



 Ural Federal
University



The Effect of Data Structuring on the Parallel Efficiency of the HydroBox3D Relativistic Code

И.М. Куликов, И.Г. Черных (ИВМиМГ СО РАН)

Е.Н. Акимова, В.Е. Мислов (ИММ УрО РАН, УрФУ)

25 сентября 2023 года

Москва

Вселенная – гидродинамика высоких энергий со множеством взаимодействий



Методы решения уравнений гидродинамики

Гидродинамические модели

HD

MHD

SRHD

SRMHD

Dust



Схемы решения задачи Римана

Годунов

Рое

HLLE/C/D

Русанов

Матрица
вязкости



Кусочно-полиномиальные реконструкции

Схема Колгана

Параболическая

Кубическая

Методы решения уравнений гидродинамики

Гидродинамические модели

HD

MHD

SRHD

SRMHD

Dust

Схемы решения задачи Римана

Годунов

Рое

HLLE/C/D

Русанов

Матрица
вязкости

Кусочно-полиномиальные реконструкции

Схема Колгана

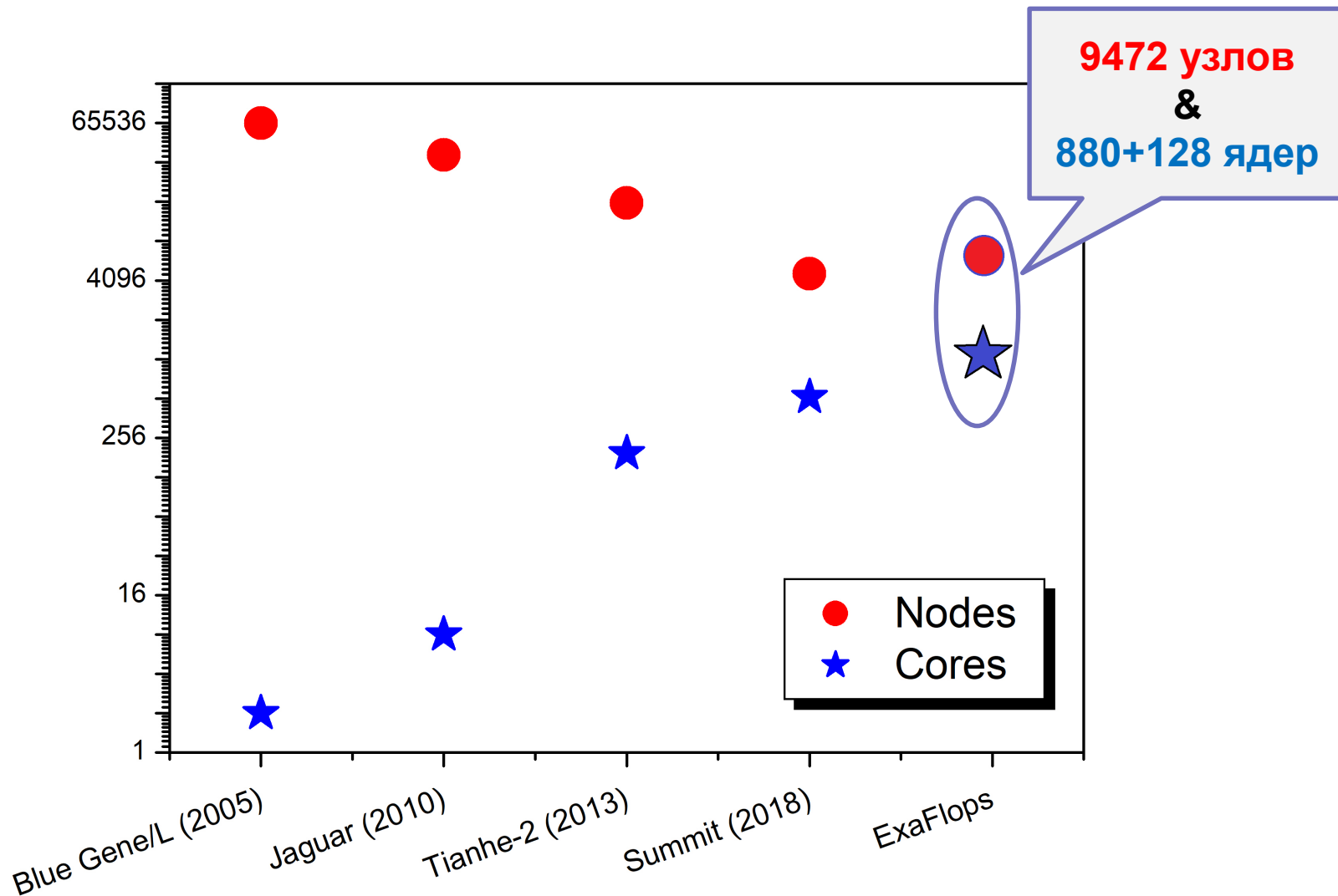
Параболическая

Кубическая

Топ 10 (июнь, 2023)

1. Frontier - AMD 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, HPE
2. Supercomputer Fugaku - A64FX 48C 2.2GHz, Fujitsu
3. LUMI - AMD 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, HPE
4. Leonardo - Intel Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100, Atos
5. Summit - IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, IBM
6. Sierra - IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, IBM/NVIDIA
7. Sunway TaihuLight - Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway
8. Perlmutter - AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100, HPE
9. Selene - AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, NVIDIA
10. Tianhe-2A - Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, Matrix-2000, Inspur

Архитектура суперЭВМ



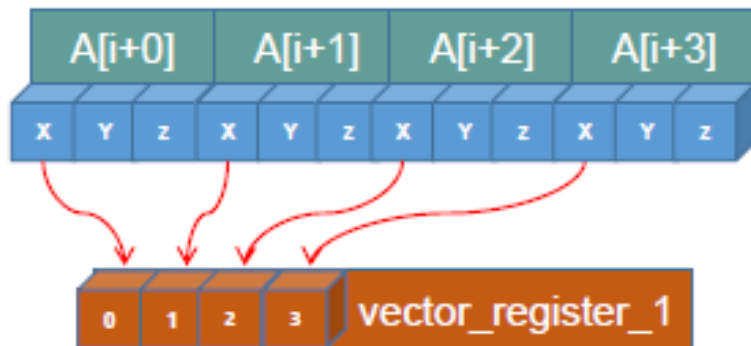
Стратегия разработки кодов

- Оптимизация работы с кэшем
- Векторизация вычислений
- Расширение OpenMP на GPU
- Минимум процессов
- Максимум потоков в процессе
- Коды уровня “**language only**”

