

ABAQUS 之 GPU 加速效能分析

李俊宏, 周朝宜, 謝志偉

國家實驗研究院國家高速網路與計算中心

摘要

由於圖形處理器GPU的計算效能日益強大，因此，許多數值模擬分析軟體嘗試將部分需大量計算的工作交由GPU去執行，以縮短整體的分析時間，然而因GPU架構的特性，並非所有的數值演算法都可得到很好的計算效能，仍需視各別數值演算法的特性和題目大小等因素而定，ABAQUS有限元素分析軟體在其ABAQUS/Standard的直接稀疏矩陣求解器部份提供GPU加速的功能，因此，本研究利用國網中心所建置的GPU運算平台主機Formosa 5做為測試平台，針對不同的題目大小、CPU核心數和GPU數等因素對ABAQUS在結構力學之應用進行相關的GPU加速效能分析。

關鍵字：圖形處理器、有限元素分析、結構力學、加速效能分析

ABSTRACT

As the increasing computing performance of GPU, there are many numerical software packages attempt to share the heavy CPU computing work by GPU to shorten the overall analysis time. However, due to the characteristics of GPU architecture, not all of the numerical algorithms can obtain high performance. It still depends on the individual characteristics of numerical algorithms, problem sizes and other factors. ABAQUS finite element analysis software provides GPU-accelerated features in its ABAQUS/Standard direct sparse matrix solver. Therefore, this study used NCHC's self-built GPU-based cluster system -Formosa 5 to investigate the ABAQUS GPU-accelerated performance in the application of structural mechanics for different problem sizes, number of CPU cores and GPUs.

Keywords: GPU, finite element analysis, structural mechanics

一、簡介

圖形處理器(Graphics Processing Unit, GPU)早期主要做為處理影像顯示相關的運算，之後隨圖形處理器可程式化的演進與其平行處理能力的增加，開始有將其做為通用運算之用的想法，通用計算圖形處理器(General Propose Graphics Processing Unit, GPGPU)的概念乃應運而生，同時圖形處理器擁有數量龐大的計算核心數，在平行運算應用上將具有更為強大的浮點運算能力，以 Intel Xeon 5670 2.93GHz 六核心處理器而言，其雙精度浮點運算最高理想速度為 70.32 GFLOPS[1]，但 Nvidia Tesla M2070 GPU 擁有 448 個計算核心，其雙精度浮點運算最高速度可達 515 GFLOPS，而此運算

速度的差距亦逐年拉大[2]。由於 GPU 的計算效能日益強大，因此，許多數值模擬分析軟體嘗試將部分需大量計算的工作交由 GPU 去執行，以縮短整體的分析時間，然而因 GPU 架構的特性，程式需要將資料由主機端的記憶體搬移至 GPU 的記憶體後才能進行運算，並且在運算完成後還需要將資料由 GPU 的記憶體搬回至主機端的記憶體內，另外在 GPU 內的運算以處理單指令流多數數據流(SIMD)比較適合，所以並非所有的數值演算法都可得到很好的計算效能，仍需視各別數值演算法的特性和題目大小等因素而定[3]，ABAQUS 有限元素分析軟體在其 ABAQUS/Standard 的直接稀疏矩陣求解器部份提供 GPU 加速的功能，因此，本

研究利用國網中心所建置的 GPU 運算平台主機 Formosa 5 做為測試平台，針對不同的題目大小、CPU 核心數和 GPU 數等因素對 ABAQUS 在結構力學之應用進行相關的 GPU 加速效能分析。

二、GPU 運算測試環境

Formosa 5(圖 1)是由國家高速網路與計算中心自行研發建置的科技研發雲端運算平台主機，此主機擁有 88 台計算伺服器，每台計算伺服器配備 2 顆六核心 Xeon 5670 2.93GHz 處理器、InfiniBand 40Gb/s 高速網路、96GB 記憶體，搭配儲存節點共 42TB 硬碟空間。為更降低建置成本與提升能源效率，新一代 Formosa 5 採用 CPU 加 GPU 混合的運算架構，每台計算節點配有 3 張 Nvidia Tesla M2070 GPU 卡，透過 HPL 基準效能測試，實際獲得的整體最佳效能為 89 兆次浮點運算(TFLOPS)，此成績在 2012 年 6 月公佈的全球 500 大超級電腦排名第 232 名。

