

УДК 519.711.3

© *И. О. Стародумов, Е. В. Павлюк, С. М. Абрамов, Л. В. Клюев, П. К. Галенко, Д. В. Александров*

ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ PFC С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИБЛИОТЕКИ PETIGA¹

В работе исследуется алгоритм решения уравнения кристаллического фазового поля (Phase Field Crystal — PFC) в гиперболической постановке. Уравнение описывает фазовые превращения из метастабильного или неустойчивого состояния на масштабе атомной плотности и является дифференциальным уравнением шестого порядка по пространству и второго порядка по времени. Алгоритм основан на методе изогеометрического анализа (IGA) и реализован посредством библиотеки PetIGA. Полученный программный код допускает распараллеливание расчетов, что существенно ускоряет процесс решения задачи. Дана оценка эффективности используемых инструментов при проведении расчетов на высокопроизводительных вычислительных кластерах. Проведен анализ эффективности исследуемого алгоритма при работе с гетерогенными вычислительными системами.

Ключевые слова: кристаллическое фазовое поле, высокопроизводительные вычисления, изогеометрический анализ.

DOI: [10.20537/vm160312](https://doi.org/10.20537/vm160312)

Введение

Численное моделирование физических процессов зачастую сопряжено с решением сложных дифференциальных систем уравнений. Такие задачи могут быть решены только с использованием вычислительной техники. В случае сложных пространственно трехмерных постановок задач может оказаться недостаточно обычного персонального компьютера, что требует проводить моделирование на специализированных вычислительных комплексах. Одной из особенностей таких комплексов является поддержка параллельных вычислений. С точки зрения организации процесса распараллеливания на сегодняшний день вычислительные системы могут использовать алгоритмы, ориентированные на классические центральные процессоры (CPU) и на процессоры иной архитектуры. Классическим примером первой конфигурации является использование процессоров архитектуры x86 и библиотеки MPI. Среди нетрадиционной для параллельных вычислений архитектуры можно отметить набирающую популярность технологию компании nVidia, использующую программно-аппаратную архитектуру CUDA на базе графических процессоров (GPU). Не существует однозначного мнения о том, какая архитектура позволяет обеспечить максимальную эффективность того или иного алгоритма. Этот аспект имеет особенно большое значение в случае, если в планах разработчиков имеется создание программно-аппаратного вычислительного комплекса. В настоящей работе авторами проводится анализ производительности разработанного ранее программного пакета при его использовании на вычислителях архитектуры CUDA. Стоит отметить, что аналогичный анализ для случая классической архитектуры x86 был сделан ранее в [1].

Уравнение кристаллического фазового поля в гиперболической постановке

Уравнение кристаллического фазового поля (Phase Field Crystal: PFC) в гиперболической постановке [2] позволяет описывать фазовые превращения из метастабильного или неустойчи-

¹Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант номер 16–11–10095).

вого состояния на масштабе атомной плотности. Она описывается дифференциальным уравнением шестого порядка по пространству и второго порядка по времени:

$$\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 \mu, \quad (1)$$

где химический потенциал задается как

$$\mu(\phi) = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} = \phi^3 + \alpha \phi^2 + (1 - \epsilon) \phi + 2 \nabla^2 \phi + \nabla^4 \phi, \quad (2)$$

функционал свободной энергии имеет вид

$$\mathcal{F}[\phi, \nabla \phi, \nabla^2 \phi] = \int_{\Omega} \left[f(\phi) - |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{2} (\nabla^2 \phi)^2 \right] d\Omega, \quad (3)$$

а гомогенная часть плотности свободной энергии есть

$$f(\phi) = \frac{1 - \epsilon}{2} \phi^2 + \frac{\alpha}{3} \phi^3 + \frac{1}{4} \phi^4. \quad (4)$$

В уравнениях (1)–(4): Ω — вычислительный домен, τ — время релаксации атомного потока к стационарному состоянию, $\epsilon = (T_c - T)/T_c$ — величина переохлаждения; T и T_c — температура и температура фазового превращения, α — коэффициент, который характеризует меру метастабильности и величину энергетического барьера между жидкой и кристаллической фазами. Уравнение (1) является модификацией традиционной параболической формы уравнения кристаллического фазового поля за счет включения инерционного члена $\tau \partial^2 \phi / \partial t^2$, который играет принципиальную роль в описании процесса высокоскоростного кристаллического роста [3].

