

Высокопроизводительные вычисления в SCAD++ на десктопах и удаленных рабочих станциях

С. Ю. Фиалко

Технический университет
«Краковская политехника»

План

- **PARFES – альтернатива многофронтальному решателю**
- **Декомпозиция разреженной матрицы на блоки**
- **Распараллеливание на многоядерных компьютерах**
- **Векторизация вычислений**
- **Численная реализация**
- **Выводы**

Параметры расчета

Общие параметры PARFES Устойчивость Динамика Элементы Специальные

Режим выполнения расчета

☒ Полный расчет

☐ Продолжение расчета

Метод решения

☐ Метод Гаусса

☐ Многофронтальный метод

☐ Итерационный метод

☒ PARFES

Информация в протоколе выполнения расчета

☐ Учет нагрузок в связях

☐ Сумма моментов всех сил относительно осей общей системы координат

Равномерно-распределенные нагрузки на стержневые элементы

☒ Учитывать заданные нагрузки на жесткие вставки

☐ Не учитывать нагрузки на жесткие вставки

☐ Учитывать нагрузки на жесткие вставки

☐ Вычислять реакции в связях

☒ Автоматический вызов расчетных постпроцессоров после основного расчета

☒ Контроль решения

Точность контроля 10 %

Максимально допустимое количество потоков Автоматич ▼

Использование оперативной памяти [%] 25

Дополнительные действия

OK Отмена Применить Справка

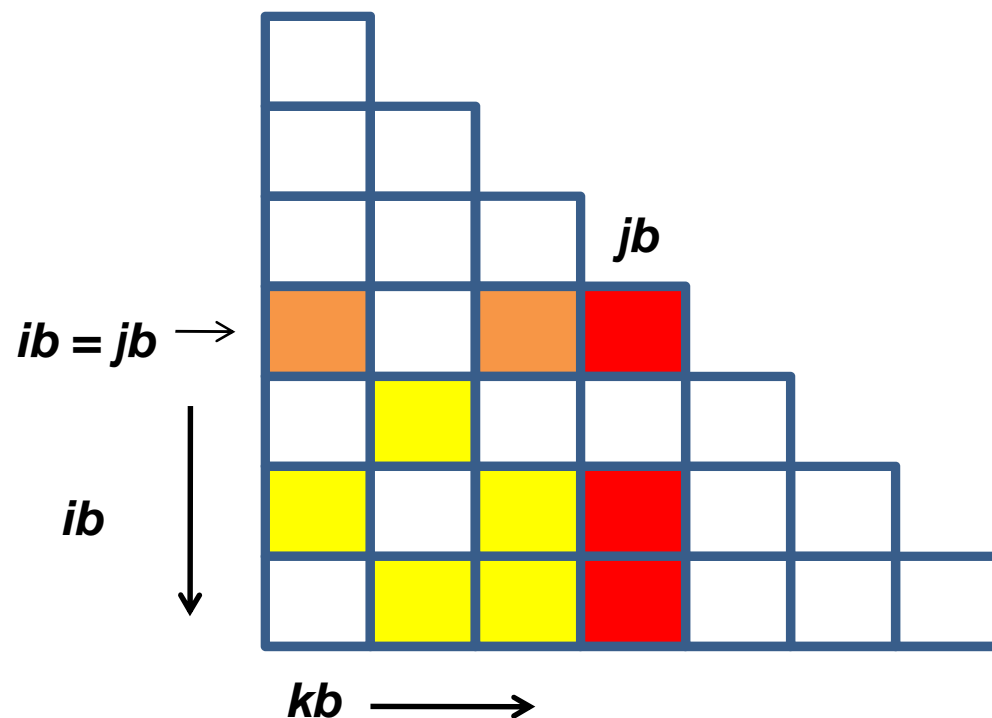
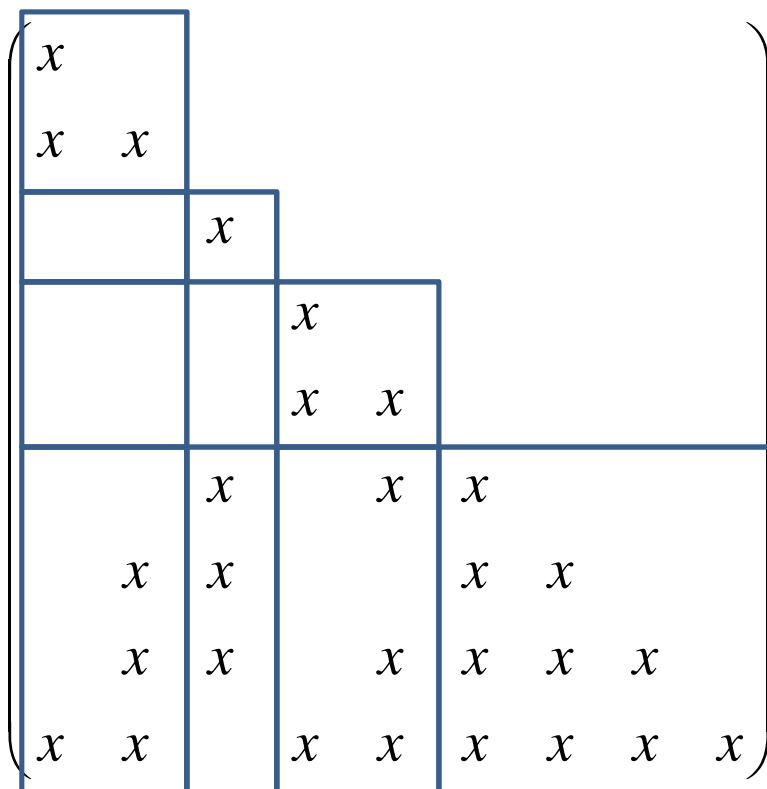
- **PARFES – Parallel Finite Element Solver – прямой параллельный конечно-элементный метод решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при применении МКЭ к задачам строительной механики и механики деформируемого твердого тела.**
- **Многофронтальный метод не позволяет достичь высокой производительности на современных многоядерных компьютерах:**
 - **Избыточное количество пересылок данных память – память и память – диск – память.**
 - **Система памяти оказывается перегруженной, поэтому ускоряемость при увеличении количества ядер процессора ограничена.**

