Сравнение производительности кластеров НКС-1П (ССКЦ СО РАН) и МВС-10П (МСЦ РАН) на задаче моделирования нелинейной многофазной фильтрации в деформируемых пористых средах

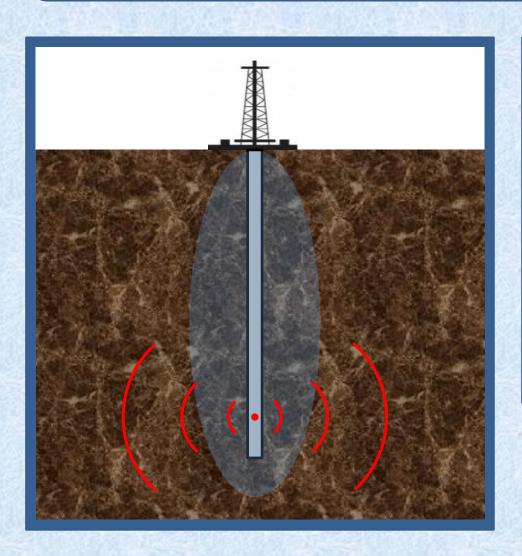
> Киреев С.Е. ИВМиМГ СО РАН

План доклада

• Описание задачи

- Введение
- Математическая модель
- Численный метод
- Алгоритм
- Параллельная реализация
- Описание кластеров
 - Архитектура
 - Вопросы использования
- Результаты сравнительного тестирования

Описание задачи



Объект исследования

 математическое моделирование задач многофазной фильтрации в деформируемых пористых средах на вычислительных системах сверхвысокой производительности

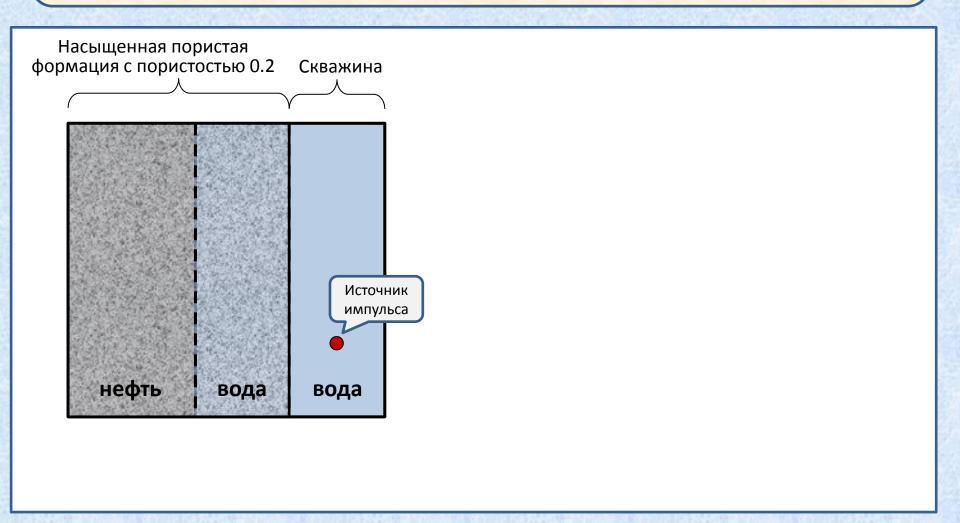
Актуальность

• задачи разработки нефтяных месторождений

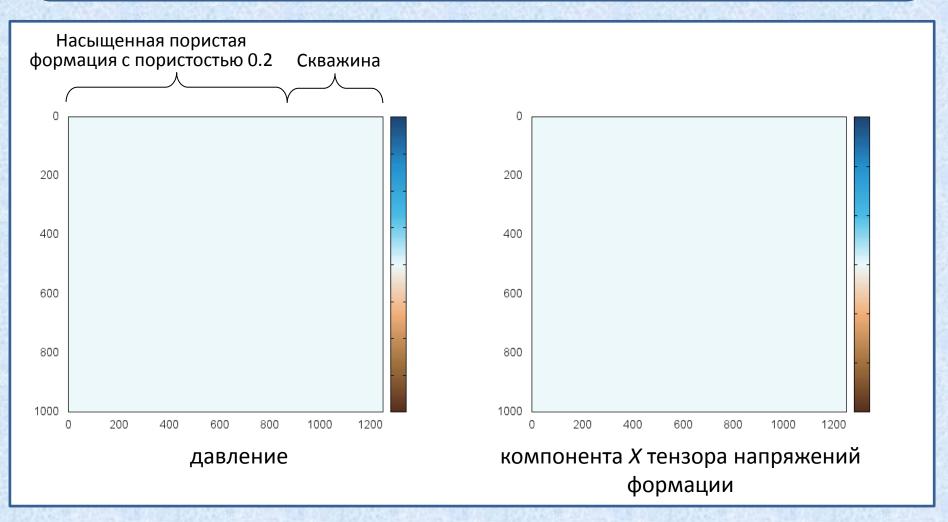
Предыстория

- Была разработана модель, которая позволяет описывать нелинейную неизотермическую фильтрацию водонефтяной смеси сквозь упруго-деформируемую пористую среду
 - E.I. Romenskiy, Y.V. Perepechko, G.V. Reshetova «Modeling of Multiphase Flow in Elastic Porous Media Based on Thermodynamically Compatible Systems Theory» // Poster presentation at ECMOR XIV - 14th European conference on the mathematics of oil recovery
- На основе модели был создан параллельный программный комплекс *Porodynamics,* предназначенный для использования на кластере с графическими ускорителями Nvidia
 - Государственый контракт № 07.514.11.4156 «Поисковые проблемно-ориентированные исследования в области математического моделирования задач многофазной фильтрации в деформируемых пористых средах на вычислительных системах сверхвысокой производительности».
- На основе модели был разработан параллельный программный комплекс для кластеров с ускорителями Intel Xeon Phi
 - С.Е. Киреев Оптимизация для кластера с ускорителями Xeon Phi задачи фильтрации воднонефтяной смеси через эластичную пористую среду // Вычислительные методы и программирование, т.16, выпуск 2, 2015, с. 187-195.