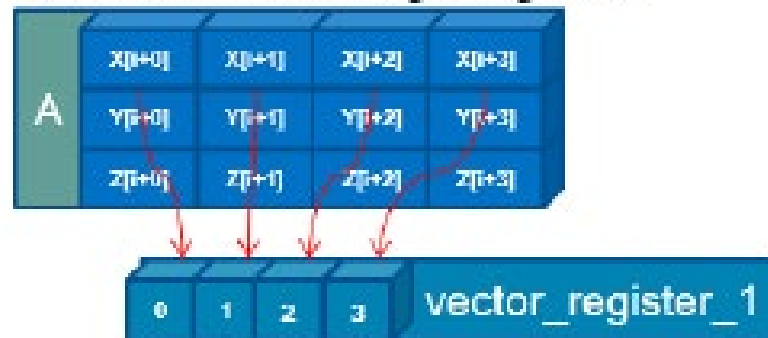
Оптимизация кода с помощью Intel SDLT library

- ❑ Векторизация вычислений
- ❑ Многомерные контейнеры
- ❑ Array of Structures vs Structure of Arrays
- ❑ Автоматическое выравнивание данных
- ❑ Независимые итерации циклов
- ❑ Развертка циклов

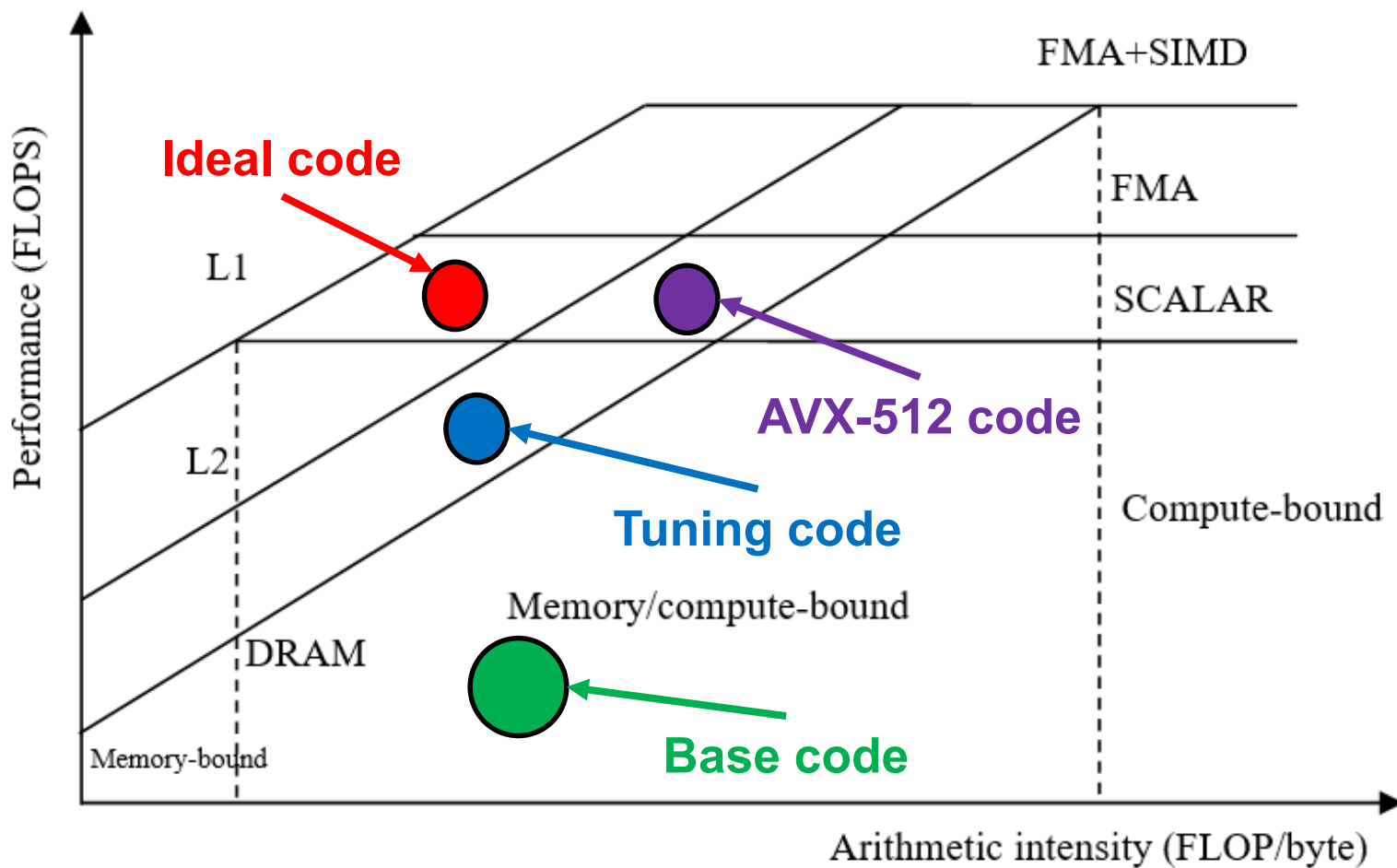
AOS in Memory Layout



SOA in Memory Layout



Анализ производительности



Круглый стол в Абрау-Дюрсо 2010

CUDA мы катимся? Есть ли жизнь вне MPI?