本研究測試使用的軟體版本為 ABAQUS V6.12-3，作業系統為 CentOS 6 x86_64，測試時透過 Torque 排程系統，將計算工作交付到後端計算節點群執行。ABAQUS 利用執行指令中的 cpus 選項設定總共使用的 CPU 核心數，利用執行指令中的 gpus 選項設定每一計算伺服器所使用的 GPU 數，同時在 abaqus_v6.env 環境變數檔中利用 mp_host_list 環境變數設定在那些計算伺服器執行 CPU 計算工作及每一台計算伺服器所使用的 CPU 核心數，以下列指令為例，該計算工作總共使用 2 台計算伺服器 (tsla87 和 tsla88)，每台伺服器使用 3 個 CPU 核心與 1 顆 GPU，因此總共使用 6 個 CPU 核心與 2 顆 GPU。

```
ABAQUS command:  
abaqus job=s4b cpus=6 gpus=1  
  
abaqus_v6.env:  
mp_host_list=[[ 'tsla87',3],[ 'tsla88',3]]
```

三、測試例子

本研究的效能測試例子為 ABAQUS 軟體公司所提供測試 ABAQUS/Standard 計算效能的基本範例 S4a 和 S4b，二者是將汽缸

蓋拴住引擎(cylinder head bolt-up)的接觸(contact)非線性靜力問題如圖 2。其中 S4a 總共有 720,059 個自由度(Degree of Freedom, DOF)，213,211 個節點(node)，890,378 個元素(element)，包含 882,158 個 C3D4 元素、2,960 個 GK3D8 元素和 5,260 個 C3D8I 元素；S4b 總共有 5,235,989 個自由度，1,060,943 個節點，665,799 個元素，包含 657,581 個 C3D10M 元素、2,958 個 GK3D8 元素和 5,260 個 C3D8I 元素。

四、結果與討論

本研究之計算時間係採用 ABAQUS 所記錄之 wall-clock time，其為 ABAQUS job 從開始執行到結束實際所經歷的時間。圖 3 為 S4b 在單一計算伺服器但不同 CPU 核心數下之計算時間與其在單一顆 GPU 加速下之計算時間，由圖 3 可知 S4b 在單一 CPU 核心下，其單一顆 GPU 的加速效能可達 3.18，之後隨 CPU 核心數的增加其單一顆 GPU 的加速效能而遞減，在 12CPU 核心時單一顆 GPU 加速效能只有 1.29。圖 4 為 S4b 在單一計算伺服器但不同 CPU 核心數下搭配不同數量 GPU 之加速效能比較，由圖 4 可知在本硬體架構下其多顆 GPU 之加速效能並不顯著，其詳細之原因仍需進一步之研究探討。圖 5 為 S4a 在單一計算伺服器但不同 CPU 核心數下之計算時間與其在單一顆 GPU 加速下之計算時間，由圖 5 可知 S4a 在單一 CPU 核心下，其單一顆 GPU 的加速效能只有 1.33，之後亦隨 CPU 核心數的增加而遞減，由於 S4a 之自由度比 S4b 小很多，由此可知在求解自由度比較大的問題時，比較能發揮 GPU 的加速效能。圖 6 為 S4a 在單一計算伺服器但不同 CPU 核心數下其不同數量 GPU 之加速效能比較，其與 S4b 趨勢相同，其多顆 GPU 之加速效能亦不顯著。圖 7 為比較 S4b 之平行計算集中在單一計算伺服器的 CPU 和分配在 2 台計算伺服器的 CPU 的計算效能，由圖 7 可知當無 GPU 加速時，在使用 6CPU 核心時，若使用 2 台計算伺服器的 CPU 協同計算(每台計算伺服器使用 3CPU 核心)，其計算效能較只使用單一計算伺服器的 CPU 略佳，另集中在單一計算伺服器使用多顆 GPU 與將多顆 GPU 分配到 2 台計算伺服器的加速效能則差異不大。

五、結論

本文利用國網中心所建置的 GPU 運算平台主機 Formosa 5 做為測試平台，針對不同的題目大小、CPU 核心數和 GPU 數等因素對 ABAQUS 在結構力學之應用進行相關的 GPU 加速效能分析，因為 GPU 硬體架構的特性在 CPU 與 GPU 之間會有資料傳遞的損耗，所以分析結果顯示在求解自由度比較大的問題時，比較能發揮 GPU 的加速效能，而 GPU 的加速效能隨 CPU 核心數的增加而遞減，因此，選擇適當的 CPU 核心數來搭配 GPU 計算可得較佳的整體效益；在多 GPU 之加速效能方面，其加速效能並不顯著，詳細之原因仍需進一步之研究探討；另將平行計算分配在 2 台計算伺服器 CPU 的計算效能比集中在單一計算伺服器 CPU 略佳，但將多顆 GPU 分配到 2 台計算伺服器的加速效能則差異不大。

六、參考文獻

[1] P. Gepner, D. L. Fraser, M. F. Kowalik, and K. Wackowski, "Evaluating new architectural features of the intel xeon 7500 processor for hpc workloads," Computer Science, Vol. 12, pp. 5-17, 2011.

