

Ansys Fluent na GPU prakticky



NOVÉ TECHNOLOGIE
VÝZKUMNÉ CENTRUM
ZÁPADOČESKÉ UNIVERZITY
V PLZNI

TechSoft

Jindřich Kňourek, Západočeská univerzita v Plzni
Richard Paulas, TechSoft Engineering spol. s r.o.

Za podpory M Computers s.r.o.

Agenda

- **ANSYS FLUENT 2023 R1 na GPU kartách**
 - Jak připravit úlohu pro běh na GPU
 - Jak spouštět úlohu na GPU kartách
- **Porovnání výkonu některých úloh na GPU kartách**
 - Několik benchmarkových úloh
 - Nějaké úlohy z praxe
- **Faktory ovlivňující výpočetní odezvu**
- **Doporučení a zjištění závěrem**

Jak připravit úlohu pro běh na GPU kartách

- **Normálně, jako pro běh na výpočetní stanici nebo na HPC klastru**
 - Poly, tetra, hexa, hexcore, mix
 - Proudění, turbulence, přestup tepla, porézní zóny, moving/sliding mesh
- **Ale je nutno respektovat:**
- **Omezení funkcionalit GPU řešiče**
 - Pressure-velocity coupling jen SIMPLE (coupled bude)
 - Jen nestlačitelné proudění (stlačitelné v beta, ale...)
 - Není multifáze, DPM (v plánu)
 - Expression nepodporovány
- **Omezení rozsahu modelu vzhledem k množství dostupné paměti na kartě**
 - 1 mil poly buněk = ~1,2 GB – v single precision, ve stacionáru
 - Pro single precision a nestacionár 80 GB RAM pojme úlohy okolo 50 mil buněk
 - Double precision má náročnost asi 1,5x vyšší – na paměť i na výpočetní čas
- **Verze 2023 R1 je verze jako každá jiná předchozí**
 - Jiné kontroly kvality sítě – Meshing vs. Solver vs. GPU solver
 - Něco by mělo fungovat, ale nefunguje – např. některé monitory



Jak připravit úlohu pro běh na GPU kartách

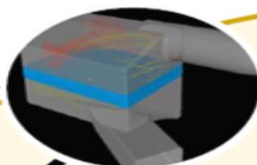
Fully Native Multi-GPU Solver in Fluent

UTILIZE THE POWER OF MULTIPLE GPUS TO ACCELERATE YOUR CFD SIMULATIONS

Beta support for :

- Single/multi-GPU (shared / distributed memory)
- Steady & transient simulations
- Incompressible & subsonic compressible flows
- All mesh types
- Ideal Gas and Materials with variable properties
- Turbulence: standard k-e, SST, GEKO, RKE, SBES
- Solid conduction and CHT
- Porous media
- Windows and Linux

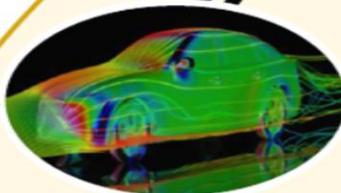
2022/R1



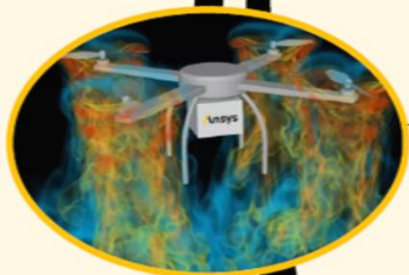
Beta support for :

- Transient scale-resolving simulations
- Non-conformal mesh interfaces
- Moving walls & Moving Reference Frame

2022/R2



2023/R1



All previous features released, along with :

- Enhanced numerics
- Enhanced RANS for robustness and accuracy
- Species transport
- Enhanced LES
- Enhanced monitors: Uniformity, HTC, Porous force, Moments, Volume averaging
- Velocity directions for pressure inlet, Porous jump, Intake fan, Outlet vent, Wall thickness
- Enhanced Handling of unsupported features
- Profiles: Primitive variables for boundary
- Setup time reduction & simplified UI
- Enhanced Materials: Piecewise-linear, Polynomial, Piecewise-Polynomial, Viscosity: Sutherland
- Initialization workflow enhancement
- Launcher enhancement

Beta support for :

- Sliding meshes
- Non-stiff reacting flows

Ansys



Jak spustit úlohu na GPU kartách

- Launcher – pro GUI (Windows i Linux)