От CUDA к OpenMP

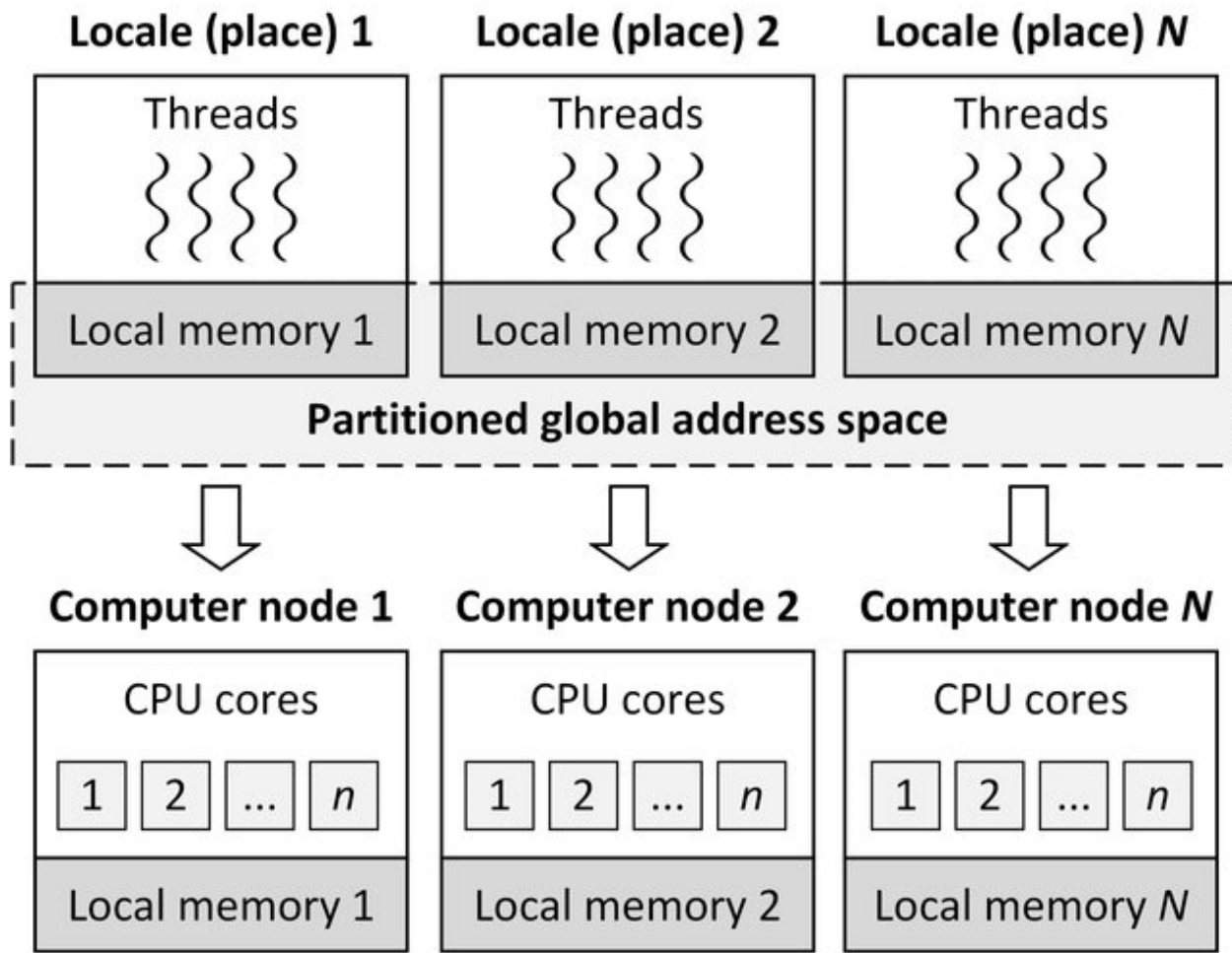
```
#pragma omp target parallel for reduction(+:dot) map(to: a,b)
for (int i = 0; i < N; i++)
    dot = dot + a[i] * b[i];
```

AstroPhi код для Intel Xeon Phi

```
#pragma offload target (mic) in(a:length(N), b:length(N))
{
    #pragma omp parallel for reduction(+:dot)
    for (int i = 0; i < N; i++)
        dot = dot + a[i] * b[i];
}
```

Kulikov I.M., Chernykh I.G., Snytnikov A.V., Glinskiy B.M., Tutukov A.V.
AstroPhi: A code for complex simulation of dynamics of astrophysical
objects using hybrid supercomputers // **Computer Physics
Communications.** - 2015. - V. 186. - P. 71-80.

Partitioned Global Address Space



Реализация PGAS

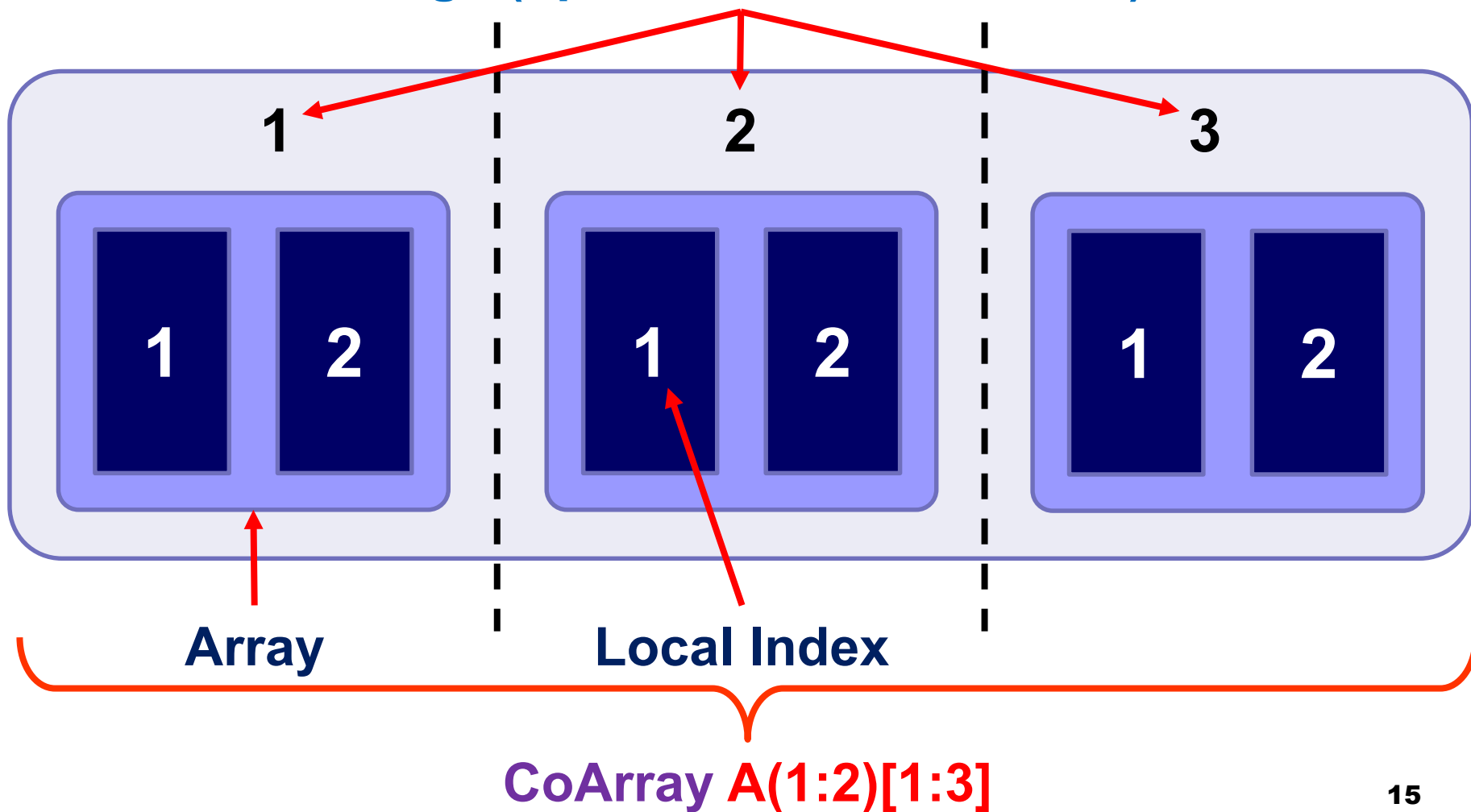
- Coarray Fortran (**стандарт Фортран 2008**)
- Unified Parallel C (диалект стандарта ISO C)
- Chapel (параллельный язык Cray)
- X10 (параллельный язык IBM)
- Fortress (параллельный язык Sun)
- UPC++ (библиотека шаблонов)
 - Remote Memory Access
 - Remote Procedure Call
- Global Arrays (библиотека)

