

Фреймворк для конечно-разностного моделирования диффузионных задач на гибридных вычислительных кластерах

Фролов Д. А.

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

Научный руководитель: Глызин С. Д.

Ярославль 2015

Система «реакция-диффузия» – нелинейная динамическая система, в которой пространственно неоднородные колебательные режимы обусловлены наличием диффузионной составляющей.

Актуальная проблема – разработка программного комплекса для моделирования диффузионных задач.

Основные требования:

- высокий уровень настраиваемости;
- эффективная работа на гибридных вычислительных системах.

Разработка части программного комплекса для моделирования диффузионных задач, отвечающей за повышение его производительности за счет применения распределенных вычислений.

Общий вид задачи «реакция-диффузия»

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(u);$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=1} = 0, \quad F(0) = 0.$$

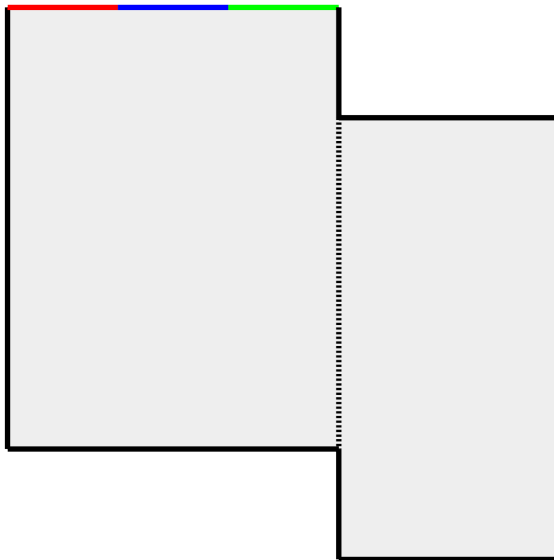
Приближение оператора Лапласа его разностными аналогами

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_j} = \frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{\Delta^2};$$

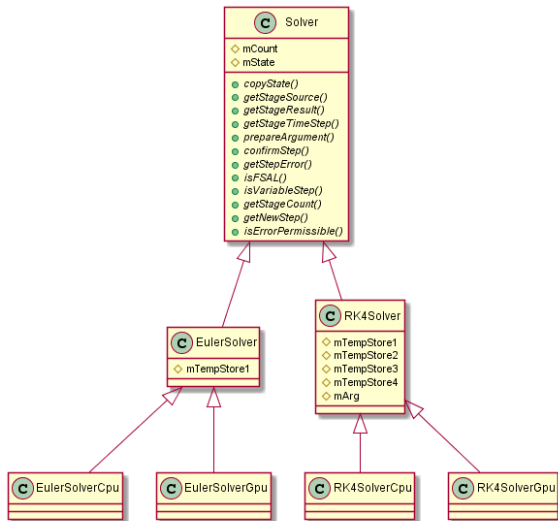
$$\dot{u}_j = D \frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{\Delta^2} + F(u_j);$$