- **PARFES поддерживает три режима.**
- **CM – core mode – режим работы в оперативной памяти. Применим для небольших задач на платформе 32-разрядной и для больших задач на платформе 64-разрядной при наличии достаточного количества оперативной памяти. Достигается максимальная производительность и ускоряемость.**
- **ООС – out of core – режим с подключением диска. Если размерность задачи превышает возможности ОП, подключается диск. Количество обменов с диском минимально, незначительное снижение производительности и ускоряемости по сравнению с CM на этапе разложения матрицы, однако существенное замедление на этапе прямых – обратных подстановок.**

- **OOC1 – out of core 1 – режим с подключением диска. Количество обменов с диском значительно, поэтому происходит деградация производительности и ускоряемости на этапе разложения матрицы и существенное замедление на этапе прямых – обратных подстановок. Однако этот режим позволяет решать большие задачи на компьютерах с малым объемом ОП даже в тех ситуациях, когда многофронтальный метод оказывается беспомощным.**

Высокая производительность достигается за счет:

- Декомпозиции разреженной матрицы жесткости на плотные прямоугольные подматрицы.
- Тогда процедура разложения разреженной матрицы сводится к многократному применению процедуры матричного умножения.



Разложение столбец-по-столбцу:

- Ведущая процедура – умножение вектора на скаляр.
- Невозможно эффективно использовать быструю память кэш. Задание выполняется со скоростью медленной системы памяти, а быстрый процессор простаивает в ожидании загрузки данных из ОП в кэш.

Блочное разложение:

- Ведущая процедура – матричное умножение.
- Позволяет эффективно использовать быструю память кэш. Кроме того, позволяет уменьшить количество загрузок данных из кэш в регистры. Процессор работает в режиме, близком к максимальной производительности.

Высокая производительность достигается за счет:

- **Распараллеливания вычислений. Основная задача – разделить исходные задания на задания меньшей размерности и распределить их между процессорами так, чтобы обеспечить равномерную загрузку последних.**

Высокая производительность достигается за счет:

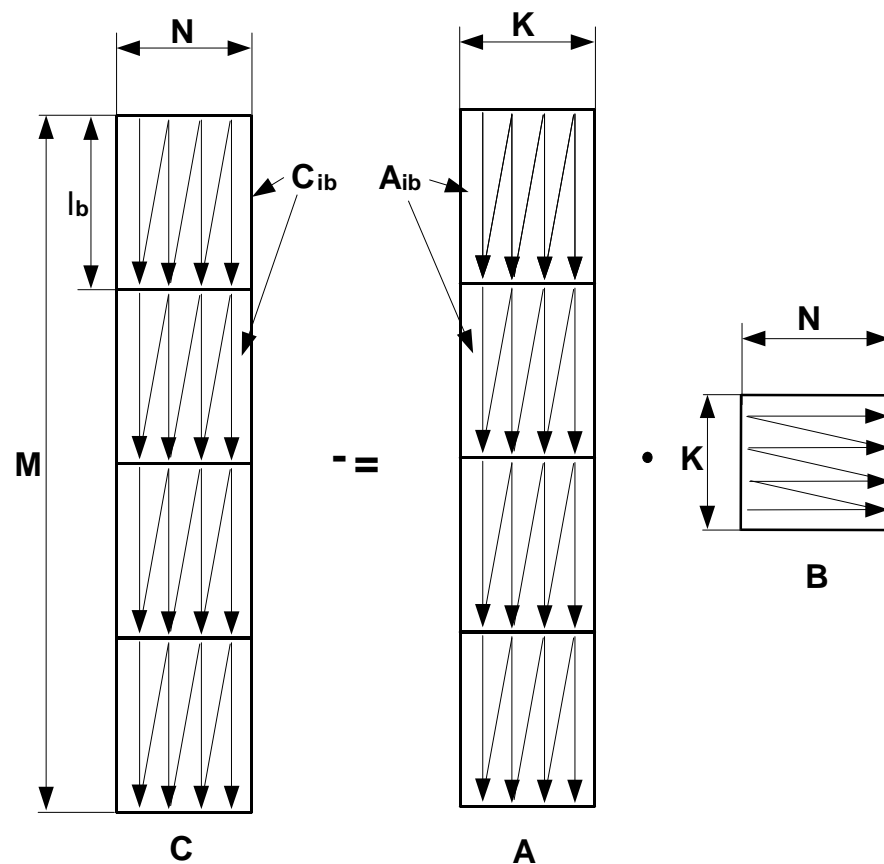
- **Векторизации вычислений на этапе матричного умножения. Реализуется за счет использования специальных XMM регистров, в которых загружается сразу два элемента матрицы и за один такт процессора выполняется два умножения или два сложения. Соответствующий набор команд получил название SSE2.**
- **В процессорах последнего поколения вместо XMM регистров используются YMM регистры, в которые загружаются четыре элемента матрицы. Соответствующий набор команд получил название AVX (Advanced Vector Extensions).**

Проблема:

- Оказалось, что на процессорах AMD Opteron 6276, архитектуры Bulldozer, процедуры матричного умножения dgemm, реализованные в известных библиотеках Intel MKL (Intel Math Kernel Library) и ACML (AMD Core Math Library), не обеспечивает удовлетворительной производительности в алгоритме коррекции блок-столбца, реализованному в PARFES.
- Test 1: $C = C - A * B$ (A, B, C - 8 000 × 8 000 плотные квадратные матрицы).