Обзор использования Coarray Fortran

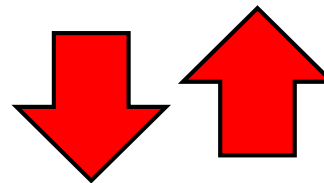
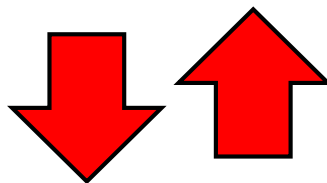
- **Reshetova, Cheverda & Khachkova, LNCS 2019**
 - CAF имеет не хуже производительность MPI и MPI+OpenMP при большом числе процессов
- **Reshetova, Cheverda & Khachkova, CCIS 2019**
 - CAF значительно проще в использовании, чем технология MPI в различных вариантах коммуникаций
- **Reshetova, Cheverda & Koinov, CCIS 2022**
 - CAF не хуже по производительности сочетания функций MPI_Isend/MPI_Irecv
- **Garain, Balsara & Reid, JCompPhys 2015**
 - CAF эквивалентна по производительности MPI 3.0
- **Shterenlikht & Cebamanos, Parallel Computing 2019**
 - Масштабируемость до 100 000 процессов

Распределенные массивы в Фортран

Codimension
Image (процесс с копией кода)



Использование Coarray Fortran

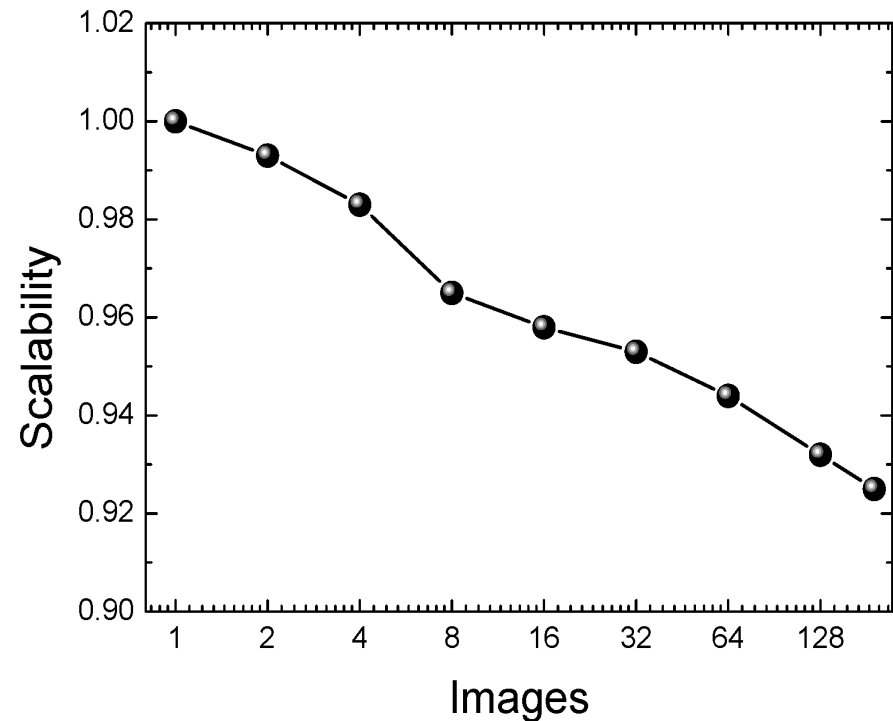
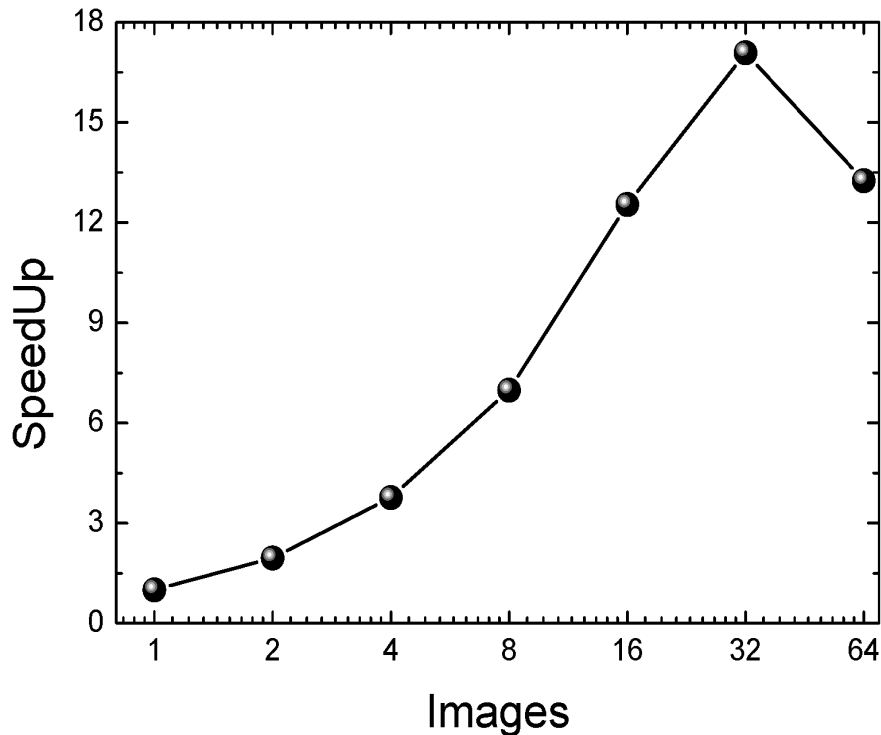


```
irank = this_image()  
isize = num_images()
```

```
if(irank < isize) then  
  A(1)[irank+1] = A(Nlocal+1)  
  A(Nlocal+2) = A(2)[irank+1]  
endif
```

```
sync all
```


