

Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

Реализация метода решёточных уравнений Больцмана для расчетов на GPU кластере

Биколов Дмитрий Александрович

Студент

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Россия

E-mail: bikulov@physics.msu.ru

Высокопроизводительные вычисления с использованием технологии NVIDIA CUDA все больше набирают популярность. В top500.org самых мощных суперкомпьютеров мира три из пяти первых оборудованы графическими ускорителями. Последние выгодны и из-за существенного меньшего потребления электроэнергии по сравнению с кластером CPU такой же совокупной мощности.

Метод решеточных уравнений Больцмана построен на основе дискретизированного по времени, координатам и направлениям скоростей кинетического уравнения Больцмана. Он позволяет моделировать течение жидкостей и газов в пористых средах. Метод допускает реализацию в терминах высокой параллельности и потому хорошо подходит под программную модель CUDA.

CUDA не предоставляет встроенных механизмов обмена данными между видеокартами, расположенными на физически разных узлах. Эту задачу принято возлагать на MPI. MPI и CUDA выполняют разные задачи, не мешают работе друг друга, а дополняют ее. Поэтому сначала задача разбивается на подзадачи, и посредством MPI информация об области рассылается различным процессам. Каждый процесс уже использует CUDA и работает с собственной видеокартой.

Область моделирования представляет собой куб со сторонами $N_x \times N_y \times N_z$ ячеек. Последние бывают двух видов: непротекаемые и протекаемые.

Была реализована модель однокомпонентного течения LBM D3Q19 [3] с интегралом столкновений ВКГ [1]), on-grid краевыми условиями. Граничные условия позволяют фиксировать давление среды [5] или скорость потока [2]. Для расчетов используется технология CUDA вычислений на GPU и MPI для их синхронизации.

Проведена оценка масштабируемости для реального моделирования на суперкомпьютерном комплексе «Ломоносов». В качестве примера был проведен расчёт области $256 \times 512 \times 510$ с тестом Пуазейля (радиус трубы $r = 50$) на 1, 2, 5, 10, 15 и 30 видеокартах. Использовались NVIDIA Tesla X2070, стоящие на суперкомпьютере Ломоносов. В результате был получен линейный рост производительности при увеличении числа видеокарт: объем данных на каждой из них уменьшается — расчёт происходит быстрее, а обмен данными по MPI происходит параллельно и занимает фиксированное время.

В рамках текущей реализации использован приём [4], позволяющий уменьшить необходимый объем дополнительной памяти для работы алгоритма вдвое при сохранении простоты реализации.

Проведена верификация реализованного алгоритма с помощью двух тестов: стационарного течения Пуазейля и расчёта коэффициента лобового сопротивления шара. Результаты моделирования хорошо согласуются с теоретическими значениями в обоих случаях.

Литература

1. Bhatnagar P. L., Gross E. P. and Krook M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. // Phys. Rev. 1954 No. 94 p. 511-525.
2. Hecht M., Harting J.J. Implementation of on-site velocity boundary conditions for D3Q19 lattice Boltzmann simulations // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. 2009. No. 1.
3. Kutay M.E., Aydilek A.H. and Masad E. Laboratory validation of lattice boltzmann method for modeling pore-scale flow in granular materials. // Computers and Geotechnics 2006 No. 33 p. 381-395.
4. Latt J. How to implement your DdQq dynamics with only q variables per node (instead of 2q). Technical report, Tufts University, 2007.
5. Narvaez A., Harting J. Evaluation of Pressure Boundary Conditions for Permeability Calculations Using the Lattice-Boltzmann Method // Advances in Applied Mathematics and Mechanics. 2010. 2. No 5. 685-700.

Слова благодарности

Спасибо коллегам из «Интровижн»: Д.С. Сенину, Д.С. Демину, Г.А. Калашникову, А.В. Дмитриеву и Н.Е. Грачеву за поддержку и полезные советы. Спасибо НИВЦ МГУ за доступ на суперкомпьютер Ломоносов, С. Жуматию за быстрые ответы техподдержки.