К-во потоков	1	16
dgemm Intel MKL 11.0	3 958 MFLOPS	35 013 MFLOPS
dgemm ACML 15.2.0	14 203 MFLOPS	94 852 MFLOPS

Test 2: Матрицы A , B , C имеют блочную структуру. ip – номер потока, ib – номер блока. **Test 2 моделирует процедуру коррекции блок-столбца, реализованную в PARFES.**



Алгоритм:

```
#pragma omp parallel for
for(ib=0; ib<Nb; ++ib)
{
     $C_{ib} = C_{ib} - A_{ib} \cdot B;$ 
}
```

Производительность (MFLOPS) алгоритма $C = C - A \cdot B$ для матриц $M \times N \times K = 2\,000\,000 \times 120 \times 120$ (A – матрица $M \times K$, B – $K \times N$, C – $M \times N$)

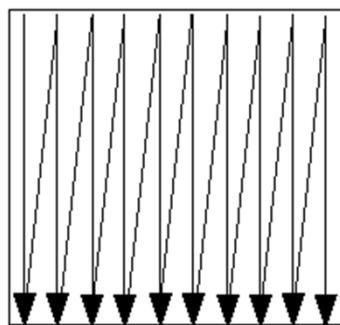
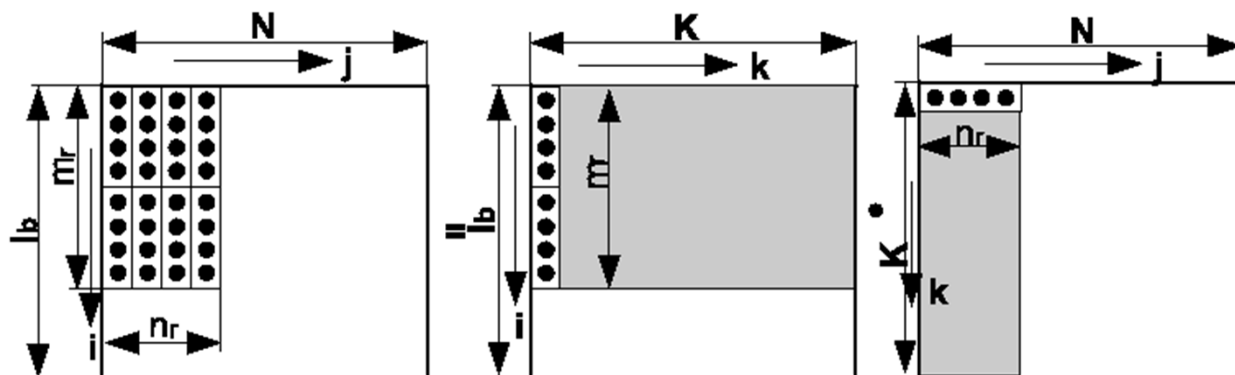
Процедура	1 поток	16 потоков
dgemm MKL 11.0	2 377	24 945
dgemm ACML 15.2.0	6 837	41 469 / 10 061

- (**41 469** MFLOPS) – многопоточная версия процедуры *dgemm*, используемая для оценки максимальной производительности процессора AMD Opteron 6276 для данного теста, поскольку процедуры из библиотеки ACML наиболее адаптированы для процессоров AMD. Распараллеливание осуществляется внутри процедуры *dgemm*.
- (**10 061** MFLOPS) – однопоточная версия процедуры *dgemm*. При этом распараллеливание осуществляется именно так, как того требует алгоритм PARFES.

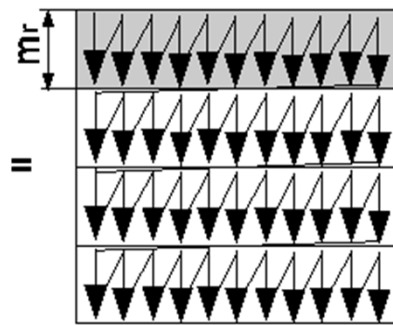
Как справиться с этой проблемой?

- a) Ожидать, пока Intel (или AMD) поправят dgemm в своих библиотеках. (Ох, вряд ли дождемся!)
- b) Разработать свою собственную процедуру матричного умножения, которая демонстрировала бы высокую производительность как на процессорах AMD, так и на процессорах Intel, работая в режиме, требуемом алгоритмом PARFES.
- Процедура microkern_8x4_AVX: $C_{ib} = \text{beta} \cdot C_{ib} + \text{alpha} \cdot A_{ib} \cdot B$

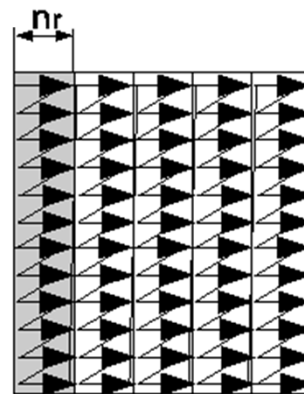
Microkern_8x4_AVX: схема блокирования регистров и переупаковки данных.



C_{ib}



AA



BB

$AA = \text{repack}(A_{ib})$

$BB = \text{repack}(B)$

- В отличие от наивного алгоритма здесь во внутреннем цикле умножается горизонтальная панель блока AA на вертикальную панель блока BB.

Численные результаты.

Компьютеры:

- 1. 16-core AMD Opteron 6276 CPU 2.3/3.2 GHz processor, 64 GB DDR3 RAM.**
- 2. 4-core Intel i7 2760QM CPU 2.4/3.5 GHz processor, 8 GB DDR3 RAM.**