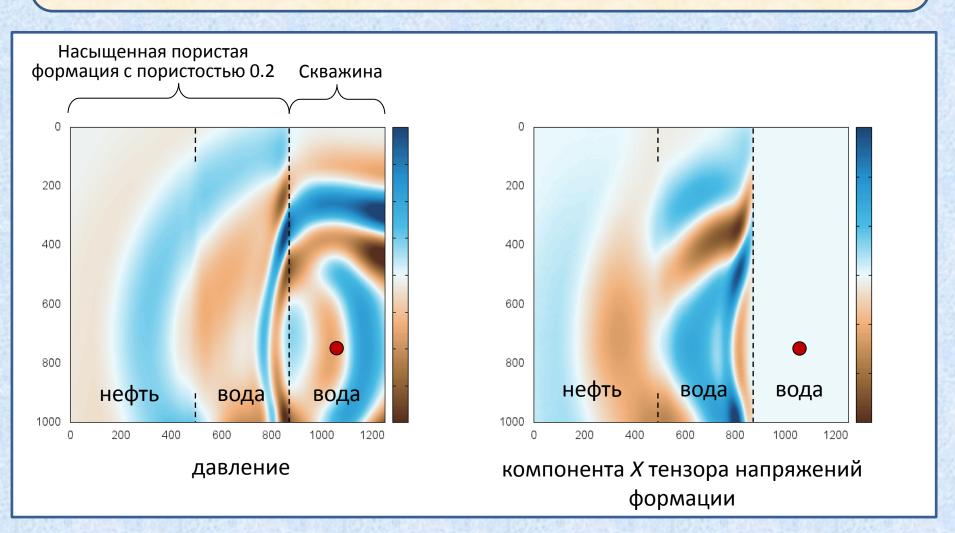
Распространение волны в пористой формации



Распространение волны в пористой формации



Распространение волны в пористой формации

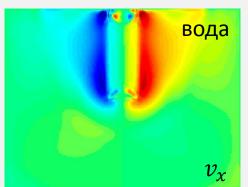


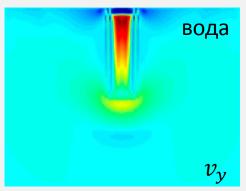
Фильтрация водно-нефтяной смеси

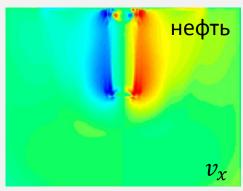


Фильтрация водно-нефтяной смеси

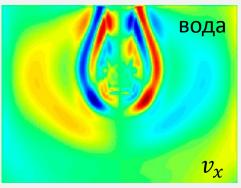
• Просачивание водно-нефтяной смеси в пространство за пределами шахты, когда смесь закачивается в шахту.

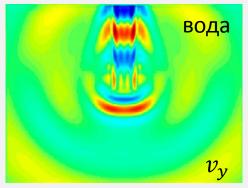


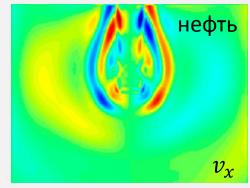




• Поля скоростей воды (горизонтальная (слева) и вертикальная (справа) компоненты) и нефти (горизонтальная компонента). Источник давления отсутствует.







• Поля скоростей воды (горизонтальная (слева) и вертикальная (справа) компоненты) и нефти (горизонтальная компонента). Источник давления, заданный импульсом Рикера, расположен в центре нижней части шахты.

Yu.V. Perepechko, E.I. Romenski, G.V. Reshetova «Modeling of Compressible Multiphase Flow through Porous Elastic Medium» // 2nd Russian-French Workshop "Computational Geophysics", Berdsk , September 22-25, 2014

Модель среды

Термодинамически согласованная модель фильтрации многофазной смеси в деформируемой пористой среде

$$\begin{split} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} &= 0 & \frac{\partial \alpha_n \rho_n}{\partial t} + \partial_k (\alpha_n \rho_n u_k^n) = 0 \\ \frac{\partial \rho \alpha_n}{\partial t} + \partial_k (\rho \alpha_n u_k) &= -\sum_{m=2}^N \lambda_{nm} (p_1 - p_m) \\ \frac{\partial w_k^n}{\partial t} + \partial_k \left(\frac{u_i^1 u_i^1}{2} - \frac{u_i^n u_i^n}{2} + e^1 + \frac{p_1}{\rho_1} - e^n - \frac{p_n}{\rho_n} \right) = e_{kij} u_i \omega_j^n - \sum_{m=2}^N \chi_{nm} c_m (u_k - u_k^m) \\ \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \partial_k \left(\sum_{n=1}^N \alpha_n \rho_n u_i^n u_k^n + \sum_{n=1}^N \alpha_n \rho_n - \alpha_1 \sigma_{ik} \right) = 0 & \omega_j^n = e_{jkl} \frac{\partial w_k^n}{\partial x_l} \\ \frac{\partial \rho F_{ij}}{\partial t} + \partial_k (\rho F_{ij} u_k - \rho F_{kj} u_i) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho \left(E + \frac{1}{2} u_i u_i \right) + \partial_k \left(\sum_{n=1}^N \alpha_n \rho_n u_k^n \left(e^n + \frac{1}{2} u_i^n u_i^n + \frac{1}{\rho} p_n \right) - u_i \alpha_1 \sigma_{ik} \right) = 0 \end{split}$$

Годунов С.К., Роменский Е.И. Элементы механики сплошных сред и законы сохранения. – М.: Научная книга, 1998^{10}