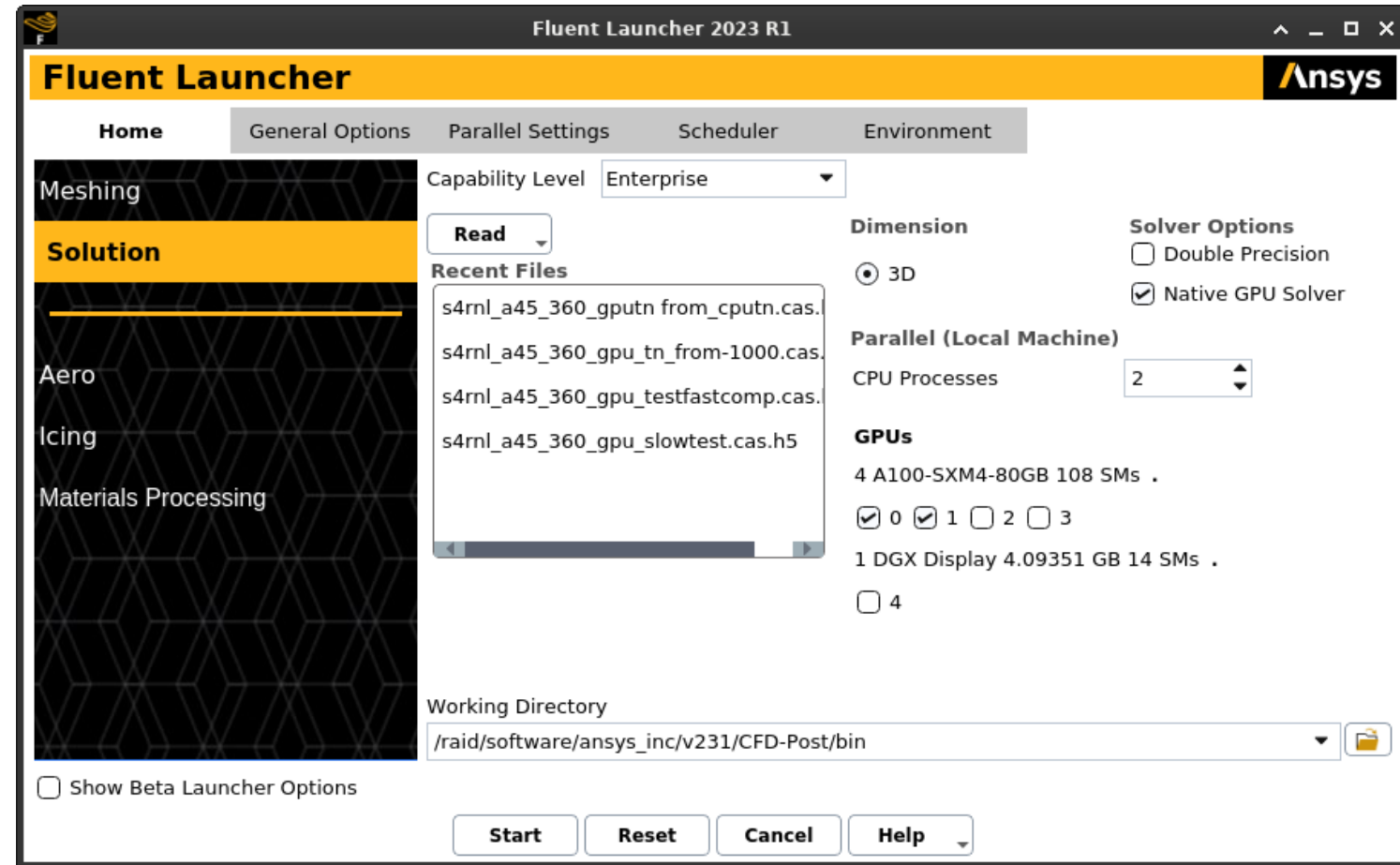
- Z řádky

- `fluent 3d -g -t1 -gpu=0`
- `fluent 3d -g -t1 -gpu=3`
- `fluent 3d -g -t2 -gpu=0,1`

- Počet použitých GPU = počet řídicích CPU

- Jak nespouštět úlohu

- `fluent 3d -g -t8 -gpu=0,1`



Jak úloha běží?

- Zde důkaz, že používá GPU
- Načte se do paměti stroje
- Kontrola kompatibility s GPU
- Upozorní na změny setupu pro GPU
- Běží na GPU
 - Steady
 - Unsteady

```
-----  
ID      Hostname  Core   O.S.      PID      Vendor  
-----  
n0      midas     1/128  Linux-64  3155275  AMD EPYC 7742 64-Core  
host    midas     Linux-64  3155011  AMD EPYC 7742 64-Core  
-----  
MPI Option Selected: intel  
-----  
GPU Solver enabled
```

```
GPU solver defaults are activated for the following unsupported settings  
=====
```

Area	Settings	From	To
solver	coupling scheme	coupled	simple
solver	rhie chow	distance-weighted	momentum-weighted
solver	pressure		second order
solver	density/scheme	QUICK	2st-Order Upwind
solver	temperature/scheme	QUICK	2st-Order Upwind
solver	k/scheme	QUICK	2st-Order Upwind
solver	mom/scheme	QUICK	2st-Order Upwind
solver	omega/scheme	QUICK	2st-Order Upwind
solver	residual scaling	global	local

```
> it 100  
Preparing GPU solver, please wait ...  
-----  
Rank  PID      Core  OS      Host  Device  Name          Version  Memory(GB)  Bandwidth(GB/s)  Cores  
-----  
0      3155275  1/128  lnamd64  midas  0/1     NVIDIA A100-SXM4-80GB  8.0      79.1849      1944.58          108x64  
-----
```



Jak monitorovat úlohu na GPU kartách

- Nástroj na monitorování stavu GPU je **nvidia-smi**
- Přehled vytížení
 - Výkon
 - Paměť
 - Spotřeba
- Přehled běžících procesů
- Správce úloh nestačí