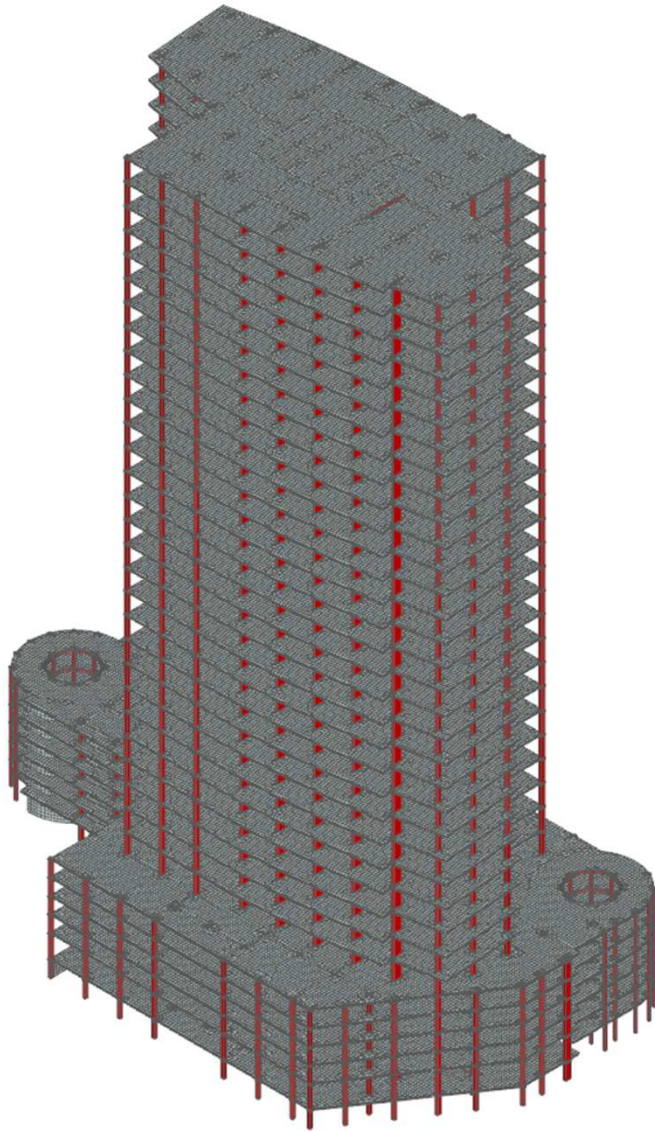
Численные результаты.

A. Test 2.

Производительность (MFLOPS) алгоритма $C = C - A \cdot B$
для матриц $M \times N \times K = 2\,000\,000 \times 120 \times 120$ (A –
матрица $M \times K$, B – $K \times N$, C – $M \times N$)

Процедура	AMD Opteron 6276 CPU 2.3/3.2 GHz		Intel i7 2760QM CPU 2.4/3.5 GHz	
	1 поток	16 потоков	1 поток	4 потока
dgemm MKL 11.0	2 377	24 945	17 921	40 563
dgemm ACML 15.2.0	6 837	41 469 / 10 061	–	–
microkern_8x4_AVX	6 373	50 571	17 582	41 025

Численные результаты.



Пример 1.

2 546 400 уравнений

8.4 Гб - разложенная матрица жесткости.

Численные результаты.

Пример 1. Продолжительность (s) и производительность (MFLOPS) PARFES на этапе разложения матрицы:

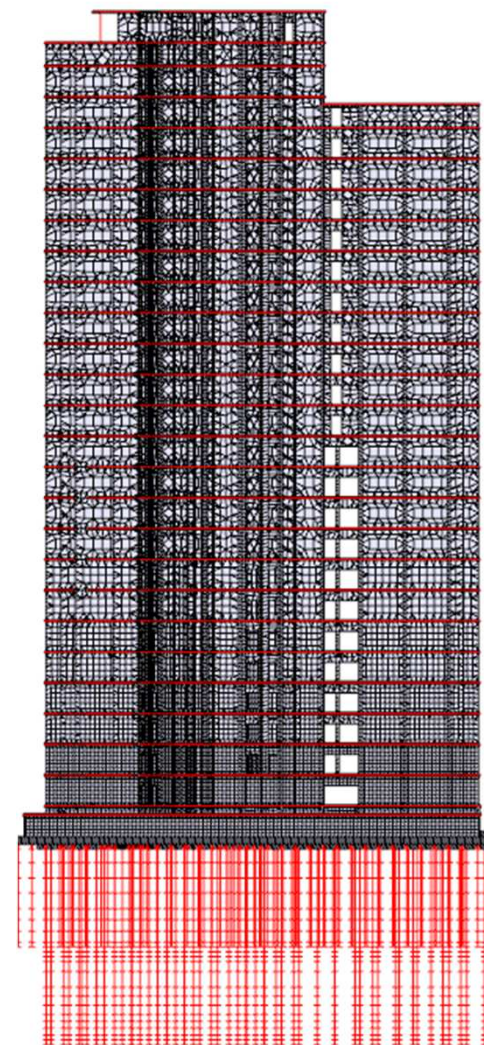
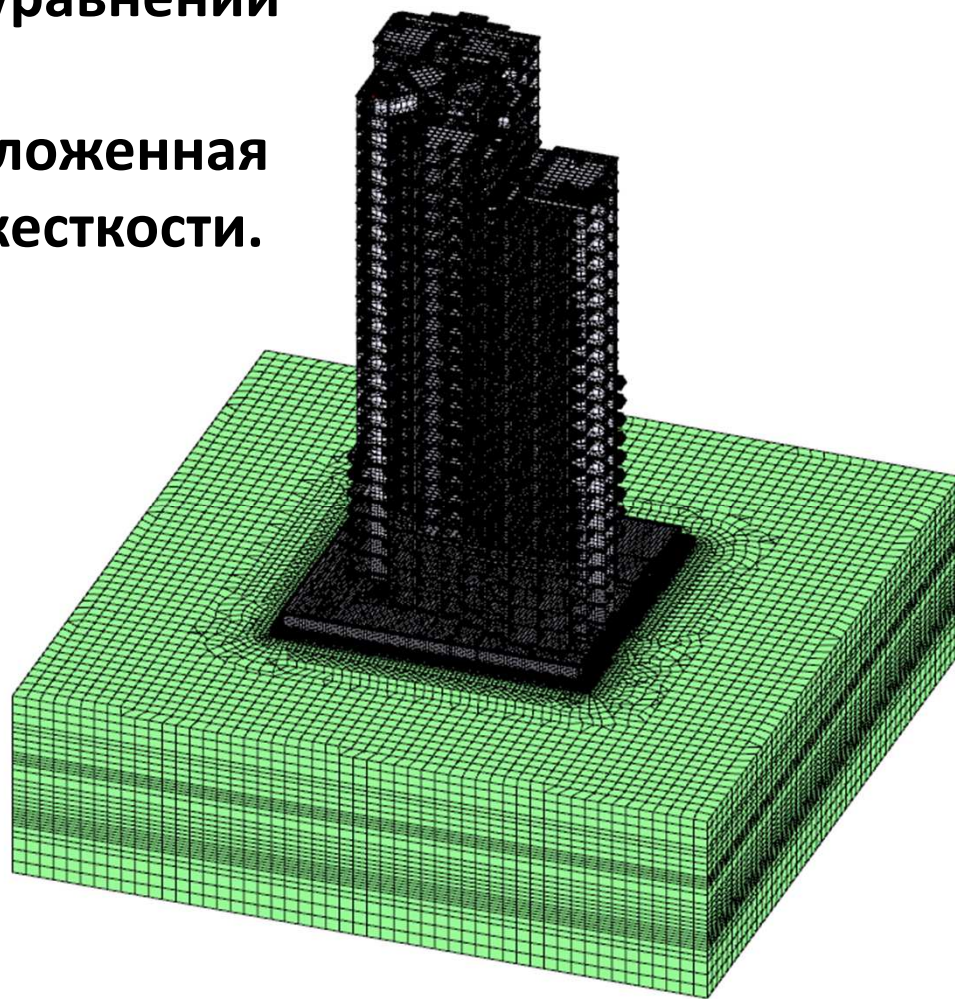
Procedure	AMD Opteron 6276 CPU 2.3/3.2 GHz CM				Intel i7 2760QM CPU 2.4/3.5 GHz OOC			
	1 поток		16 потоков		1 поток		4 потоков	
	Время	Произв.	Время	Произв.	Время	Произв.	Время	Произв.
dgemm MKL 11.0	1 139	3 619	160	25 789	330	12 554	191	21 787
dgemm ACML 15.2.0	718	5 743	542	7 628	—	—	—	—
microkern_8x4_ AVX	753	5 477	118	34 843	294	14 196	157	27 649