Сильная и слабая масштабируемость



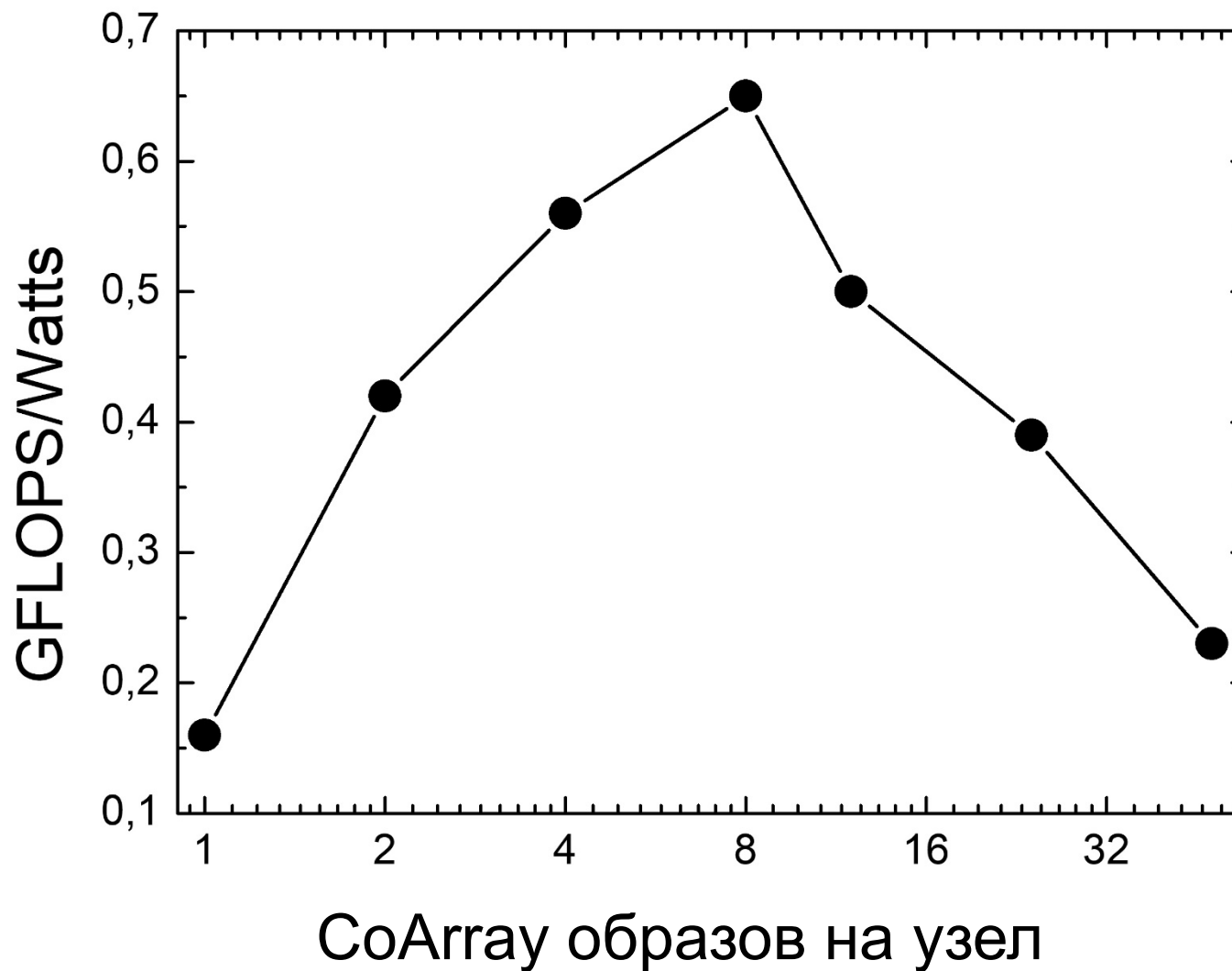
Эффективность 3D параллельного кода:

92% CAF

VS.

92% MPI

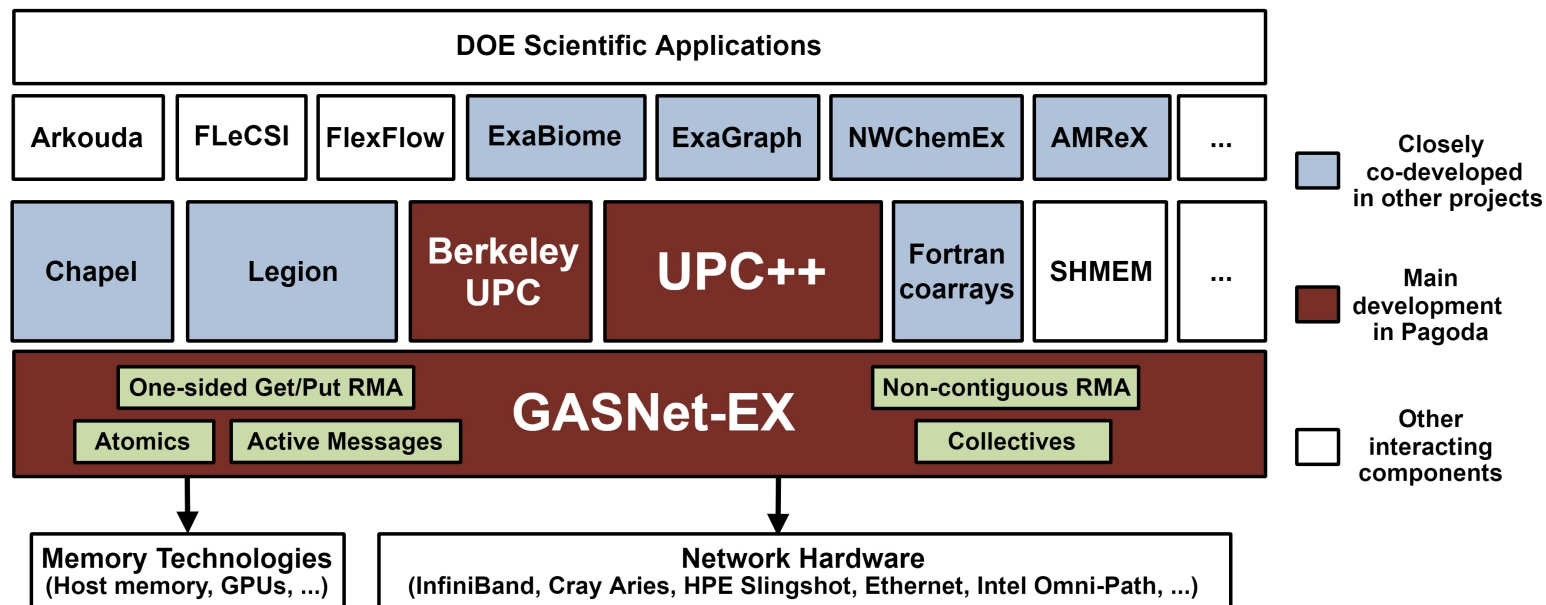
Углеродный след



А ушли ли мы от MPI?