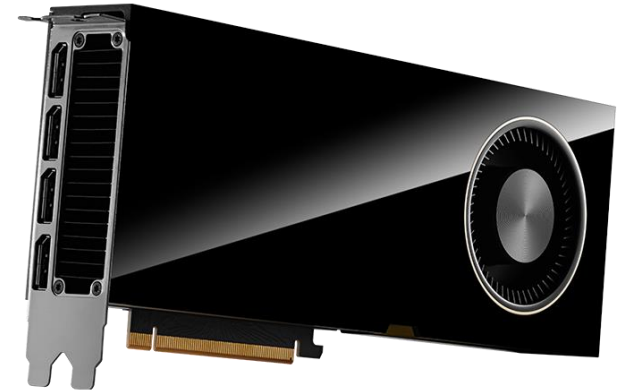
```
Tue May 23 22:18:48 2023
+-----+
| NVIDIA-SMI 525.60.13      Driver Version: 525.60.13      CUDA Version: 12.0      |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
| GPU  Name                Persistence-M| Bus-Id        Disp.A | Volatile Uncorr. ECC |
| Fan  Temp  Perf    Pwr:Usage/Cap|      Memory-Usage | GPU-Util  Compute M. |
|                                           |              | MIG M. |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|  0   NVIDIA A100-SXM...  Off          | 00000000:01:00.0 Off  |             0        |
| N/A   63C   P0     194W / 275W | 4013MiB / 81920MiB | 76%      Default |
|                                           |              | Disabled |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|  1   NVIDIA A100-SXM...  Off          | 00000000:47:00.0 Off  |             0        |
| N/A   62C   P0     162W / 275W | 9127MiB / 81920MiB | 77%      Default |
|                                           |              | Disabled |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|  2   NVIDIA A100-SXM...  Off          | 00000000:81:00.0 Off  |             0        |
| N/A   54C   P0      69W / 275W |   3MiB / 81920MiB |  0%      Default |
|                                           |              | Disabled |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|  3   NVIDIA DGX Display  Off          | 00000000:C1:00.0 On   |             0        |
| 33%   39C   P8      N/A /  50W |  746MiB /  4096MiB |  0%      Default |
|                                           |              | N/A      |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|  4   NVIDIA A100-SXM...  Off          | 00000000:C2:00.0 Off  |             0        |
| N/A   63C   P0     270W / 275W | 5097MiB / 81920MiB | 80%      Default |
|                                           |              | Disabled |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
+-----+
| Processes: |
| GPU  GI    CI          PID  Type  Process name                        GPU Memory |
|      ID   ID              |          |      |                                     Usage     |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
|  0   N/A  N/A         116504  C    ...2.0/bin/app.solver.double       4010MiB |
|  1   N/A  N/A         2618278  C    ...2.0/bin/app.solver.double       9124MiB |
|  3   N/A  N/A           5969  G    /usr/lib/xorg/Xorg                  142MiB |
|  3   N/A  N/A         186855  G    ...nux-amd64/PostGui_ogl.exe        30MiB |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
```



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- Přehled testovaných karet

GPU	RAM [GB]	CUDA CPUs	FP32 [teraFLOPS]
A16	4 x 16	4 x 1280	4 x 4,5
A40	48	84 x 128	37,4
RTX A6000	48	84 x 128	37,4
A100 – PCI	40	108 x 64	19,5
A100-SXM4 *	80	108 x 64	19,5
RTX A6000 Ada Generation	48	142 x 128	91,1
H100 – PCI	80	144 x 128	67



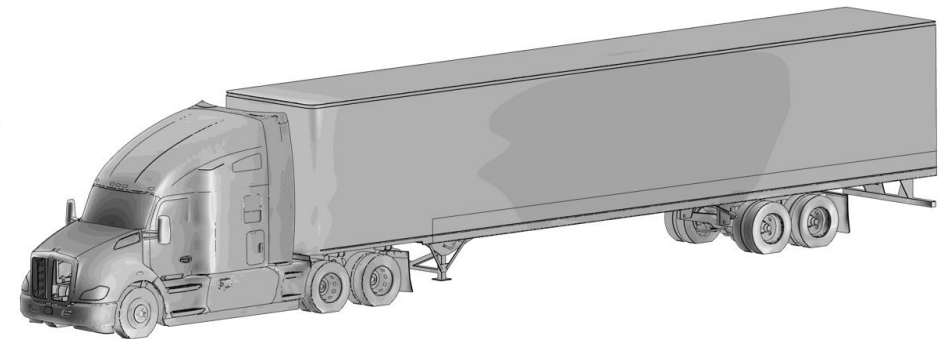
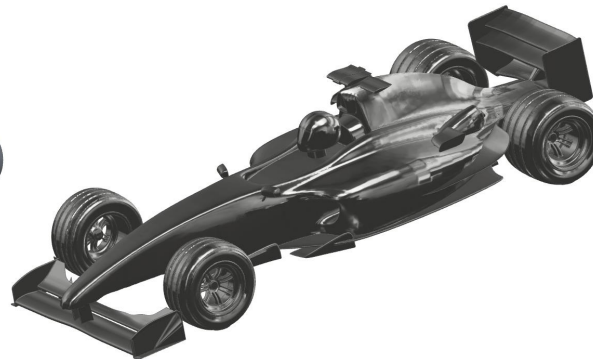
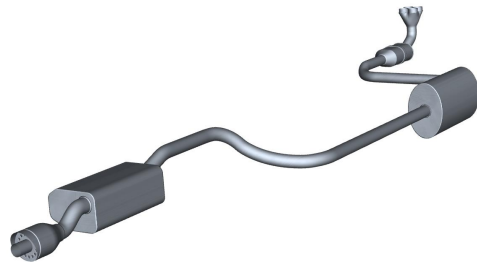
* GNU Linux Ubuntu 20.04, jinak MS Windows 10