Численные результаты.

Пример 2.

2 989 476 уравнений

**37 Гб - разложенная
матрица жесткости.**



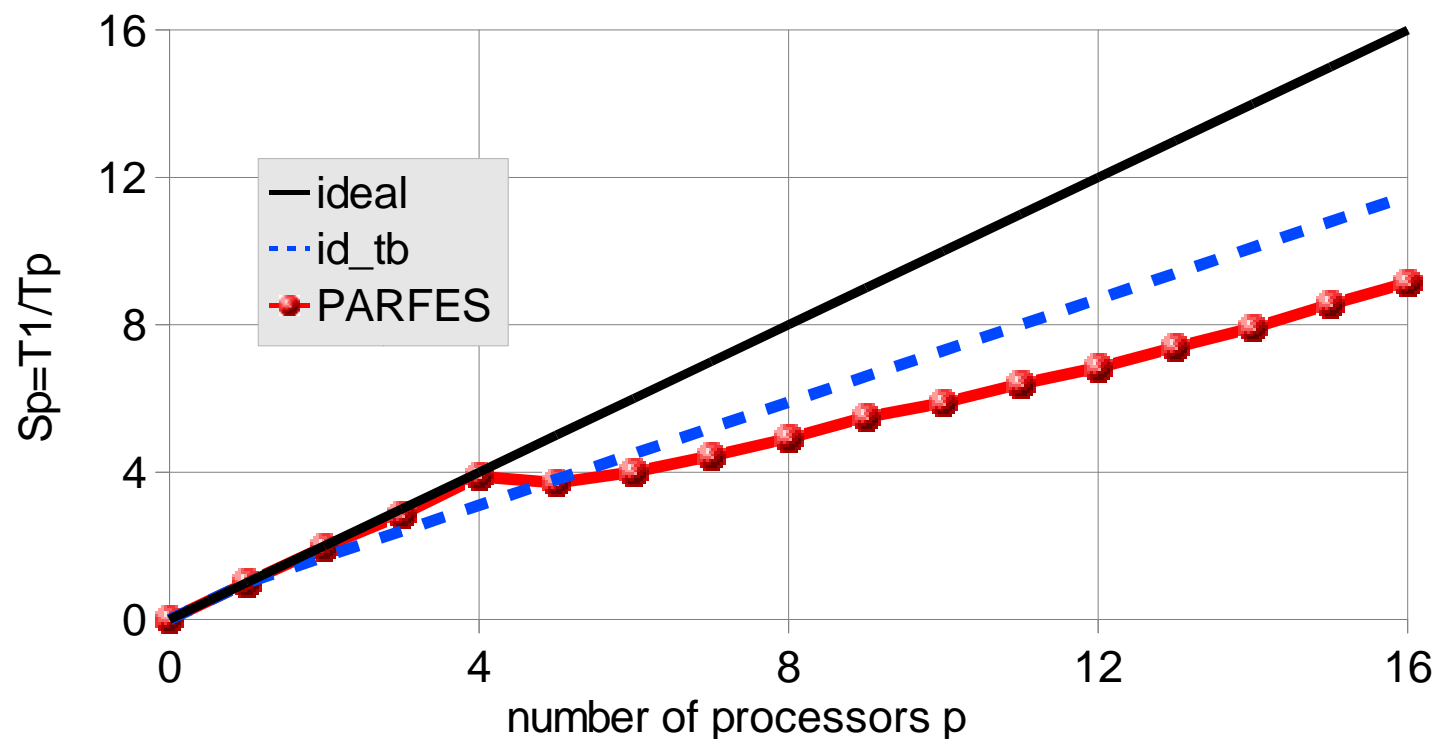
Численные результаты.

Пример 2. Продолжительность (s) и производительность (MFLOPS) PARFES на этапе разложения матрицы. Компьютер с процессором AMD Opteron 6276 , 64 Гб ОП, СМ.