Модель среды

Параметры состояния среды

- α_1 объёмная доля твёрдой фазы (формации)
- α_n объёмная доля жидкостей (n=2,...,N), $\alpha_1 + \sum_{n=2}^N \alpha_n = 1$

$$\alpha_1 + \sum_{n=2}^N \alpha_n = 1$$

- ho_n массовая плотность фазы n
- $ho = \sum_{n=1}^N \alpha_n
 ho_n$ полная массовая плотность среды
- $c_n = \frac{\alpha_n \rho_n}{c_n}$ массовая доля фазы n, $c_1 + \sum_{n=2}^N c_n = 1$

$$c_1 + \sum_{n=2}^{N} c_n = 1$$

- u_i^n вектор скорости фазы n
- $w_i^n = u_i^1 u_i^n$ скорость фазы n относительно твёрдой фазы
- $u_i = \sum_{n=1}^N c_n u_i^n$ скорость среды
- F_{ij} градиент деформации среды
- *S* энтропия среды
- $\phi = 1 \alpha_1$ пористость твёрдой фазы
- λ_{nm} коэффициент релаксации
- χ_{nm} коэффициент межфазного трения

Численный метод

• Метод WENO-Рунге-Кутты 5-го порядка по пространству и времени

 Система дифференциальных уравнений в двумерном случае может быть записана в следующей векторной форме:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = S(U)$$

Разностная аппроксимация уравнения на прямоугольной сетке может быть записана в форме:

$$\frac{dU_{ij}}{dt} + \frac{F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j}}{h_x} + \frac{G_{i,j+\frac{1}{2}} - G_{i,j-\frac{1}{2}}}{h_y} = S_{ij}$$

 Если значения потоков на гранях ячеек известны, можно получить дифференциальное уравнение для значений в ячейках сетки:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = L(U) = -\frac{F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j}}{h_{x}} - \frac{G_{i,j+\frac{1}{2}} - G_{i,j-\frac{1}{2}}}{h_{y}} + S_{ij}$$

— Для его решения используется метод Рунге-Кутты требуемого порядка точности.

Численный метод

• Метод WENO-Рунге-Кутты 5-го порядка по пространству и времени

— Для решения уравнения $\frac{\partial \textit{U}}{\partial t} = \textit{L}(\textit{U})$ используется метод Рунге-Кутты 5-го порядка точности

•
$$U^{(1)} = U^n + \frac{1}{2}\Delta t L(U^n)$$

•
$$U^{(2)} = U^{(1)} + \frac{1}{2} \Delta t L(U^{(1)})$$

•
$$U^{(3)} = U^{(2)} + \frac{1}{2} \Delta t L(U^{(2)})$$

•
$$U^{(4)} = U^{(3)} + \frac{1}{2} \Delta t L(U^{(3)})$$

•
$$U^{(5)} = U^{(4)} + \frac{1}{2} \Delta t L(U^{(4)})$$

•
$$U^{n+1} = \frac{1}{9}U^n + \frac{2}{5}U^{(1)} + \frac{4}{9}U^{(3)} + \frac{2}{45}U^{(5)} + \Delta t L(U^{(5)})$$

Численный метод

• Метод WENO-Рунге-Кутты 5-го порядка по пространству и времени

- Для определения значений потоков $F_{i\pm\frac{1}{2},j}$, $G_{i,j\pm\frac{1}{2}}$ на границах ячеек достаточно знать на них значения $U_{i\pm\frac{1}{2},j}$, $U_{i,j\pm\frac{1}{2}}$.
- Для вычисления потоков используется расщепление по пространству. На гранях ячеек используется аппроксимация WENO 5-го порядка с использованием значений из соседних ячеек.

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0 \qquad \qquad \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0$$

- Для вычисления потоков используется метод Лакса-Фридрихса:
 - По оси X: если U_L и U_R значения слева и справа от точки $x_{i+\frac{1}{2}}$, то

$$F_{i+\frac{1}{2}}^{LF} = \frac{1}{2} \left(F(U_L) + F(U_R) \right) - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} (U_R - U_L)$$

Аналогично по оси Y:

$$G_{i+\frac{1}{2}}^{LF} = \frac{1}{2} \left(G(U_L) + G(U_R) \right) - \frac{1}{2} \frac{\Delta y}{\Delta t} (U_R - U_L)$$

Алгоритм

Схема используемого метода Рунге-Кутты ($U^n \rightarrow U^{n+1}$):

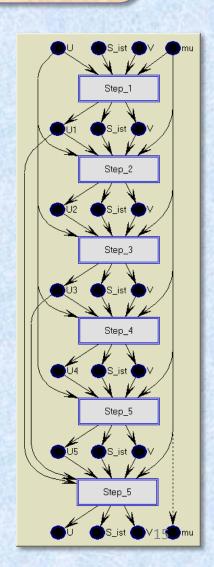
- $U_1 = U^n + \frac{1}{2} \tau L(U^n)$
- $U_2 = U_1 + \frac{1}{2} \tau L(U_1)$
- $U_3 = U_2 + \frac{1}{2} \tau L(U_2)$
- $U_4 = U_3 + \frac{1}{2} \tau L(U_3)$
- $U_5 = U_4 + \frac{1}{2} \tau L(U_4)$
- $U^{n+1} = 1/9 \cdot U + 2/5 \cdot U_1 + 4/9 \cdot U_3 + 2/45 \cdot U_5 + 1/45 \cdot \tau \cdot L(U_5)$

Вычисление оператора L(U):

$$L(U) = -\frac{F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j}}{h_x} - \frac{G_{i,j+\frac{1}{2}} - G_{i,j-\frac{1}{2}}}{h_y} + S_{i,j}$$

Вычисление потоков F и G: метод WENO 5-го порядка

• Используются только явные схемы



Алгоритм

Шаг метода Рунге-Кутты — представление в виде графа Обозначения:

OU

– переменные –характеристики среды(2D массивы)

