие сложности самих расчетов, которые делают последующие оптимизации для качественного распараллеливания трудоемким процессом для пользователя.

В настоящее время с помощью данной библиотеки распараллелена задача решения уравнения линейной динамической теории упругости, которая описывается гиперболической системой уравнений. Для решения использовался сеточно-характеристический метод. Другая решаемая задача – моделирование распространения упругих волн с использованием метода конечных разностей. Обе задачи решаются с использованием явных методов, поэтому для их реализации хорошо подходит разработанная библиотека.

Распараллеливание программ, предназначенных для решения этих задач, вручную и с помощью библиотеки RGrid дает практически одинаковые показатели ускорения, но с использованием данной библиотеки намного упрощается разработка программного кода. Кроме того, программная реализация новых задач, основанных на явных методах, ведется с использованием библиотеки RGrid, которая продолжает развиваться.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-07-01931.

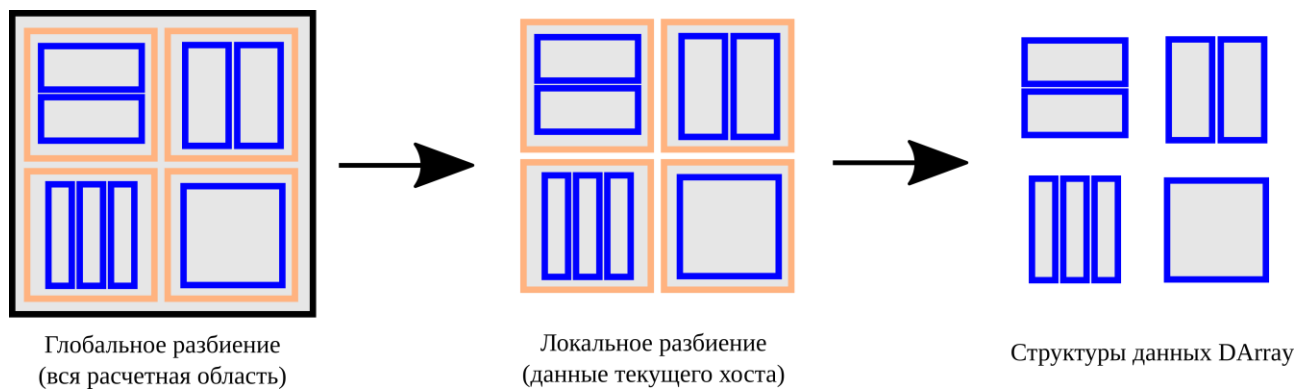


Рис. 1. Три уровня абстракции, используемые в библиотеке

Литература

1. Фаворская А.В., Петров И.Б., Голубев В.И., Хохлов Н.И. Численное моделирование сеточно-характеристическим методом воздействия землетрясений на сооружения // Математическое моделирование. 2015. Т. 27. № 12. С. 109–120
2. Иванов А.М., Хохлов Н.И. Применение технологий параллельного программирования для систем с общей памятью при решении гиперболических систем уравнений // Труды МФТИ. 2016. Т. 8. № 2. С. 101-111.
3. Иванов А.М., Хохлов Н.И. Использование технологий CUDA и OpenCL для моделирования сейсмических процессов сеточно-характеристическим методом // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции. – М.: Изд-во МГУ, 2016. – 1128 с. С. 101-111.