Процедура	1 поток		16 потоков	
	Время	Производ.	Время	Производ.
dgemm MKL 11.0	18 992	3 138	2 123	28 068
dgemm ACML 15.2.0	12 871	4 630	10 897	5 476
microkern_8x4_AVX	13 541	4 400	1 481	40 216

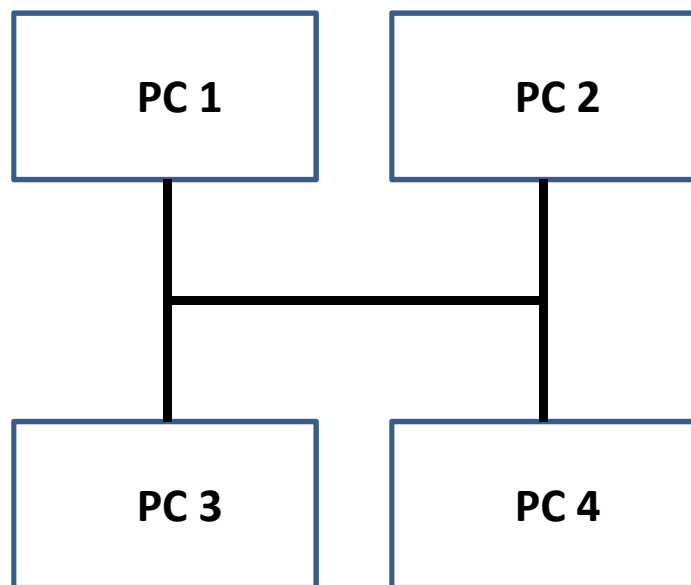
Численные результаты.

Пример 2. Ускоряемость вычислений при увеличении к-ва потоков. **Ideal** – идеальная ускоряемость, **id_tb** – идеальная ускоряемость с учетом режима turbo core (3.2 GHz / 2.3 GHz), **PARFES** – реальная ускоряемость.

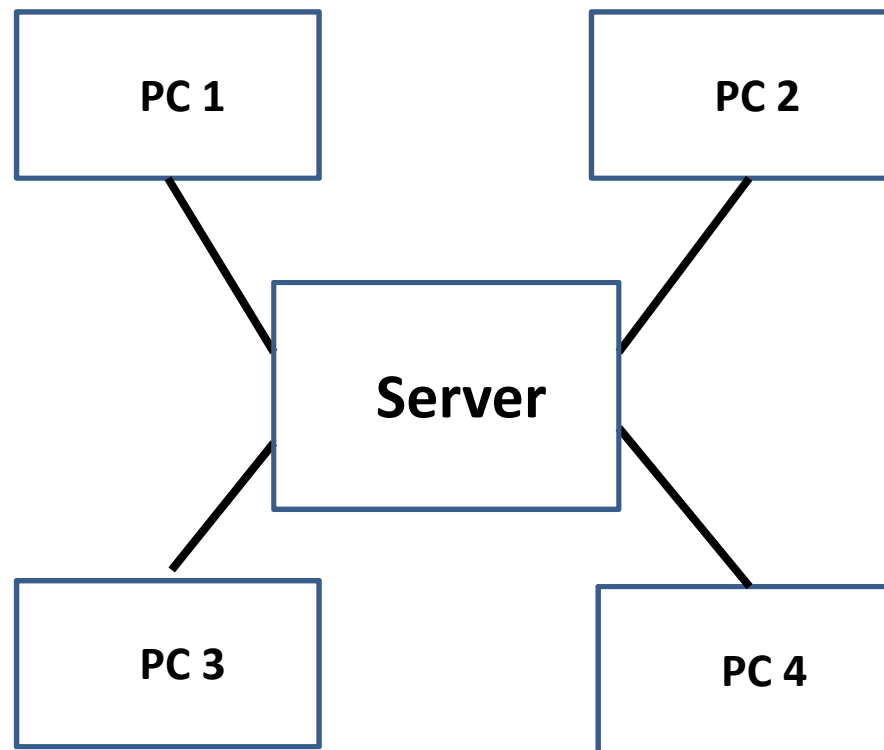


Численные результаты.

Пример 3. Одновременные вычисления на удаленном сервере.



Каждый проектировщик выполняет расчеты на своем индивидуальном компьютере



Для решения больших задач используется вычислительный сервер.

Численные результаты.

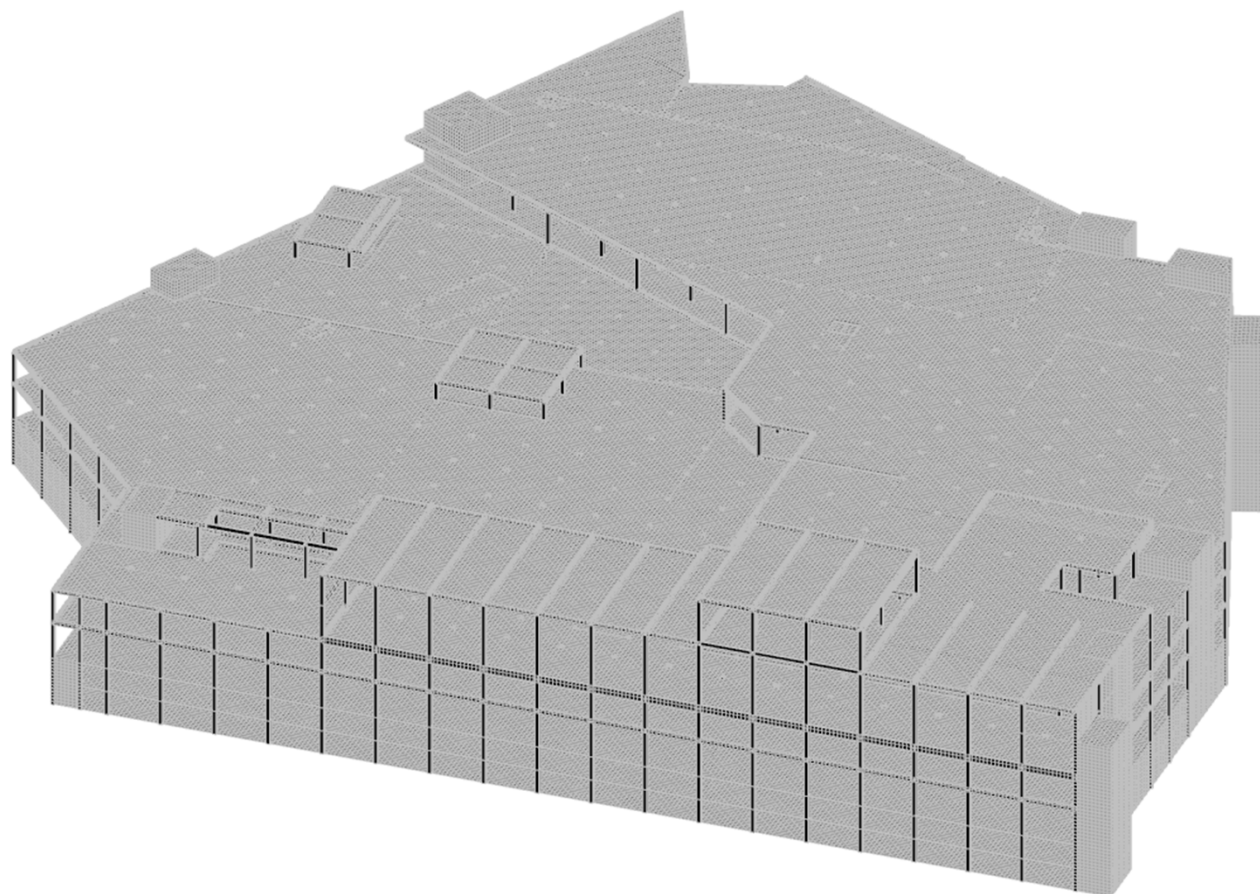
Пример 3. Одновременные вычисления на удаленном сервере.