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- Přehled srovnávacích úloh

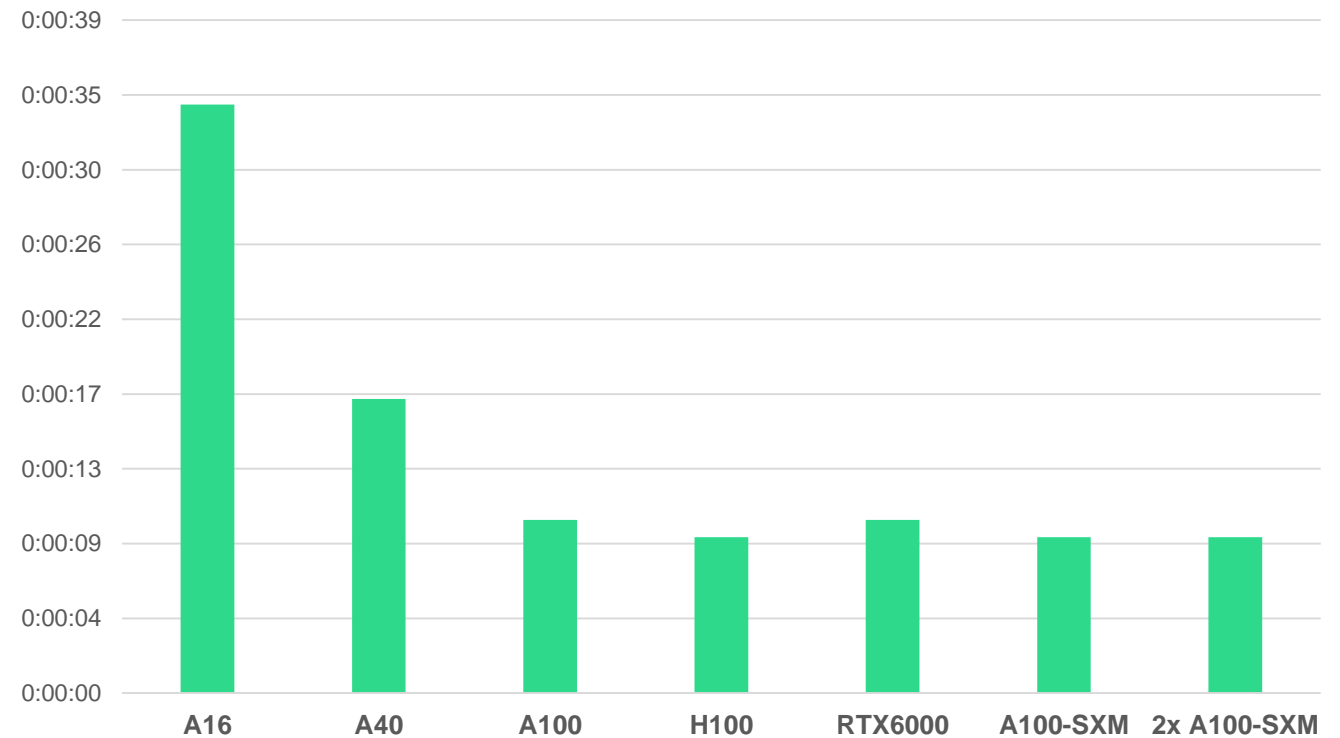
úloha	velikost	specifikace
Sedan	4 M tetra	externí aerodynamika; k-epsilon + std wall function; 2nd order discretization
Exhaust	33 M tetra	interní; přestup tepla; stlačitelné; porézní zóna, SST k-w; 2nd order discretization
F1 car	140 M tetra	externí aerodynamika; k-epsilon + non-eq. wall function; 2nd order discretization
Truck 17M	17 M poly	externí aerodynamika; porézní zóna; SST k-w; 2nd order discretization
Truck 64M	64 M poly	



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- Sedan 4M – výsledky: čas na provedení 100 iterací
- Shrnutí – moc malá úloha na pořádné prověření