Алгоритм решения и вычислительный комплекс

Численные алгоритмы для решения уравнения PFC требуют значительных вычислительных ресурсов, а результаты расчетов должны быть представлены в пригодном для последующей обработки виде. Поэтому для решения потребовалась разработка специального алгоритма, использующего методы изометрического анализа (IGA) [4, 5]. Данный метод представляет собой модификацию метода Галеркина, в котором для аппроксимации решения используются сплайны Безье. Такой подход позволяет обеспечить \mathcal{C}^2 -непрерывное численное решение для каждой расчетной ячейки. Интегрирование по времени осуществлялось обобщенным альфа-методом. В ходе реализации алгоритма была использована библиотека PetIGA, которая является расширением библиотеки PETSc для работы с алгоритмами изометрического анализа. Более подробно алгоритм решения описан в работе [6].

Отладка и тестирование программы проводилось совместно с компанией Иммерс на специальном мобильном вычислительном кластере, который был предоставлен разработчикам в монопольное использование. Это позволило настроить вычислительную установку оптимальным образом и провести серию тестов для анализа эффективности расчетной программы. В работе [1] проводилось исследование эффективности параллельных вычислений с помощью представленного алгоритма на гомогенной конфигурации кластера. В данной работе проводится анализ для гетерогенного вычислителя, в котором непосредственные расчеты выполняются на графических процессорах nVidia Tesla k40.

Эксперименты и результаты

Для анализа эффективности распараллеливания алгоритма решения PFC-уравнения (1)–(4) были подготовлены две группы специальных тестовых задач.

1 группа. Расчеты на одном вычислительном узле. В данном случае одна и та же задача запускалась с использованием одного процессора Tesla k40. Количество потоков, которые обрабатывались одновременно, варьировалось от 1 до 20.

2 группа. Расчеты на трех вычислительных узлах, включающих по одной карте Tesla k40. Одна и та же задача запускалась сначала на одном вычислительном узле, затем на двух и, наконец, на трех. На каждом из процессоров задача исполнялась в 20 потоков.

Цель экспериментов — оценить изменение производительности выполнения расчетов при различных схемах использования аппаратного комплекса. Далее представлены некоторые результаты проведенных экспериментов.