- **Взято 4 больших задачи из коллекции SCAD Soft.**
- **Рассматривались наиболее типичные виды анализа – линейная статика и определение 20 собственных частот и форм колебаний блочным методом Ланцоша.**
- **Сначала эти задачи последовательно решались на «среднем» индивидуальном компьютере с 4-ядерным процессором Intel i7 2760QM CPU 2.4/3.5 GHz, 8 GB DDR3 RAM.**
- **Затем эти задачи одновременно были запущены на вычислительном сервере – компьютере с 16-ядерным процессором 16-core AMD Opteron 6276 CPU 2.3/3.2 GHz, 64 GB DDR3 RAM.**

**Задача 1. Торгово-развлекательный комплекс ТРК.
2 442 846 уравнений, 10.42 Гб – факторизованная матрица.**

**ПК:
17 880 с, 4 потока, ООС.**

**Сервер:
4 680 с, 4 потока, СМ**



Задача 2. Многоэтажный дом.

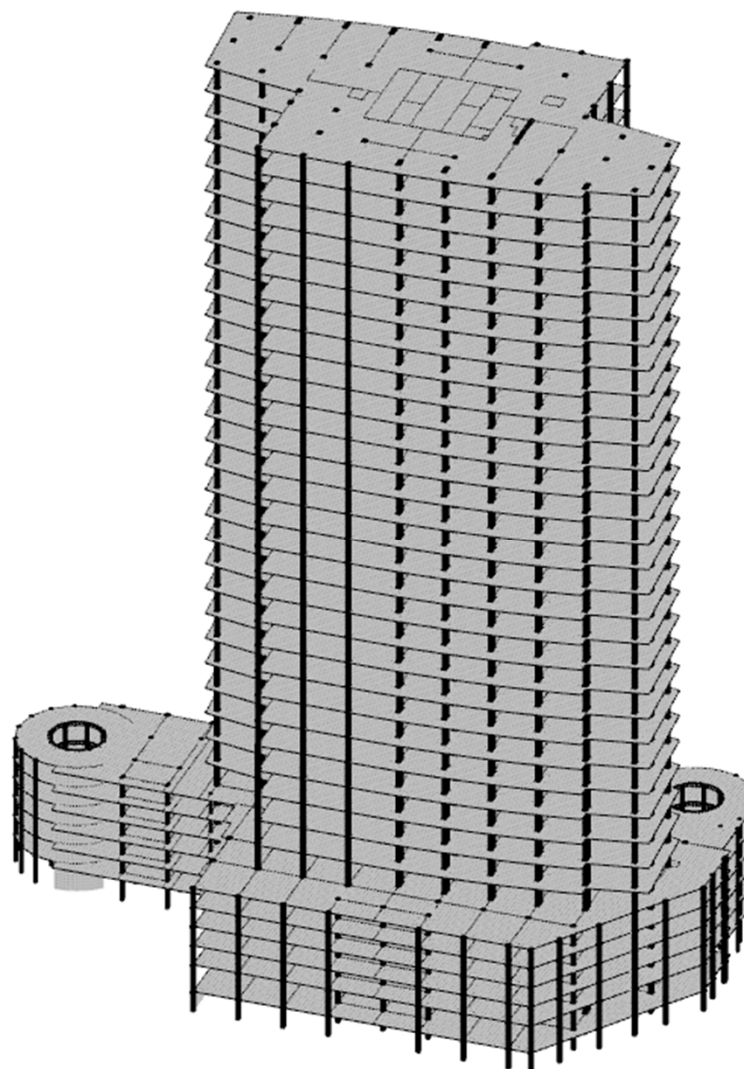
2 546 400 уравнений, 8.41 Гб – факторизованная матрица.

ПК:

7 769 с, 4 потока, ООС

Сервер:

3 720 с, 4 потока, СМ



Задача 3. Многоэтажный дом.