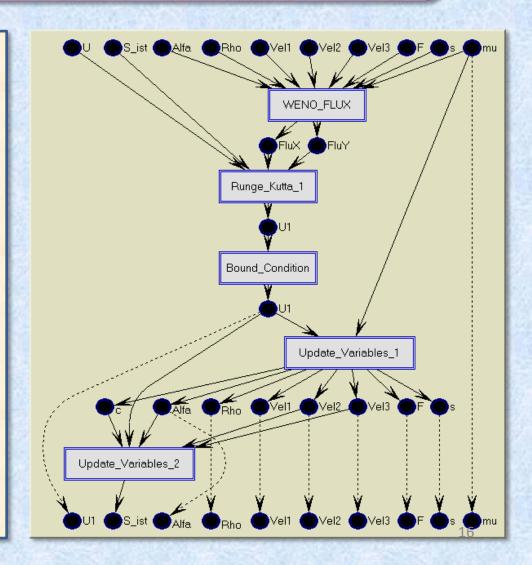
WENO_FLUX

– операции – вычисление характеристик среды (гнёзда циклов – обход 2D массива)

for (iy=ny1; iy<=ny2; iy++) for (ix=nx1; ix<=nx2; ix++) { ... }

зависимость по данным

• — «идентичность» переменных



Алгоритм

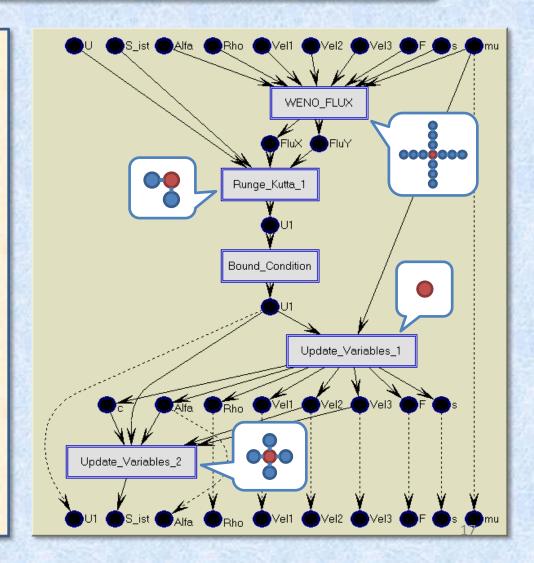
Шаг метода Рунге-Кутты — представление в виде графа Обозначения:

— операции — вычисление характеристик среды (гнёзда циклов — обход 2D массива)

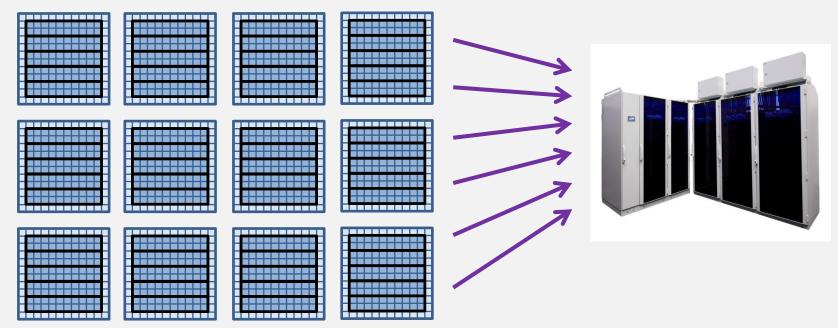
for (iy=ny1; iy<=ny2; iy++) for (ix=nx1; ix<=nx2; ix++) { ... }

зависимость по данным

• — «идентичность» переменных



- Используется декомпозиция пространства моделирования
 - Пространство моделирования делится на подобласти, которые распределяются по различным вычислителям
 - Между подобластями осуществляются обмены граничными значениями



- Распараллеливание для распределённой памяти
 - Используется MPI, 2D декомпозиция области



- Распараллеливание для общей памяти
 - Используется OpenMP, 1D декомпозиция области (по оси Y)
- Режим offload для использования ускорителей Intel Xeon Phi



- Используются средства компилятора Intel (#pragma offload...), 1D декомпозиция области (по оси Y)
- Векторизация вычислений



• Выполнена средствами компилятора Intel (директивы компилятора #pragma... + небольшая модификация кода)

- Распараллеливание для распределённой памяти
 - Используется MPI, 2D декомпозиция области



- Распараллеливание для общей памяти
 - Используется OpenMP, 1D декомпозиция области (по оси Y)
- Режим offload для использования ускорителей Intel Xeon Phi



- Используются средства компилятора Intel (#pragma offload...), 1D декомпозиция области (по оси Y)
- Векторизация вычислений



• Выполнена средствами компилятора Intel (директивы компилятора #pragma... + небольшая модификация кода)

- Параметры запуска, задаваемые через систему очередей кластера
 - Количество узлов кластера
 - Количество MPI-процессов на хост-процессоры узла
 - Количество MPI-процессов на ускоритель KNC (для режима Native)
- Параметры запуска, задаваемые через MPI
 - Количество МРІ-процессов
- Параметры запуска программного комплекса
 - Размеры 2D решётки процессов
 - Количество потоков на процесс, отдельно для хост-процессоров и ускорителей KNC
 - Распределение работ между хост-процессорами и ускорителями KNC для режима offload

План доклада

- Описание задачи
 - Введение
 - Математическая модель
 - Численный метод
 - Алгоритм
 - Параллельная реализация
- Описание кластеров
 - Архитектура
 - Вопросы использования
- Результаты сравнительного тестирования

Сравнение кластеров

МВС-10П (МСЦ РАН)

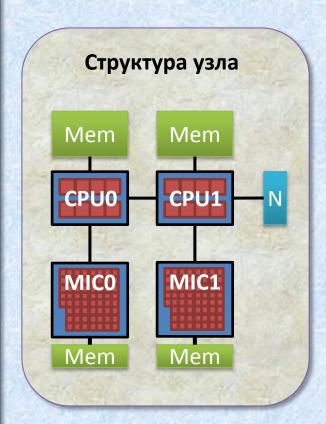
- «Основной» раздел (2013 год) ресурсы узла:
 - 2 × процессора Intel Xeon (Sandy Bridge)
 - 2 × ускорителя Intel Xeon Phi (KNC – Knight's Corner)
- Раздел PetaStream...
- Раздел Broadwell...
- Раздел KNL...