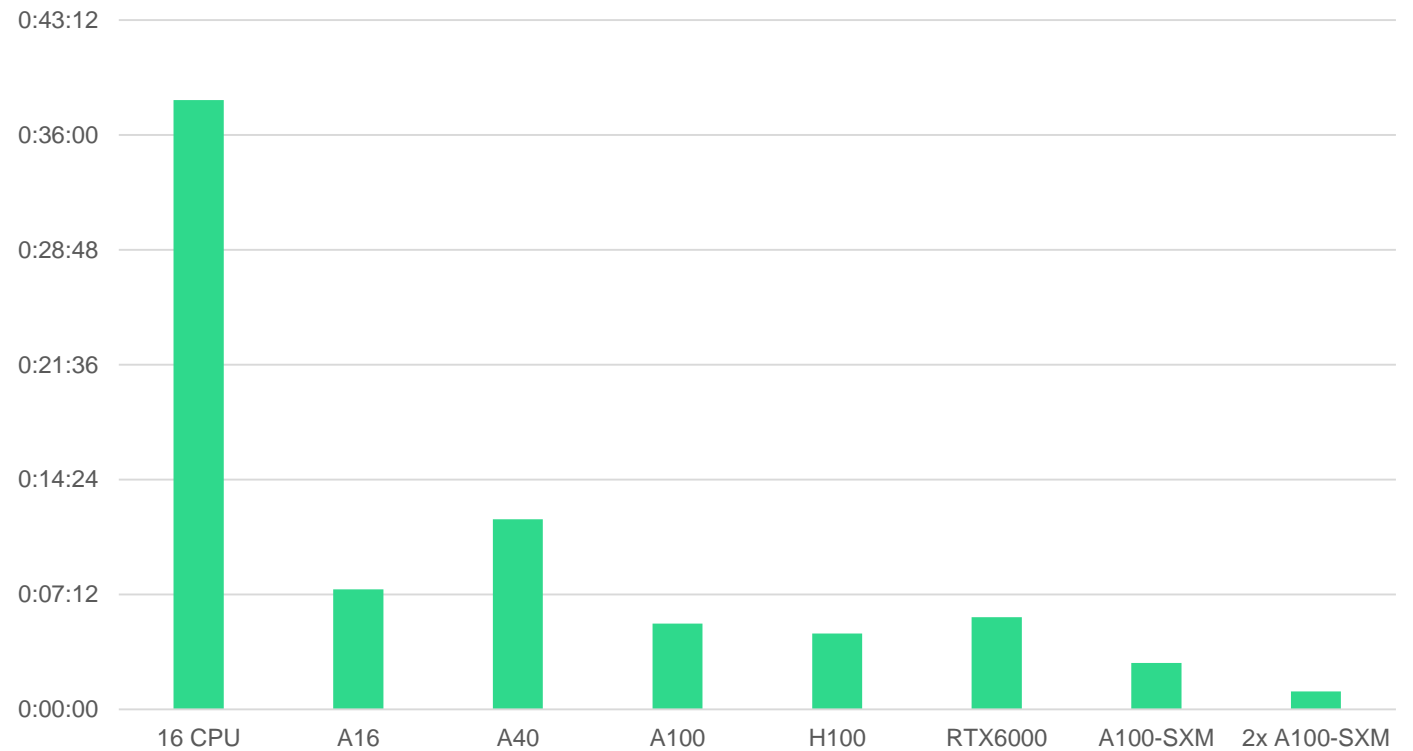
GPU	čas [min:sec]
A16	00:34
A40	00:17
A100 – PCI	00:10
A100-SXM4	00:09
2x A100-SXM4	00:09
RTX A6000 Ada Generation	00:10
H100 – PCI	00:09



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- Exhaust 33M – výsledky: čas na provedení 100 iterací
- Stlačitelnost – problémy s chováním řešiče – rozdílné na Win vs. Linux
- Shrnutí – A16 zajímavá; malé rozdíly mezi A100 a H100; A100-SXM vítí

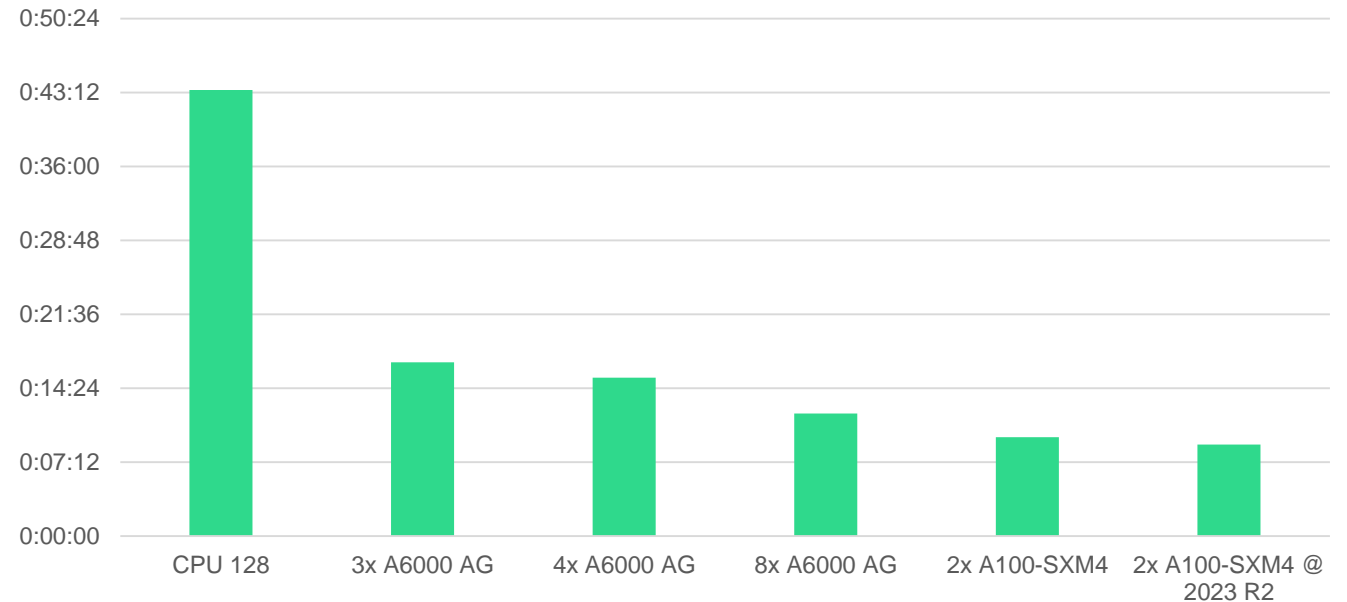
GPU	čas [min:sec]
CPU 16 jader	38:12
A16	07:31
A40	11:54
A100 – PCI	05:22
A100-SXM4	02:54
2x A100-SXM4	01:07
RTX A6000 Ada Generation	05:46
H100 – PCI	04:45