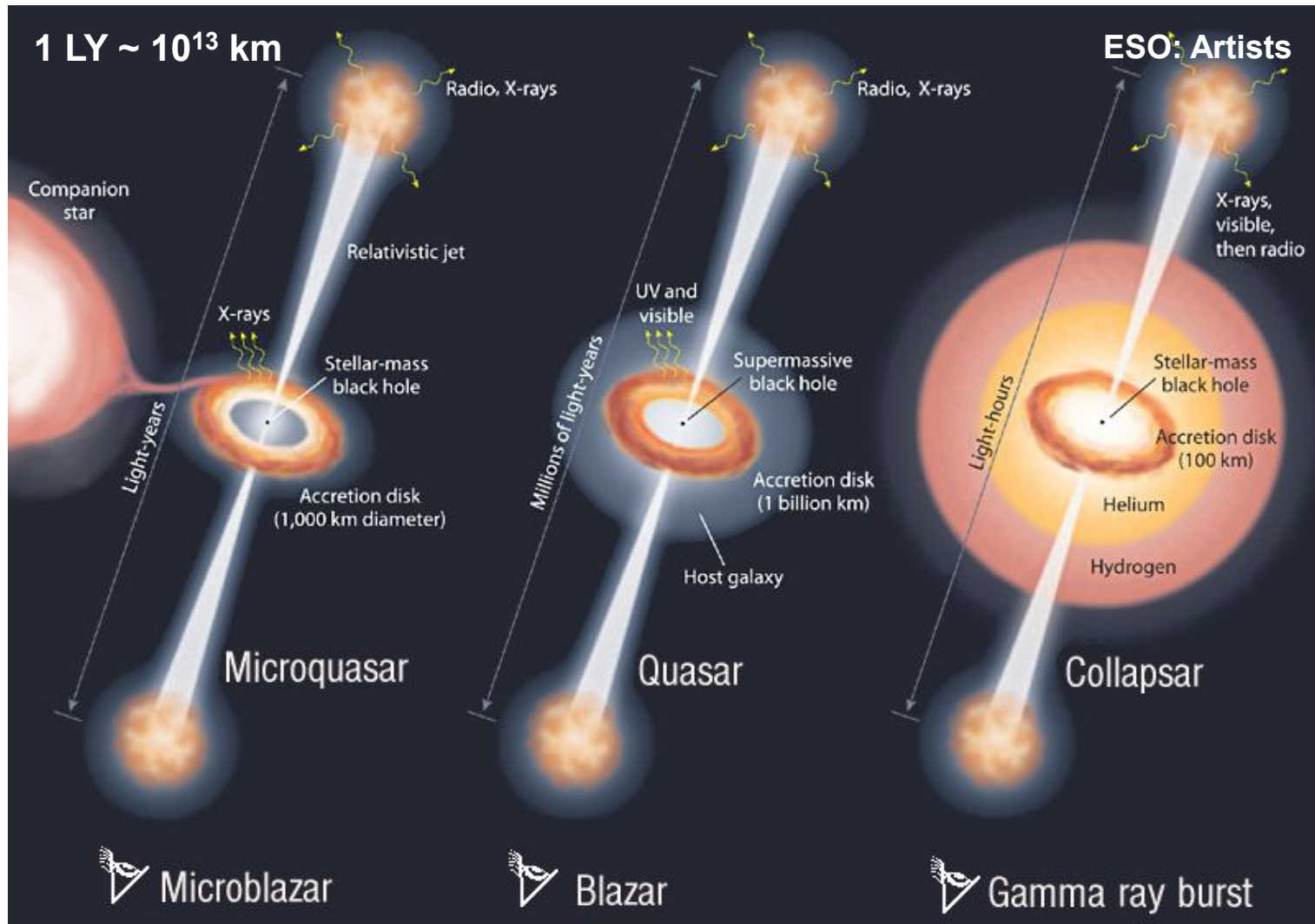
В компиляторе Intel используются технологии MPI 3.0 для реализации Coarray Fortran операций, но в части компиляторов GNU Fortran и OpenUH используется технология GASNet