$$u_0 = u_1, \quad u_{N+1} = u_N, \quad j = \overline{1, N}.$$

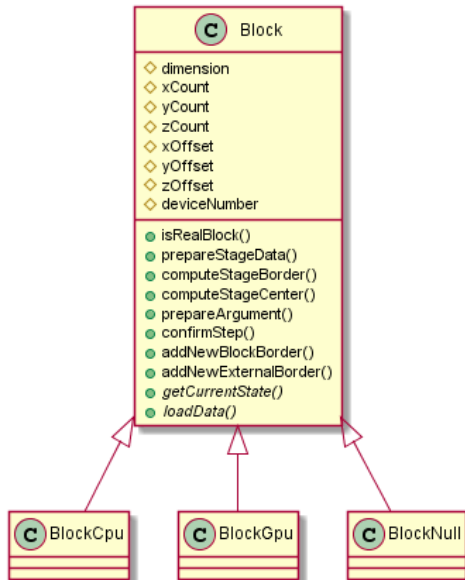
Пример области задачи



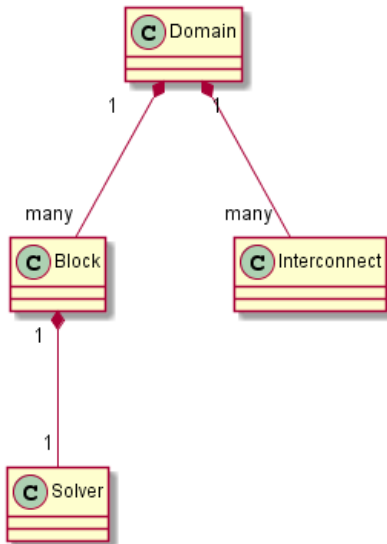
Класс Solver и его наследники



Класс Block и его наследники



Общая схема классов приложения



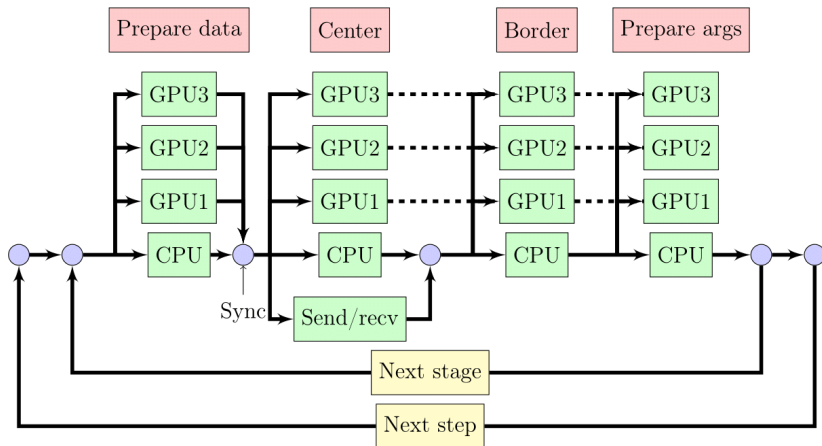
Крупнозернистый параллелизм – разделение задачи на блоки

- Передача данных между узлами кластера – библиотека MPI
- Обмен данными на одном узле – pinned-память