НКС-1П (ССКЦ СО РАН)

- Раздел Broadwell (2017 год) ресурсы узла:
 - 2 × процессора Intel Xeon (Broadwell)
- Раздел KNL (2017 год) ресурсы узла:
 - 1 × процессор Intel Xeon Phi(KNL Knight's Landing)

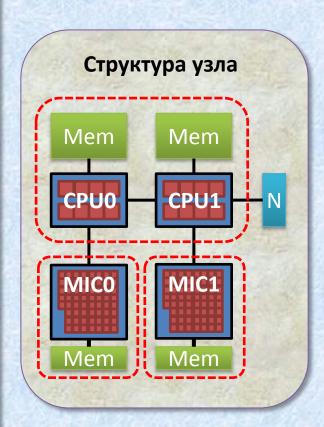
Кластер МВС-10П

- Узел кластера:
 - хост-система
 - 2 × Xeon E5-2690, 2.9 ГГц
 (Sandy Bridge), 8 ядер × 2 потока
 - 32 аппаратных потока на узел
 - 64 ГБ памяти на узел
 - 185.6 GFLOPS пиковая произв-ть
 - два ускорителя Intel Xeon Phi
 - Xeon Phi 7110X (KNC), 1.094 ГГц
 61 ядро × 4 потока
 - 244 аппаратных потока на ускоритель
 - 8 Гб памяти на ускоритель
 - 2 × 1067.7 GFLOPS пиковая произв-ть



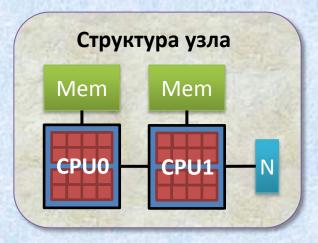
Кластер МВС-10П

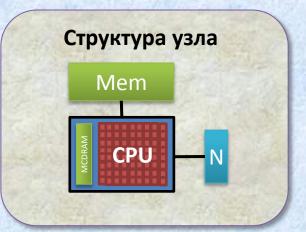
- Узел кластера:
 - хост-система
 - 2 × Xeon E5-2690, 2.9 ГГц
 (Sandy Bridge), 8 ядер × 2 потока
 - 32 аппаратных потока на узел
 - 64 ГБ памяти на узел
 - **185.6 GFLOPS** пиковая произв-ть
 - два ускорителя Intel Xeon Phi
 - Xeon Phi 7110X (KNC), 1.094 ГГц
 61 ядро × 4 потока
 - 244 аппаратных потока на ускоритель
 - 8 Гб памяти на ускоритель
 - 2 × 1067.7 GFLOPS пиковая произв-ть



Кластер НКС-1П

- Узел кластера (раздел Broadwell):
 - 2 × Xeon E5-2697A v4, 2.6 (3.6) ГГц
 (Broadwell), 16 ядер × 2 потока
 - 32 аппаратных потока на узел
 - 128 ГБ памяти на узел
 - 1331.2 GFLOPS пиковая произв-ть
- Узел кластера (раздел KNL):
 - 1 × Xeon Phi 7290, 1.5 (1.7) ГГц
 (KNL), 72 ядра × 4 потока
 - 288 аппаратных потока на узел
 - 96 ГБ памяти на узел
 - 16 GB памяти MCDRAM (кэш)
 - 3456 GFLOPS пиковая произв-ть





Сравнение процессоров

• Пиковая производительность узла

МВС-10П	FLOPs на команду	Команд за такт	Длина вектора	GHz	Ядер в проц.	Проц-ров в узле	GFLOPS на узел	
Sandy Bridge	1 ×	1 >	< 4 (AVX) >	< 2.9 →	< 8 >	< 2 =	= 185.6	
KNC	2 (FMA) ×	· 1 >	< 8 (IMCI) >	< 1.1 →	< 61 >	< 2 =	₌ 2135.5	
НКС-1П								
Broadwell	2 (FMA) ×	2 >	< 4 (AVX2) >	< 2.6 >	× 16 >	< 2 =	= 1331.2	
KNL	2 (FMA) ×	2 >	< 8 (AVX-512) >	< 1.5 →	× 72 >	< 1 =	= 3456	

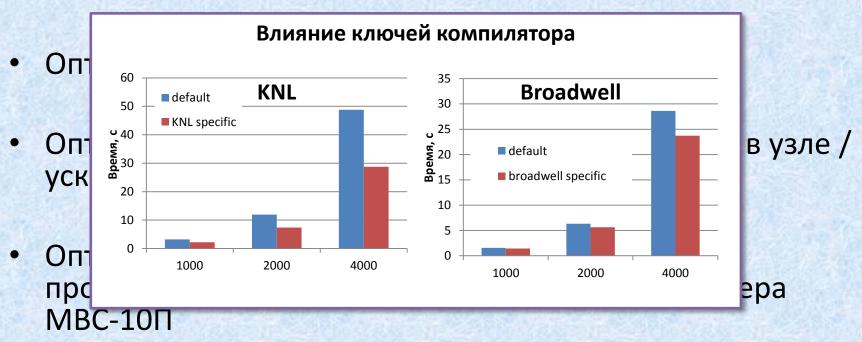
Сравнение процессоров

• Подсистема памяти

	МВС-10П	Кэш L1	Кэш L2	Кэш L3	Локальная память		
7	Sandy Bridge	8 × 32 KB	8 × 256 KB	20 MB	-		
	KNC	61 × 32 KB	61 × 512 KB	-	8 GB GDDR5 352 GB/s		
HKC-1Π							
	Broadwell	16 × 32 KB	16 × 256 KB	2 × 20 MB	-		
	KNL	72 × 32 KB	36 × 1 MB	-	16 GB MCDRAM 400+ GB/s		

