

## Интегральный подход к созданию прикладного программного обеспечения для суперкомпьютеров

Глинский Б.М.<sup>1,2</sup>, Черных И.Г.<sup>1,2</sup>, Куликов И.М.<sup>1,2</sup>, Снытников А.В.<sup>1,2</sup>, Винс Д.В.

<sup>1</sup>*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН*

<sup>2</sup>*Новосибирский государственный университет*

В работе предлагается метод разработки алгоритмического и программного обеспечения для современных и будущих суперкомпьютеров на основе интегрального подхода, состоящего из трех этапов: со-дизайн; прогонка программы на имитационной модели; оценка энергоэффективности данной реализации.

Приведены примеры применения данного подхода для задач астрофизики и физике плазмы.

Концепция со-дизайна в этой работе сформулирована в виде шести взаимосвязанных пунктов:

1. формулировка «физической» постановки задачи;
2. математическая формулировка «физической» задачи;
3. создание численного метода для решения математической постановки;
4. выбор структур данных и параллельного алгоритма;
5. учёт особенностей архитектуры суперЭВМ;
6. использование средств разработки.

На этапе «физической» формулировки задачи мы уже можем определить процесс, который будет основным, и относительно которого мы будем строить все остальные этапы.

Следующий этап связан с исследованием масштабируемости выбранного алгоритма решения задачи на заданной архитектуре суперкомпьютера и проводится методом имитационного моделирования. Для моделирования применяется распределенная агентно-ориентированная система имитационного моделирования AGNES, разработанная в ИВМиМГ СО РАН, для оценки эффективности архитектур и алгоритмического обеспечения перспективных суперЭВМ. Этот вариант был апробирован и показал свою перспективность при решении вычислительно сложных задач (Б.М. Глинский, А.С. Родионов, М.А. Марченко и др., 2012; Kulikov I., Chernykh I., Glinskiy B., Weins D., Shmelev A., 2015). Особенностью реализации данного этапа является ориентация на самый современный аппарат агентно-ориентированного моделирования, что позволит, при опоре на вычислительные средства и аппаратную архитектуру Сибирского суперкомпьютерного центра ИВМиМГ, МСЦ и МГУ провести исследования по реализации большемасштабных алгоритмов на современных и будущих суперЭВМ. Другой особенностью является использование методов имитационной оптимизации для настройки параметров алгоритмов и оптимизации отображения параллельных программ на архитектуру инструментальной вычислительной системы. Моделирование выполнения алгоритмов по данным их реальной работы с применением AGNES проведено: для астрофизического кода на узлах с Xeon E5-2697 Intel (5632 узлов с 67584 ядер), Nvidia Kepler K40 графические процессоры (1024 узлов с 1048576 ядер) и Xeon Phi Intel 7110 (4096 узлов с 983040 ядрами); для кода физики плазмы на узлах с Xeon E5-2697 Intel (3072 узлов с 36864 ядер), Nvidia Tesla2090M графические процессоры (1536 узлов с 786432 ядрами) и Nvidia Kepler K40 графических (1536 узлов с 4,4 млн ядер). Результаты: для астрофизического кода время выполнения растет несущественно, до 20% для 5120 вычислительных узлов, лучшую масштабируемость показали вычислительные узлы с ускорителями Nvidia Kepler K40 и Intel Xeon Phi (native mode); для кода физики плазмы - существенное увеличение коммуникационных сообщений

дает рост 58% времени выполнения кода для 3072 узлов с процессорами Intel Xeon, код хорошо масштабируется на вычислительных узлах с ускорителями Nvidia Kepler K40.

Энергоэффективность алгоритмов и программ - комплексное понятие, состоящее из более, чем 20 составляющих, которые сводятся к вычислительной эффективности. Большое число научных исследований в области информационных технологий привело к тому, что в показателе производительности программного обеспечения помимо экономии времени стали учитывать и экономию энергии. В данной работе программный код оптимизировался по следующим трем направлениям: эффективность работы с процессором и оперативной памятью; эффективность работы с сетевыми устройствами; эффективность работы с периферийными устройствами. Для эффективной работы с процессором и памятью использовался пакет Intel Parallel Studio XE 2016 Beta, включающий в себя Intel Vectorization Advisor. Применение пакета дало пророст производительности в 30% для астрофизического кода на процессорах семейства Intel Sandy Bridge. Для задач астрофизики и физики плазмы были выбраны наиболее эффективные численные методы с точки зрения минимизации сетевых обменов. В результате: время выполнения MPI операций для астрофизического кода составляет не более 2-3% от общего времени счета, для кода физики плазмы не более 10%.

*Работа поддержана грантами РФФИ 15-31-20150 мол-а-вед, 15-01-00508, 13-07-00589, 14-01-31199 и 14-01-00392, грантом Президента РФ МК – 6648.2015.9.*