Мелкозернистый параллелизм

- Центральный процессор – OpenMP
- Видеокарта – CUDA

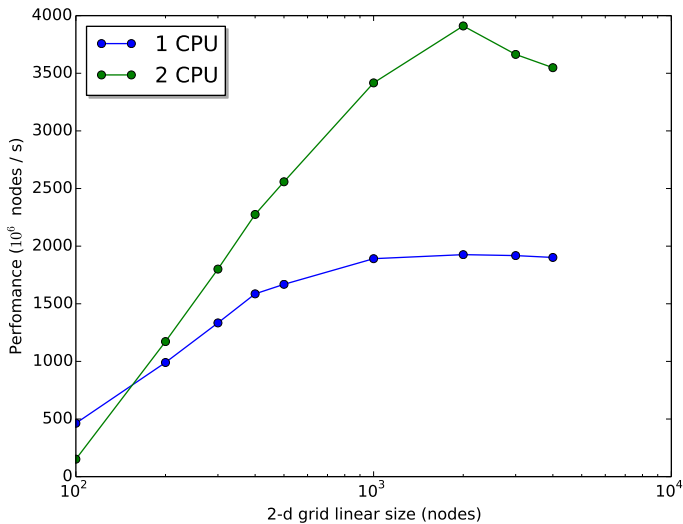
Схема расчетов



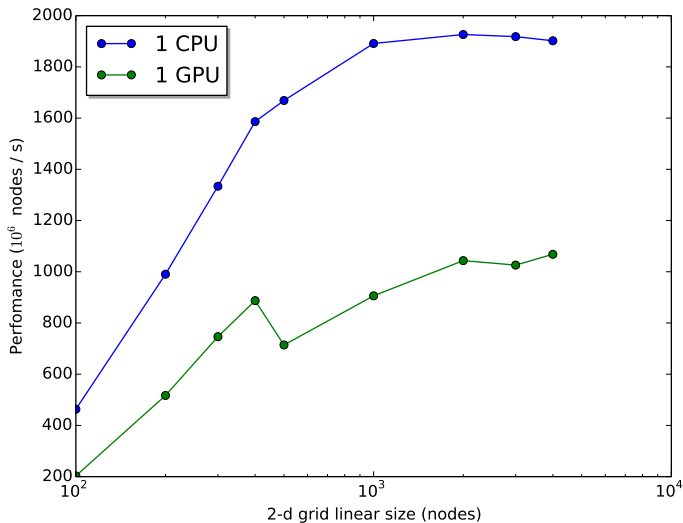
- Оборудование узла: 2xCPU E5-2690 (8 ядер, 2.9ГГц), 3xGPU Tesla M2090
- Устройство для передачи данных: Infiniband QDR 40Gbps
- ПО: SLES 12, gcc 4.8, Mellanox OFED 2.4, OpenMPI 1.8, CUDA Toolkit 7.0, SLURM 14.11

Два центральных процессора (16 ядер) в рамках одного узла используются как единое вычислительное устройство, обозначенное CPU.

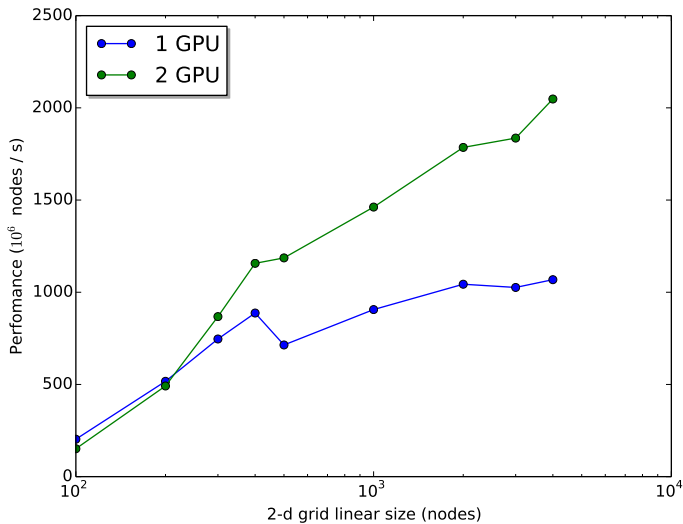
Результаты тестирования



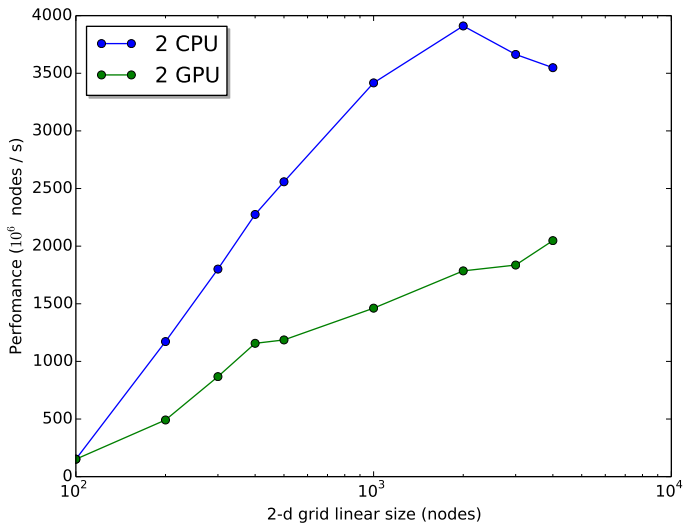
Результаты тестирования



Результаты тестирования



Результаты тестирования



Результаты тестирования