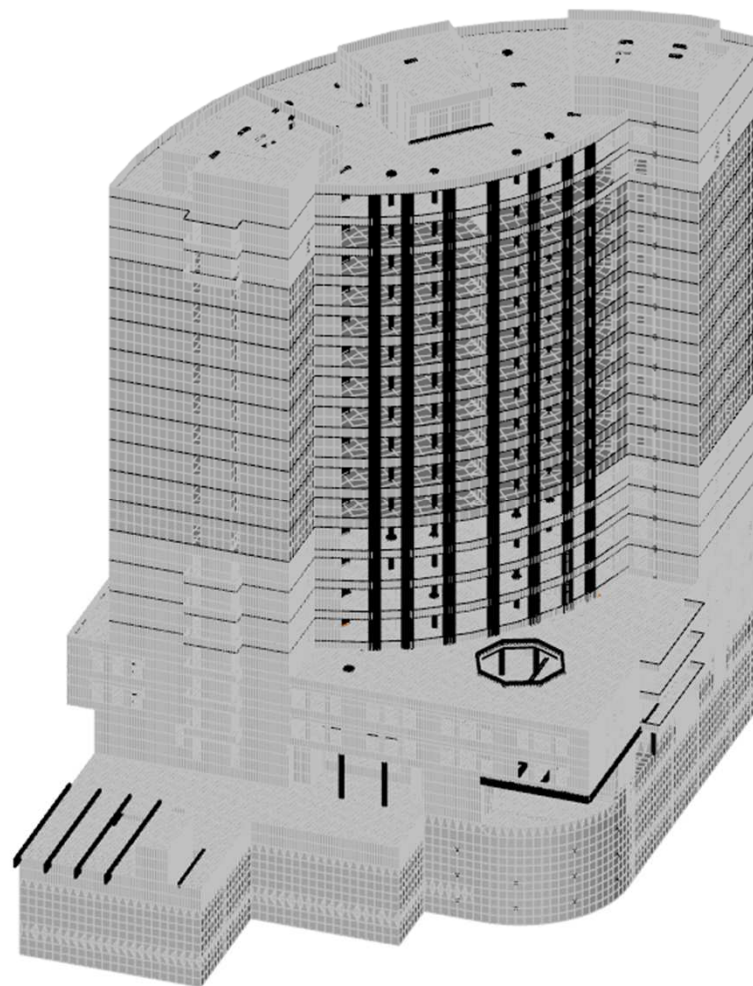
2 002 428 уравнений, 8.49 Гб – факторизованная матрица.

ПК:

13 707 с, 4 потока, ООС

Сервер:

4 140 с, 4 потока, СМ



Задача 4. Многоэтажный дом.

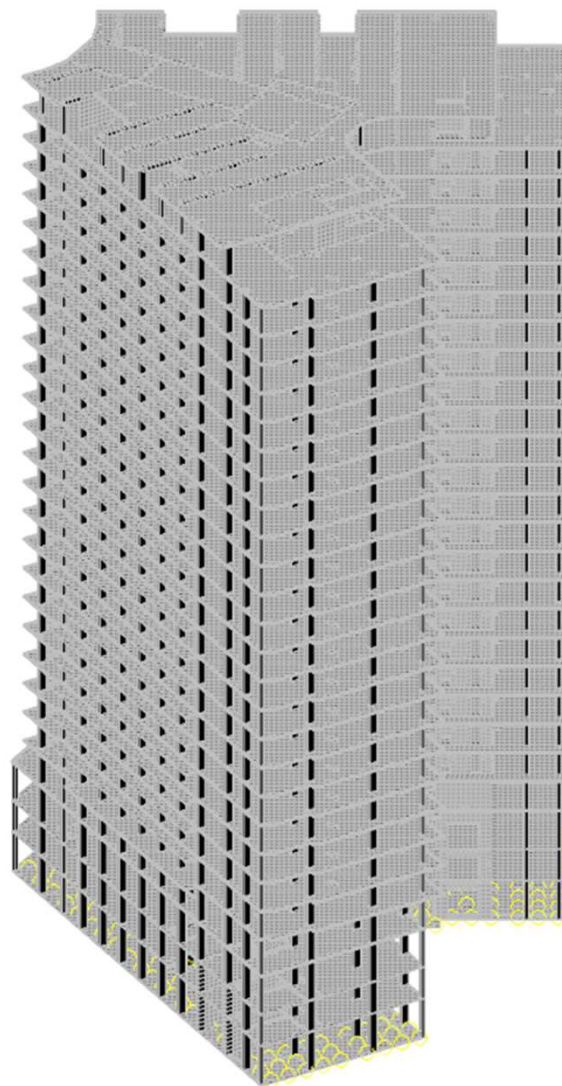
1 514 991 уравнений, 4.56 Гб – факторизованная матрица.

ПК:

6 462 с, 4 потока, ООС

Сервер:

2 520 с, 4 потока, СМ



Численные результаты.

- **Время загрузки сервера:** **4 680 с = 1 ч 18 мин .**
 - **Наибольшая продолжительность решения на ПК:** **17 880 с = 4 ч 58 мин.**
 - **Суммарное время загрузки ПК:** **12 ч 44 мин.**
-
- **Стоимость одного ПК:** **5 000 PLN** **1 587 \$ USA**
 - **Стоимость сервера:** **17 000 PLN** **5 397 \$ USA**

Численные результаты.

- **Дополнительные преимущества сервера:**
 - **Очень большие задачи полностью считаются в ОП.**
Например, задача «пример 2» 2 989 356 уравнений, 37 Гб – размер факторизованной матрицы, упорядочение METIS, линейная статика + 20 пар – 4 320 s = 72 min. На «среднем» десктопе время ее решения – астрономическое, т. к. реализуется режим OOC1 PARFES.
 - **При решении больших задач индивидуальный компьютер свободен, что позволяет каждому проектировщику заняться другой работой.**
 - **При решении задачи в режиме монтажа, при решении нелинейных задач, а также при модальном & сейсмическом анализе решающее значение имеет объем ОП. Если задача целиком проходит в ОП, PARFES обеспечит быстрое ее решение.**

Литература:

- 1. Fialko S., PARFES: A method for solving finite element linear equations on multi-core computers, Advances in Engineering software 40(12) (2010) 1256 – 1265.**
- 2. Fialko S. Parallel Finite Element Solver for Multi-Core Computers. Federated Conference on Computer Science and Information Systems, September 9–12, 2012. Wrocław, Poland. IEEE Xplore Digital Library, 978-83-60810-51-4, IEEE Catalog Number CFP1285N-USB. P. 1 – 8. URL: <http://fedcsis.org/proceedings/fedcsis2012/pliks/101.pdf> .**
- 3. Fialko S. Application of AVX (Advanced Vector Extensions) for Improved Performance of the PARFES – Finite Element Parallel Direct Solver. Federated Conference on Computer Science and Information Systems, September 9–11, 2013. Kraków, Poland. IEEE Xplore Digital Library, to be published.**

Благодарю за внимание !