- Правильное использование компилятора
- Оптимальный способ 2D декомпозиции области
- Оптимальное соотношение процессов и потоков в узле / ускорителе
- Оптимальное соотношение работы между хостпроцессорами и ускорителями KNC в узлах кластера MBC-10П
- Использование ускорителей: режимы Native и Offload

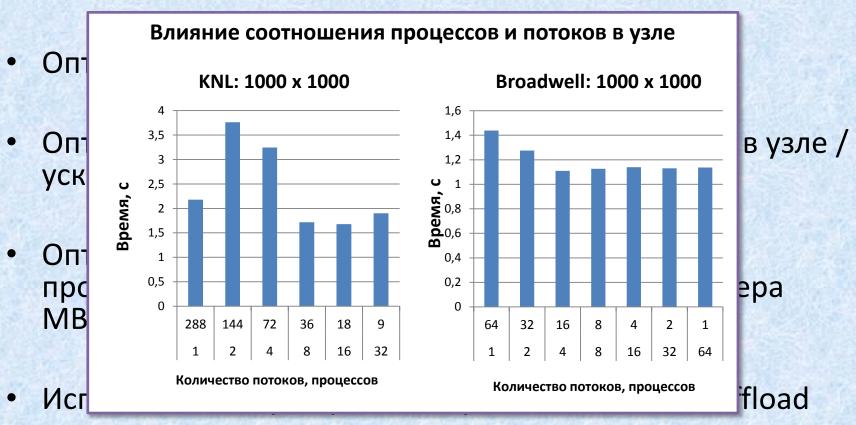
• Правильное использование компилятора



• Использование ускорителей: режимы Native и Offload

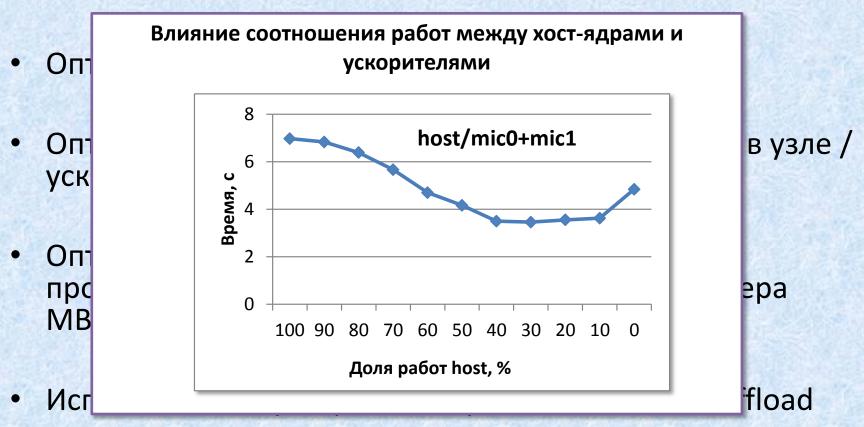
- Правильное использование компилятора
- Оптимальный способ 2D декомпозиции области
- Оптимальное соотношение процессов и потоков в узле / ускорителе
- Оптимальное соотношение работы между хостпроцессорами и ускорителями KNC в узлах кластера MBC-10П
- Использование ускорителей: режимы Native и Offload

• Правильное использование компилятора



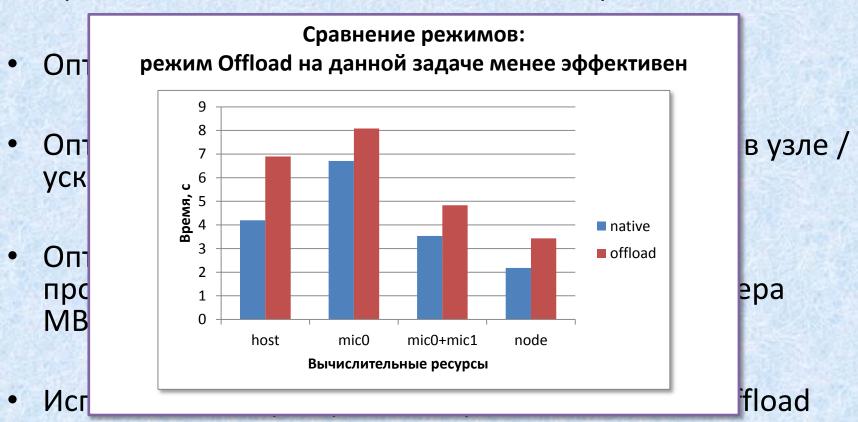
- Правильное использование компилятора
- Оптимальный способ 2D декомпозиции области
- Оптимальное соотношение процессов и потоков в узле / ускорителе
- Оптимальное соотношение работы между хостпроцессорами и ускорителями KNC в узлах кластера MBC-10П
- Использование ускорителей: режимы Native и Offload

• Правильное использование компилятора



- Правильное использование компилятора
- Оптимальный способ 2D декомпозиции области
- Оптимальное соотношение процессов и потоков в узле / ускорителе
- Оптимальное соотношение работы между хостпроцессорами и ускорителями KNC в узлах кластера MBC-10П
- Использование ускорителей: режимы Native и Offload