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- F1 car 140M – výsledky: čas na provedení 500 iterací
- Read case: 128 CPU jader: 2 minuty; **GPU: 40 minut!**
- ANSYS FLUENT 2023 R2 trochu lepší než R1
- Shrnutí – 2x A100-SXM jsou lepší než 8x A6000 AG

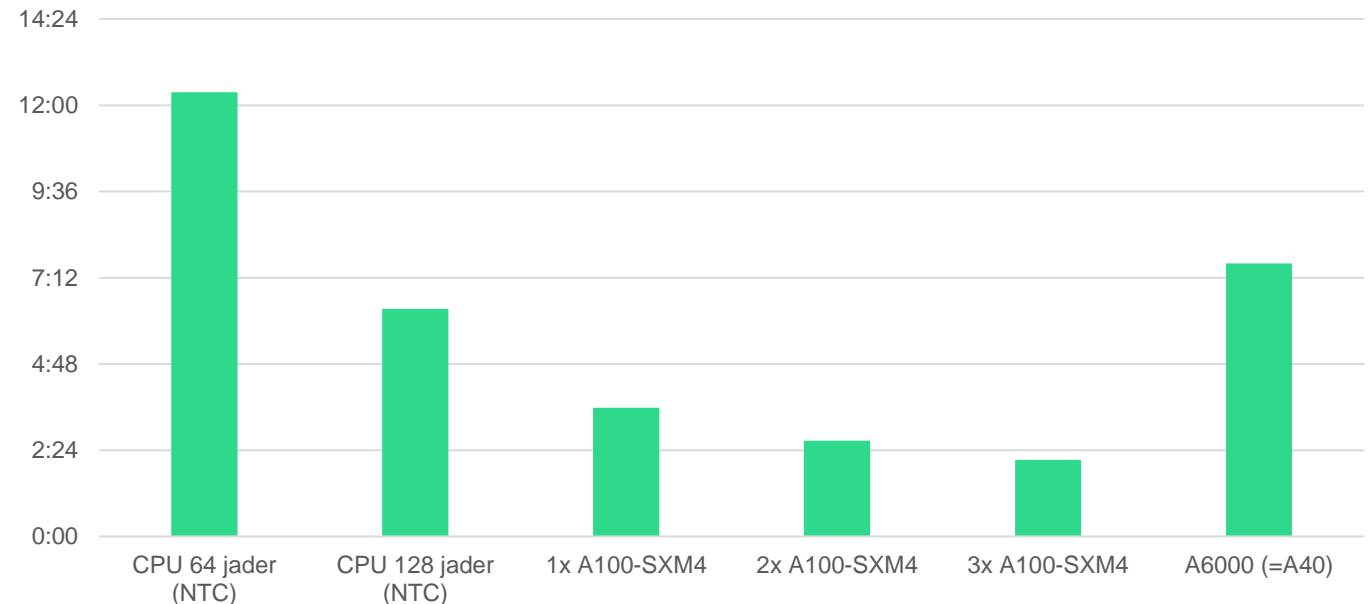
GPU	čas [min:sec]
CPU 128 jader (NTC)	43:27
3x RTX A6000 Ada Generation	16:55
4x RTX A6000 Ada Generation	15:25
8x RTX A6000 Ada Generation	11:55
2x A100-SXM4	09:38
2x A100-SXM4 @ 2023 R2	08:55



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- Truck 17M – výsledky: čas na provedení 500 iterací
- Poměr výkonů stacionárního a nestacionárního řešiče stejný
- Shrnutí – 1 karta A100-SXM je jako 400 CPU jader

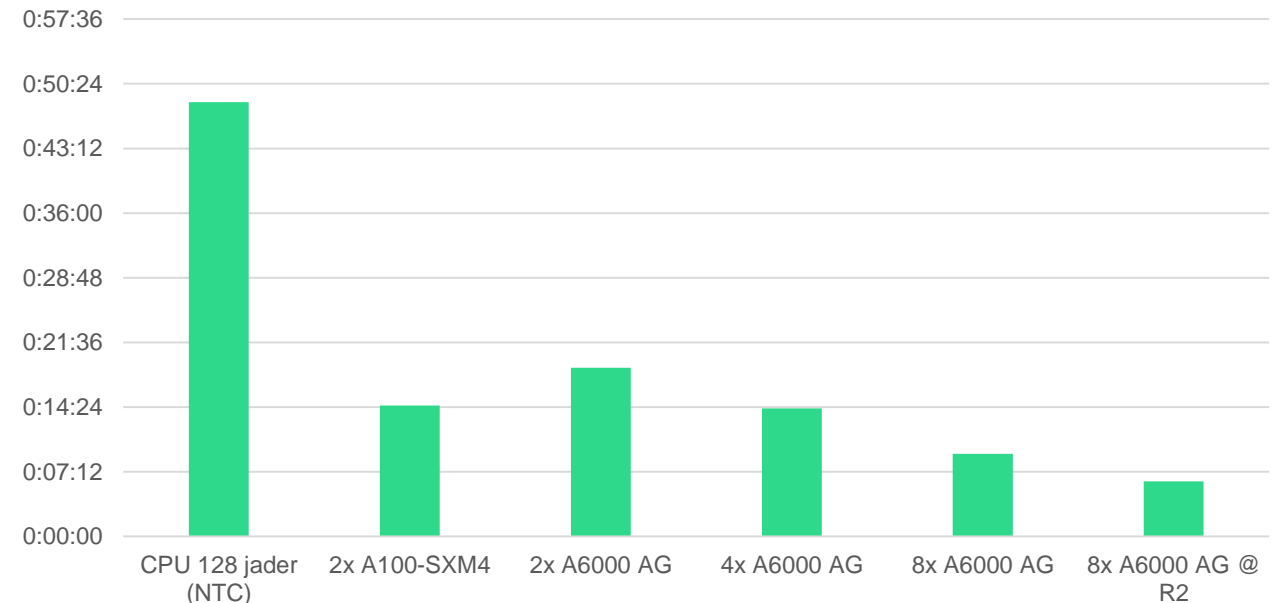
GPU	čas [min:sec]
CPU 64 jader (NTC)	12:22
CPU 128 jader (NTC)	06:20
1x A100-SXM4	03:35
2x A100-SXM4	02:40
3x A100-SXM4	02:08
A6000 (=A40)	07:36