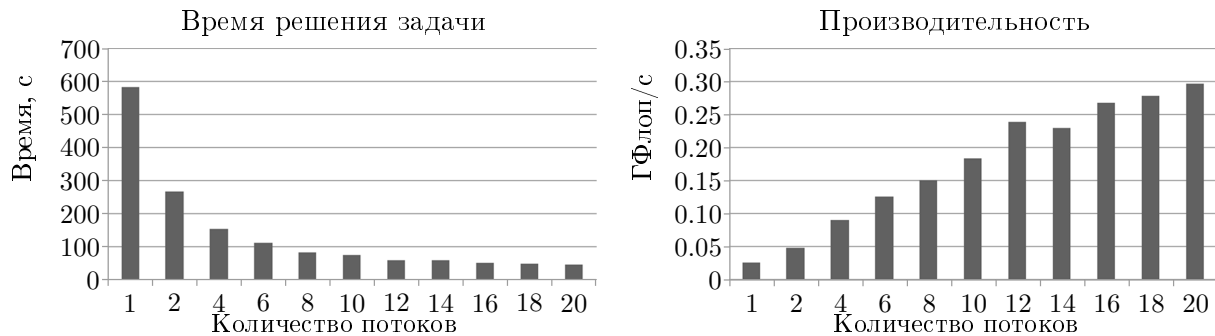


Рис. 1. Результаты расчетов первой группы тестовых задач

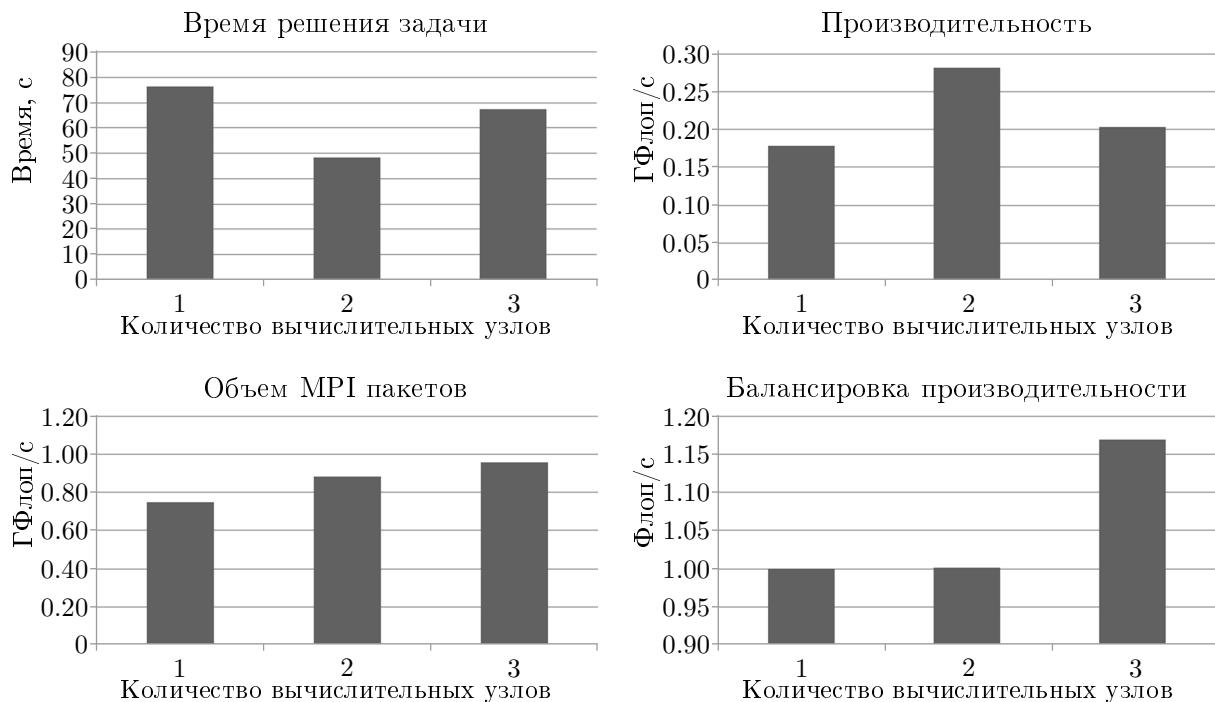


Рис. 2. Результаты расчетов второй группы тестовых задач (на каждом узле задействована одна видеокарта)

Эксперимент 1 показал, что разработанный алгоритм может быть распараллелен для расчетов на GPU NVidia Tesla, однако прирост производительности за счет дополнительных вычислительных потоков быстро уменьшается (см. рис. 1). Эксперимент 2 показал, что увеличение количества вычислительных потоков за счет подключения дополнительных видеокарт не дает существенного прироста вычислительной мощности (см. рис. 2). Кроме того, рост накладных

расходов, увеличение нагрузки на коммуникационные интерфейсы и ухудшение параметра балансировки могут приводить даже к падению производительности.