• Правильное использование компилятора



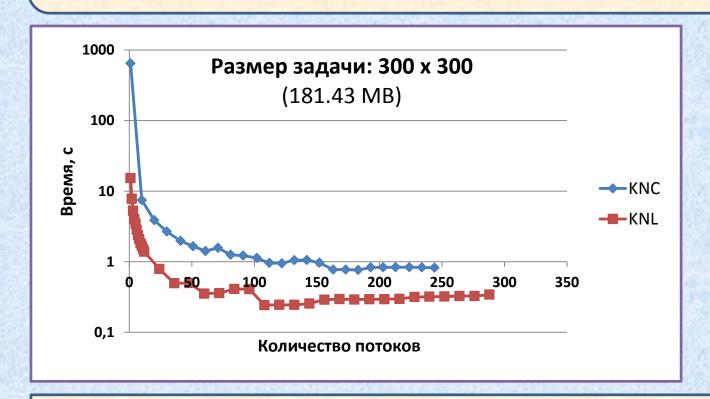
Вопросы оптимального использования ресурсов

- Правильное использование компилятора
- Оптимальный способ 2D декомпозиции области
- Оптимальное соотношение процессов и потоков в узле / ускорителе
- Оптимальное соотношение работы между хостпроцессорами и ускорителями KNC в узлах кластера MBC-10П
- Использование ускорителей: режимы Native и Offload

План доклада

- Описание задачи
 - Введение
 - Математическая модель
 - Численный метод
 - Алгоритм
 - Параллельная реализация
- Описание кластеров
 - Архитектура
 - Вопросы использования
- Результаты сравнительного тестирования

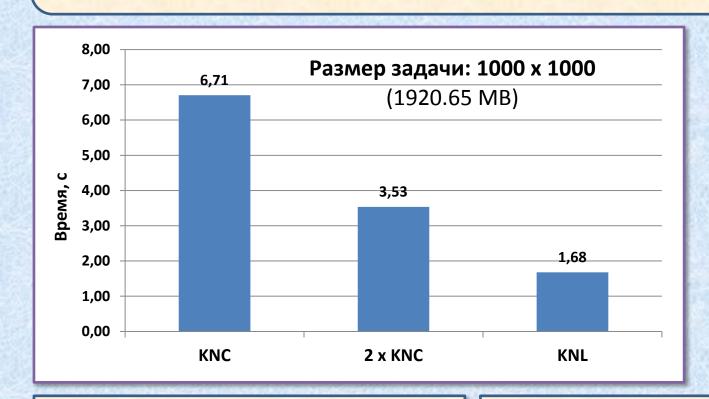
Сравнение KNC и KNL



Приведено время счёта одного шага по времени

- Время счёта на одном ядре:
 - KNC: 644.4 c
 - KNL: 15.3 с быстрее в 42 раза

Сравнение KNC и KNL



Расчёт на всех ядрах

Приведено время счёта одного шага по времени

Время счёта на всех ядрах:

KNC: 6.71 c

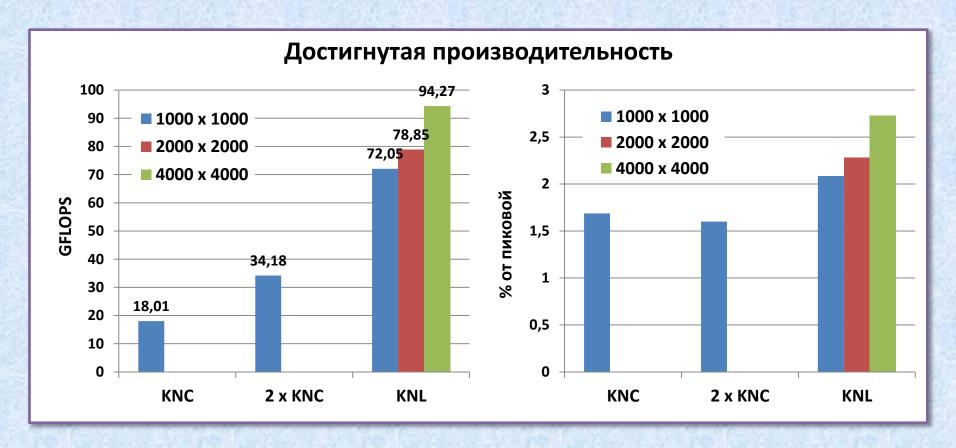
• KNL: 1.68 с - **быстрее в 4 раза**

Время счёта на всех ядрах узла:

2 x KNC: 3.53 c

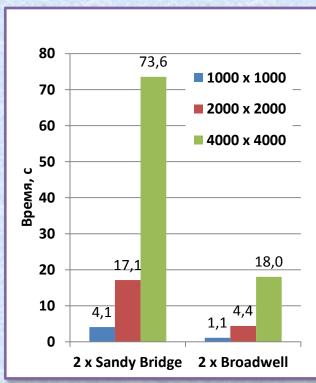
KNL: 1.68 с - **быстрее в 1.9 раза**

Сравнение KNC и KNL

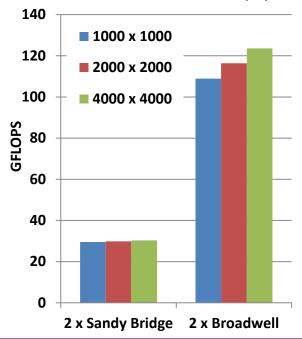


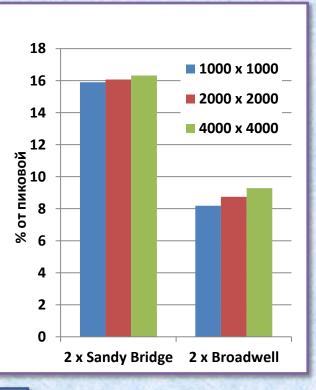
1000 x 1000 : **1 920.65** MB 2000 x 2000 : **7 625.38** MB 4000 x 4000 : **30 387.38** MB

Сравнение Sandy Bridge и Broadwell









Ускорение на 2 x Broadwell по сравнению с 2 x Sandy Bridge:

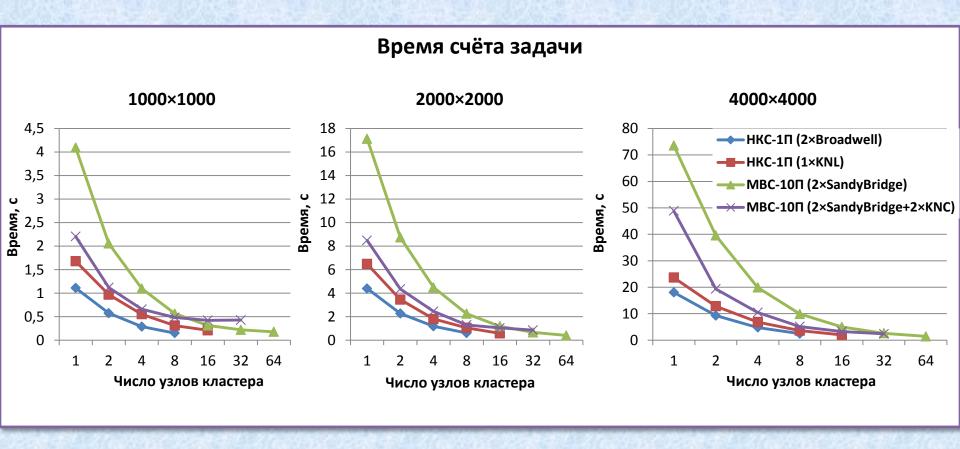
- 1000 х 1000 : быстрее в 3.7 раза
- 2000 x 2000 : быстрее **в 3.9 раза**
- 4000 x 4000 : быстрее **в 4.1 раза**

Размеры задач:

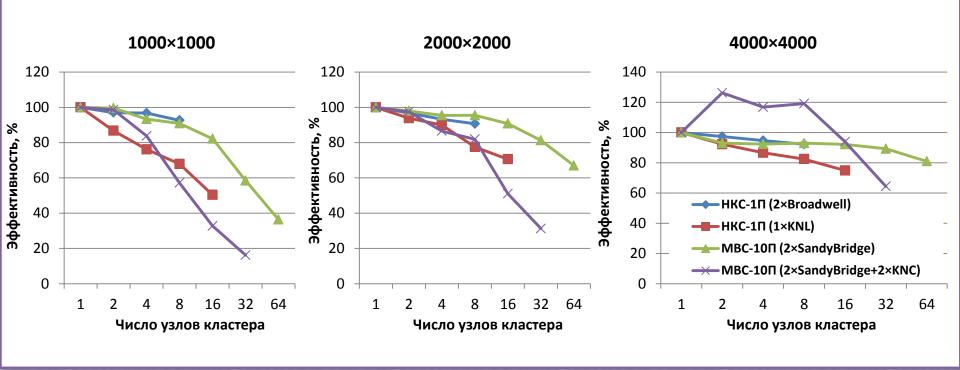
1000 x 1000 : **1 920.65** MB

2000 x 2000 : **7 625.38** MB

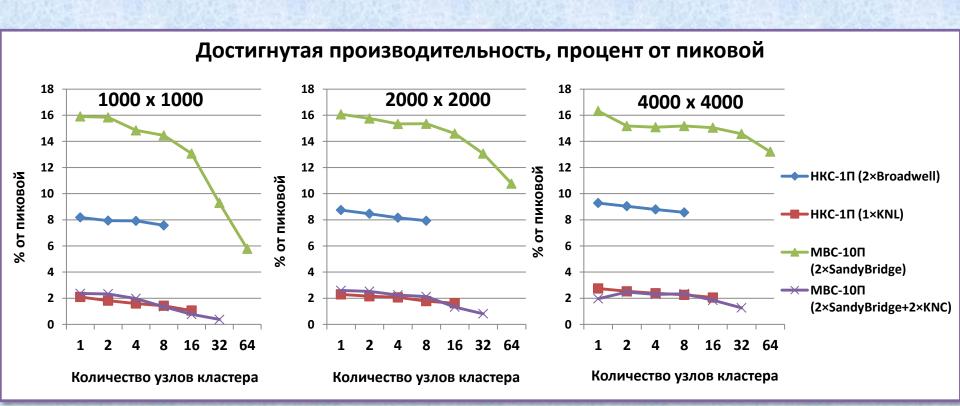
4000 x 4000 : **30 387.38** MB



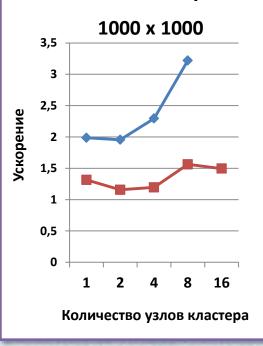
Эффективность распараллеливания по узлам кластера

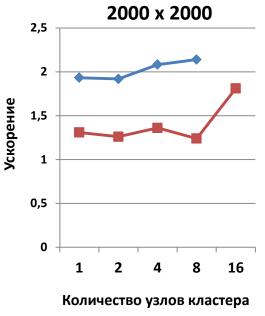


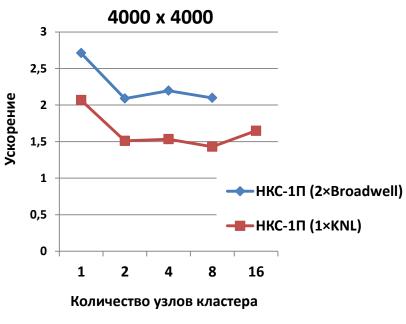




Ускорение при использовании НКС-1П по сравнению с МВС-10П







Выводы

- Эффективное использование отдельных разделов кластера НКС-1П проще, чем кластера МВС-10П, благодаря однородной структуре.
- Использование кластера НКС-1П позволяет ускорить расчёты по представленной программе по сравнению с кластером МВС-10П более чем в 1.5 раза на том же числе узлов.

Спасибо за внимание!

Дополнительные слайды