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- Truck 64M – výsledky: čas na provedení 1000 iterací
- Poměr výkonů stacionárního a nestacionárního řešiče stejný
- Shrnutí – 2 karty A100-SXM jsou stejně výkonné jako 4 karty A6000 AG
- Zrychlení u verze 2023 R2

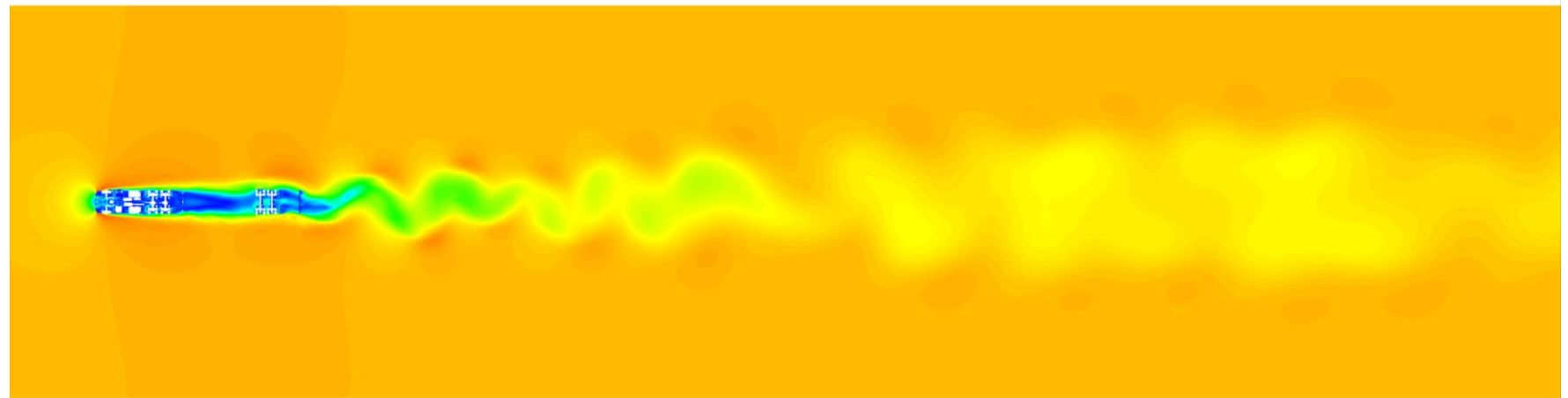
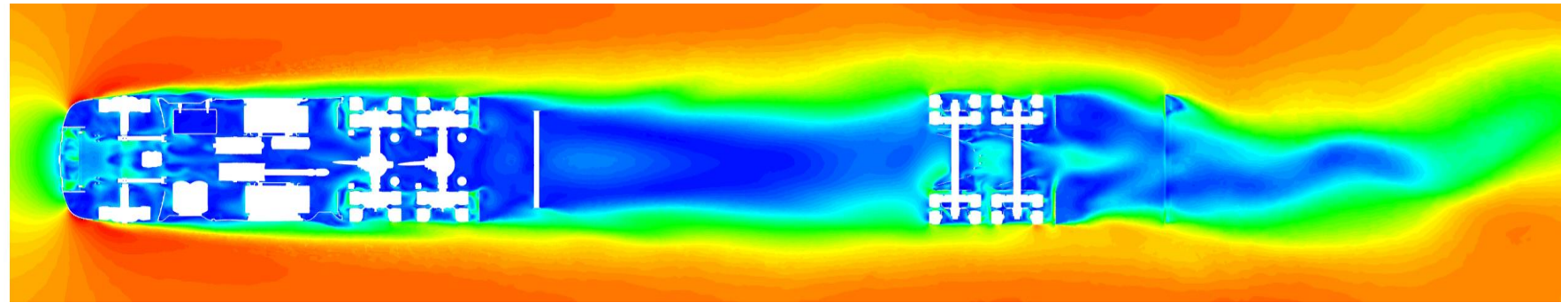
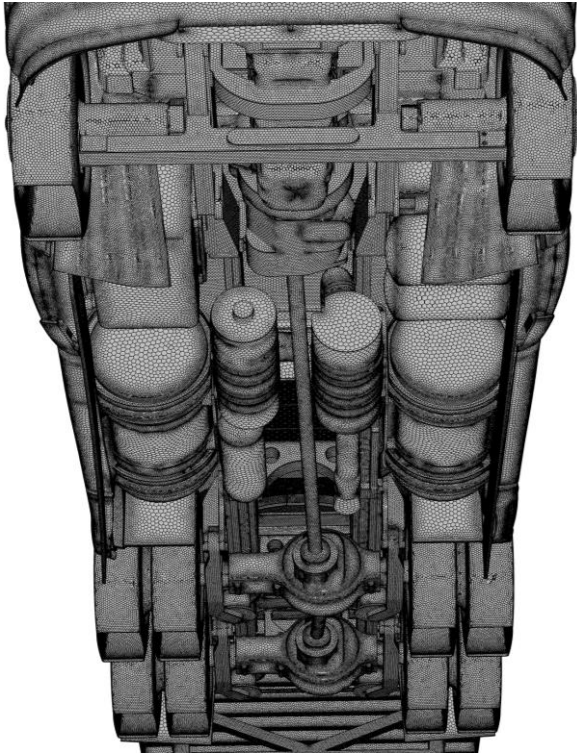
GPU	čas [min:sec]	
CPU 128 jader (NTC)	0:48:20	
2x A100-SXM4	0:14:34	
2x A6000 AG	0:18:48	100%
4x A6000 AG	0:14:15	75%
8x A6000 AG	0:09:12	50%
8x A6000 AG @ R2	0:06:08	