Технология GASNet как альтернатива MPI

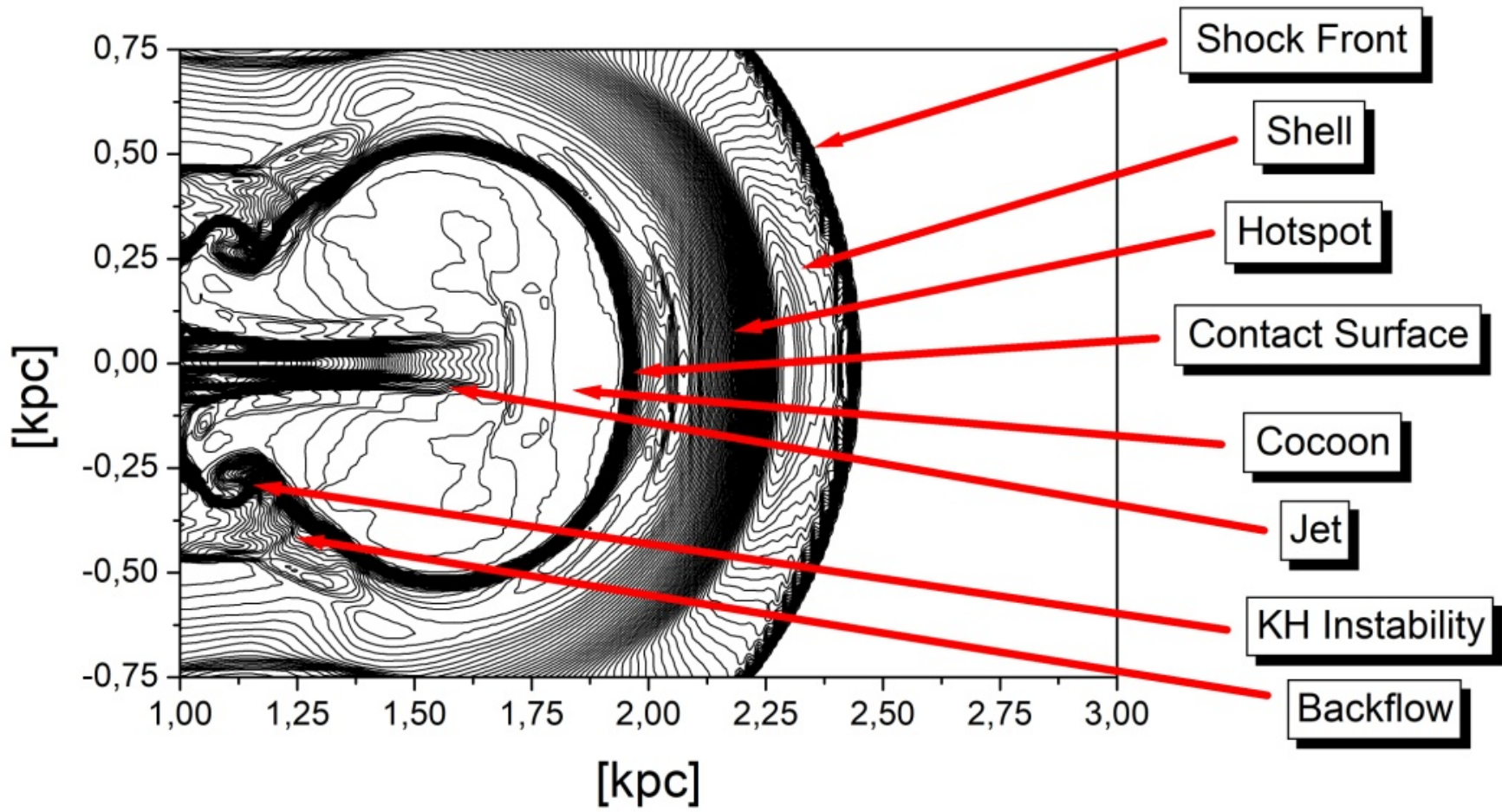


Формирование релятивистских джетов

Igor Felix Mirabel (IAFE, Аргентина; Saclay, Франция)
 Edouard Audit (Saclay, Франция)

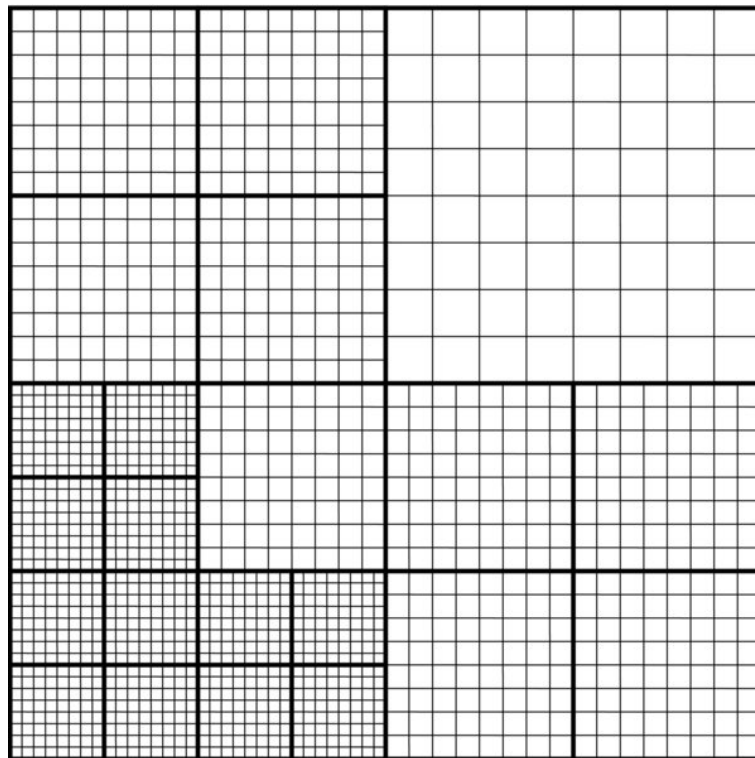


Эволюция релятивистских джетов

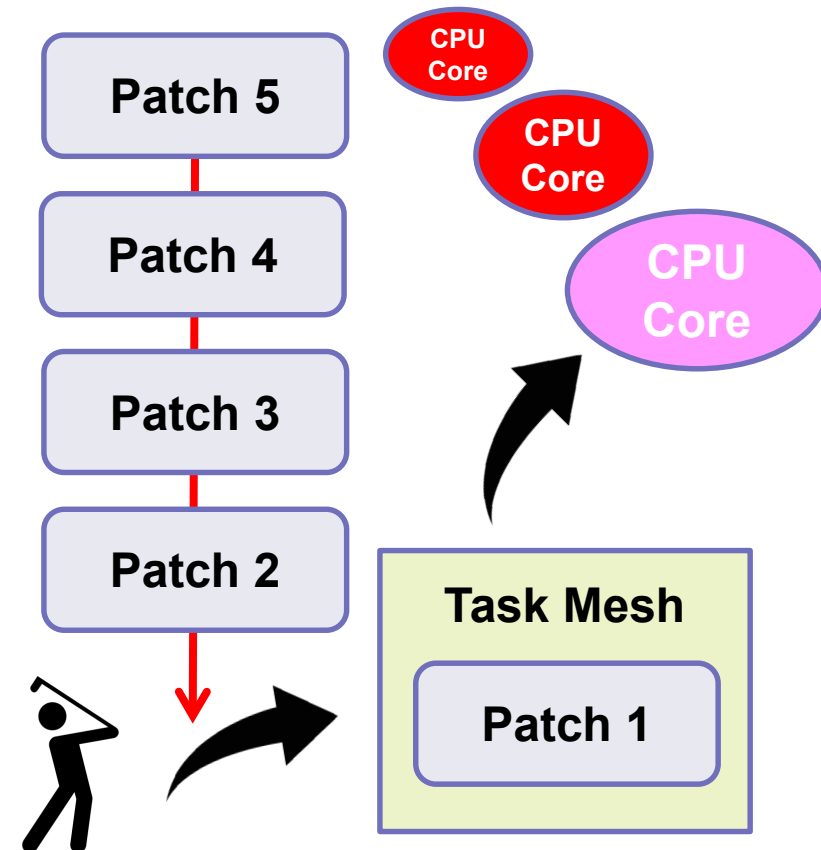


Адаптивные сетки (Adaptive Mesh Refinement)

Patch-Block-Structured
Adaptive-Mesh-Refinement
Relativistic Hydrodynamics



Task-Based
Execution Model

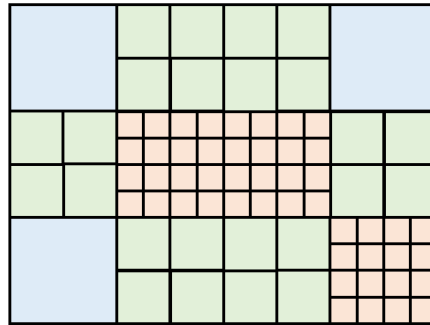
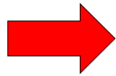