[2] <https://scs.senecac.on.ca/~gpu610/pages/content/ecosy.html>

[3] G. Shyu and G. Deng, and S. Kodiyalam, "GPU computing with abaqus 6.11 and its application in oil & gas industry", SIMULIA Community Conference, Providence, R.I., May, 2012, pp. 470-476.

七、圖片



圖 1 Formosa 5 GPU 運算平台

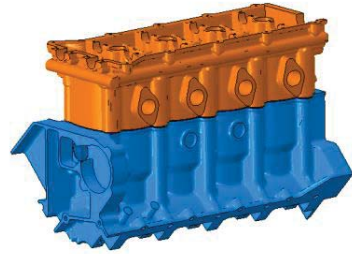


圖 2 計算效能測試模型

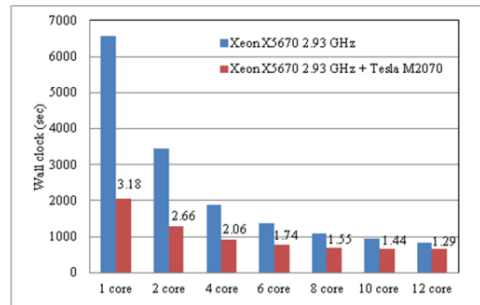


圖 3 S4b 在單一顆 GPU 下之加速效能

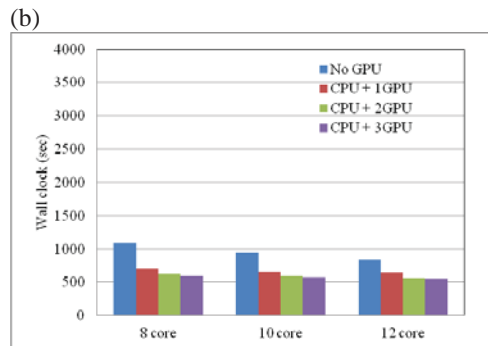
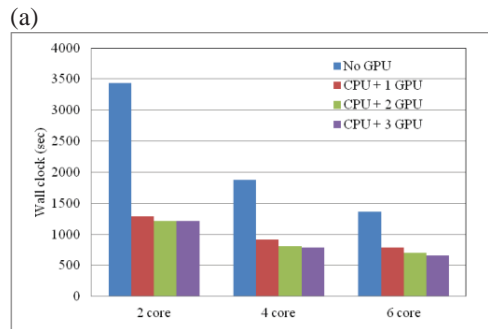


圖 4 S4b 在多顆 GPU 下之加速效能(a)2 core - 6 core(b)8 core - 12 core

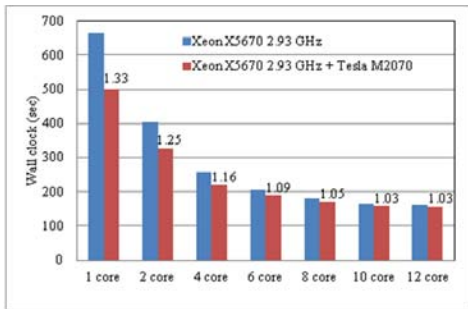


圖 5 S4a 在單一顆 GPU 下之加速效能

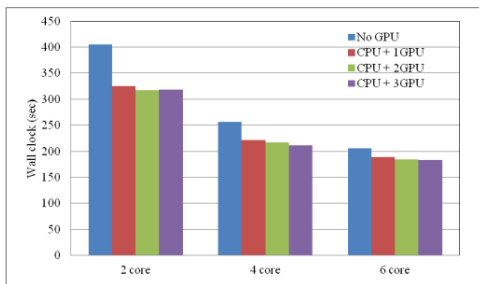


圖 6 S4a 在多顆 GPU 下之加速效能

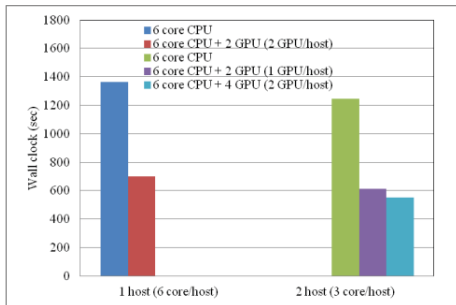


圖 7 跨計算伺服器之計算效能比較(S4b)