Выводы

Таким образом, эффективное использование GPU в решении PFC-уравнения (1)–(4) с использованием вычислительных алгоритмов библиотеки PetIGA возможно только в случаях, не требующих большого количества вычислительных потоков. Также использование нескольких GPU на разных вычислительных узлах может даже замедлить расчет задачи. Сопоставляя полученные результаты с [1], можно предположить, что использование вычислительных процессоров Intel x86 в решении задачи PFC рассматриваемым алгоритмом является более рациональным.

Благодарность

Авторы выражают благодарность компании Иммерс за предоставленный для тестов мобильный вычислительный кластер и техническую поддержку. Во многом благодаря уникальным возможностям конфигурирования вычислителей Иммерс удалось в кратчайшие сроки собрать установку с монопольным доступом для проведения экспериментов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Starodumov I., Pavlyuk E., Klyuev L., Kovalenko M., Medyankin A. Analysis of the efficiency PETSc and PETIGA libraries in solving the problem of crystal growth // CEUR Workshop Proceedings. 2015. Vol. 1513. P. 109–122.
2. Galenko P., Danilov D., Lebedev V. Phase-field-crystal and Swift–Hohenberg equations with fast dynamics // Physical Review E. 2009. Vol. 79. Issue 5. 051110. 11 p. DOI: [10.1103/PhysRevE.79.051110](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.051110)
3. Galenko P.K., Elder K.R. Marginal stability analysis of the phase field crystal model in one spatial dimension // Physical Review B. 2011. Vol. 83. Issue 6. 064113. 8 p. DOI: [10.1103/PhysRevB.83.064113](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.064113)
4. Hughes T.J.R., Cottrell J.A., Bazilevs Y. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2005. Vol. 194. Issues 39–41. P. 4135–4195. DOI: [10.1016/j.cma.2004.10.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.10.008)
5. Cottrell J.A., Hughes T.J.R., Bazilevs Y. Isogeometric analysis: toward integration of CAD and FEA. Wiley, 2009. 360 p.
6. Bueno J., Starodumov I., Gomez H., Galenko P., Alexandrov D. Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation // Computational Materials Science. 2016. Vol. 111. P. 310–312. DOI: [10.1016/j.commatsci.2015.09.038](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.09.038)

Поступила в редакцию 17.05.2016

Стародумов Илья Олегович, лаборатория многомасштабного математического моделирования, Уральский федеральный университет, 620000, Россия, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51.

E-mail: ilya.starodumov@urfu.ru

Павлюк Евгений Вячеславович, кафедра вычислительной математики, Уральский федеральный университет, 620000, Россия, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51.

E-mail: evgeny.pavluk@urfu.ru

Абрамов Сергей Михайлович, д. ф.-м. н., член-корреспондент РАН, Институт программных систем имени А. К. Айламазяна РАН, 152021, Россия, Ярославская область, Переславский район, с. Веськово, ул. Петра Первого, 4 а.

E-mail: abram@botik.ru

Ключев Леонид Владимирович, ООО «Иммерс», 119192, Россия, г. Москва, Мичуринский пр., 19.

E-mail: l.klyuev@immers.ru

Галенко Пётр Константинович, д. ф.-м. н., профессор, физико-астрономический факультет, Университет Фридриха Шиллера, 07743, Германия, г. Йена, Лёбдерграбен штрассе, 32.

E-mail: Peter.Galenko@uni-jena.de

Александров Дмитрий Валерьевич, д. ф.-м. н., профессор, кафедра математической физики, лаборатория многомасштабного математического моделирования, Уральский федеральный университет, 620000, Россия, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51.

E-mail: dmitri.alexandrov@urfu.ru

I. O. Starodumov, E. V. Pavlyuk, S. M. Abramov, L. V. Klyuev, P. K. Galenko, D. V. Alexandrov

The effectiveness of parallelizing an algorithm of the PFC equation solution using PetIGA library

Citation: *Vestnik Udmurtskogo Universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye Nauki*, 2016, vol. 26, no. 3, pp. 445–450 (in Russian).