Адаптивные сетки

Логическая структура адаптивных сеток

1	2	2	1
2	4	4	2
1	2	2	4

The Plan of Mesh

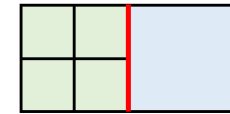


The Mesh Configuration

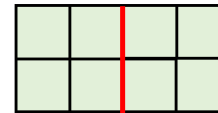
(1) Boundary Condition



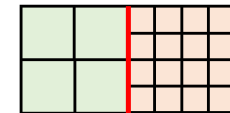
(3) Big Micro Mesh



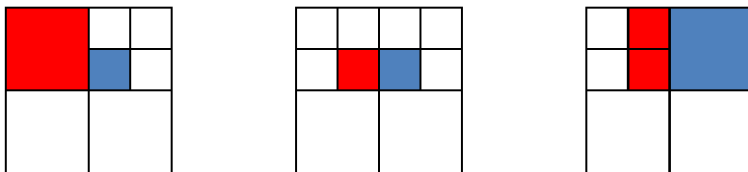
(2) Equal Micro Mesh



(4) Small Micro Mesh

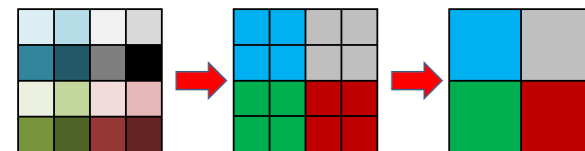
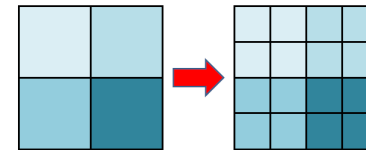


Решение задачи Римана

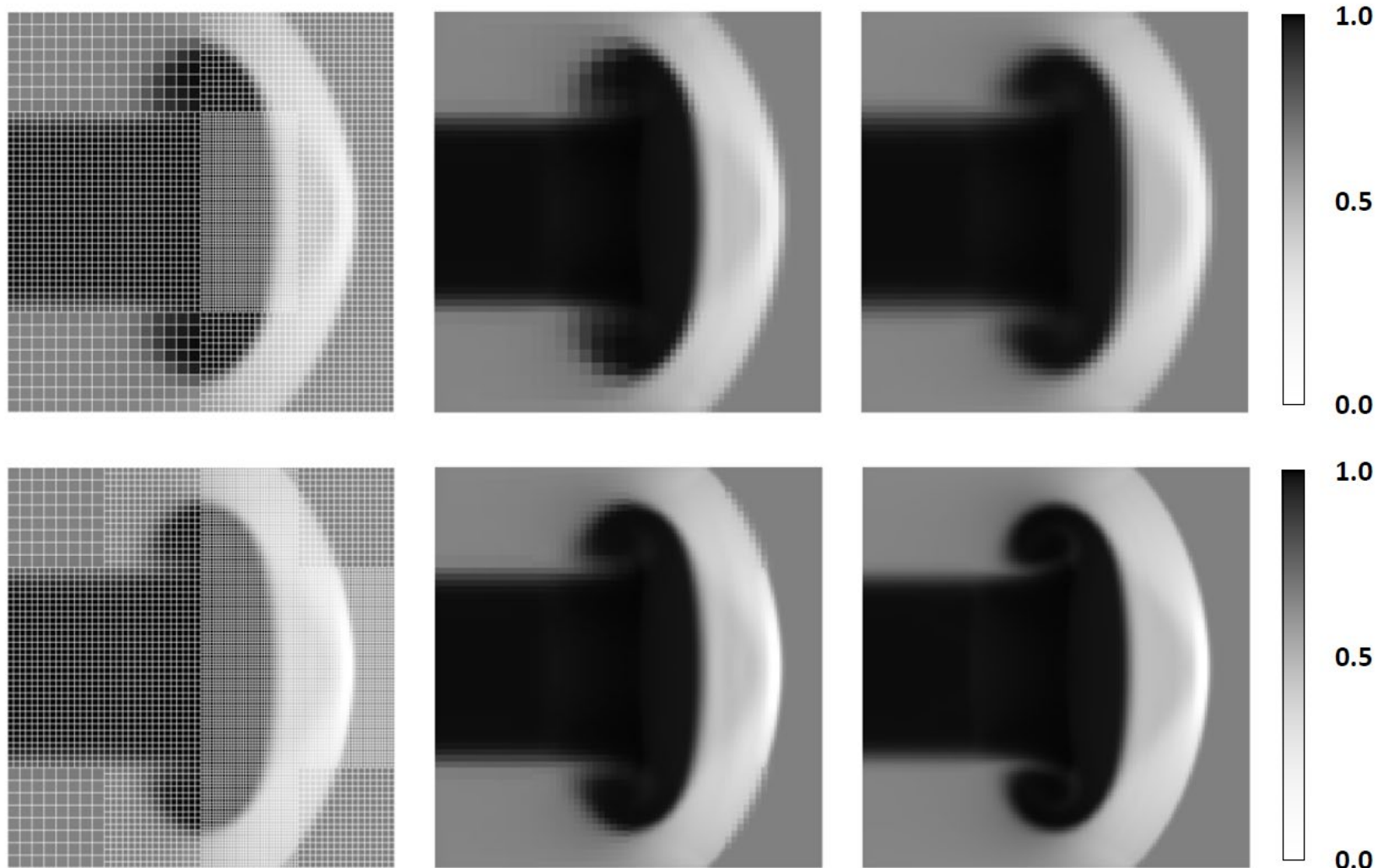


В основе авторского AMR лежит микросетка

Перестройка сетки



Адаптивные сетки



При использовании Coarray Fortran (Shared Memory)
получено 30-кратное ускорение на 32 образах

Публикации

- [1] Kulikov I., Chernykh I., Karavaev D., Prigarin V., Sapetina A., Ulyanichev I., Zavyalov O. A New Parallel Code Based on a Simple Piecewise Parabolic Method for Numerical Modeling of Colliding Flows in Relativistic Hydrodynamics // **Mathematics.** – 2022. – Vol. 10 (11). – Article Number 1865.
- [2] Kulikov I. A new code for the numerical simulation of relativistic flows on supercomputers by means of a low-dissipation scheme // **Computer Physics Communications.** – 2020. – V. 257. – Article Number 107532.
- [3] Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A. A new hydrodynamic code with explicit vectorization instructions optimizations, dedicated to the numerical simulation of astrophysical gas flow. I. Numerical method, tests and model problems // **The Astrophysical Journal Supplement Series.** – 2019. – V. 243. – Article Number 4.
- [4] Vorobyov E., McKevitt J., Kulikov I., Elbakyan V. Computing the gravitational potential on nested meshes using the convolution method // **Astronomy & Astrophysics.** – 2023 – V. 671. – Article Number A81.
- [5] Akimova E., Misilov V., Kulikov I., Chernykh I. OMPEGAS: Optimized Relativistic Code for Multicore Architecture // **Mathematics.** – 2022. – Vol. 10 (11). – Article Number 2546.

Дискуссия и заключение

- Разработана вычислительная модель эволюции релятивистских джетов.
- Разработана параллельная реализация модели с использованием технологии **Coarray Fortran**.
- Требование к новым кодам «**Language Only**»
- Необходим переход к технологиям PGAS с поддержкой операций Remote Memory Access (**RMA**) и Remote Procedure Call (**RPC**).

Работа поддержана грантом
Российского научного фонда № 23-11-00014

Спасибо за внимание!