Keywords: phase field crystal, high performance computation, isogeometric analysis.

MSC2010: 65D05

DOI: [10.20537/vm160312](https://doi.org/10.20537/vm160312)

The paper presents an algorithm for solving the equation of Phase Field Crystal (PFC) in a hyperbolic statement that allows to describe the phase transitions of metastable or unstable state at the nuclear density scale, described by a differential equation of the sixth order with respect to the space variable and the second order with respect to the time variable. The algorithm is based on the method of isogeometric analysis (IGA) and is implemented by PetIGA library. The resulting code allows parallel computations, which significantly speeds up the process of solving a problem. The effectiveness of used instruments during the calculations on high-performance computing clusters is evaluated. An analysis of the effectiveness of the current algorithm is carried out for heterogeneous computer systems.

REFERENCES

1. Starodumov I., Pavlyuk E., Klyuev L., Kovalenko M., Medyankin A. Analysis of the efficiency PETSc and PETIGA libraries in solving the problem of crystal growth, *CEUR Workshop Proceedings*, 2015, vol. 1513, pp. 109–122.
2. Galenko P., Danilov D., Lebedev V. Phase-field-crystal and Swift–Hohenberg equations with fast dynamics, *Physical Review E*, 2009, vol. 79, issue 5, 051110, 11 p. DOI: [10.1103/PhysRevE.79.051110](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.051110)
3. Galenko P.K., Elder K.R. Marginal stability analysis of the phase field crystal model in one spatial dimension, *Physical Review B*, 2011, vol. 83, issue 6, 064113, 8 p. DOI: [10.1103/PhysRevB.83.064113](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.064113)
4. Hughes T.J.R., Cottrell J.A., Bazilevs Y. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2005, vol. 194, issues 39–41, pp. 4135–4195. DOI: [10.1016/j.cma.2004.10.008](https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.10.008)
5. Cottrell J.A., Hughes T.J.R., Bazilevs Y. *Isogeometric analysis: toward integration of CAD and FEA*, Wiley, 2009, 360 p.
6. Bueno J., Starodumov I., Gomez H., Galenko P., Alexandrov D. Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation, *Computational Materials Science*, 2016, vol. 111, pp. 310–312. DOI: [10.1016/j.commatsci.2015.09.038](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.09.038)

Received 17.05.2016

Starodumov Il'ya Olegovich, Laboratory of Multi-Scale Mathematical Modeling, Ural Federal University, pr. Lenina, 51, Yekaterinburg, 620000, Russia.

E-mail: ilya.starodumov@urfu.ru

Pavlyuk Evgenii Vyacheslavovich, Department of Computational Mathematics, Ural Federal University, pr. Lenina, 51, Yekaterinburg, 620000, Russia.

E-mail: evgeny.pavlyuk@urfu.ru

Abramov Sergei Mikhailovich, Doctor of Physics and Mathematics, Corresponding Member of the Russian Academy of Science, Ailamazyan Program Systems Institute of the Russian Academy of Sciences, Pereslavl-Zalessky, 152021, Russia.

E-mail: abram@botik.ru

Klyuev Leonid Vladimirovich, Immers Ltd., Michurinskii pr., 19, Moscow, 119192, Russia.

E-mail: l.klyuev@immers.ru

Galenko Peter Konstantinovich, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Faculty of Physics and Astronomy, Friedrich Schiller University, Jena, D-07743, Germany.

E-mail: Peter.Galenko@uni-jena.de

Alexandrov Dmitri Valer'evich, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Department of Mathematical Physics, Laboratory of Multi-Scale Mathematical Modeling, Ural Federal University, pr. Lenina, 51, Yekaterinburg, 620000, Russia.

E-mail: dmitri.alexandrov@urfu.ru