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

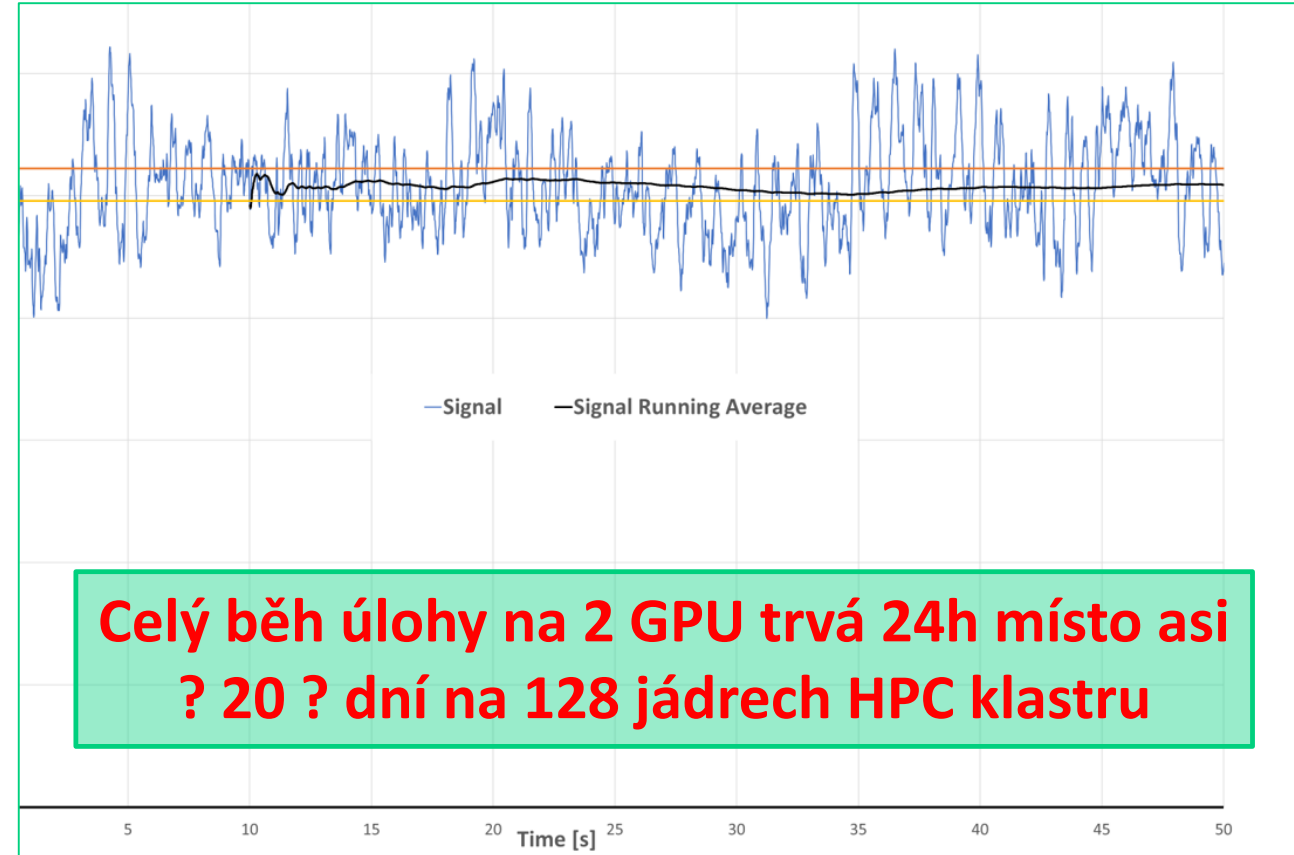
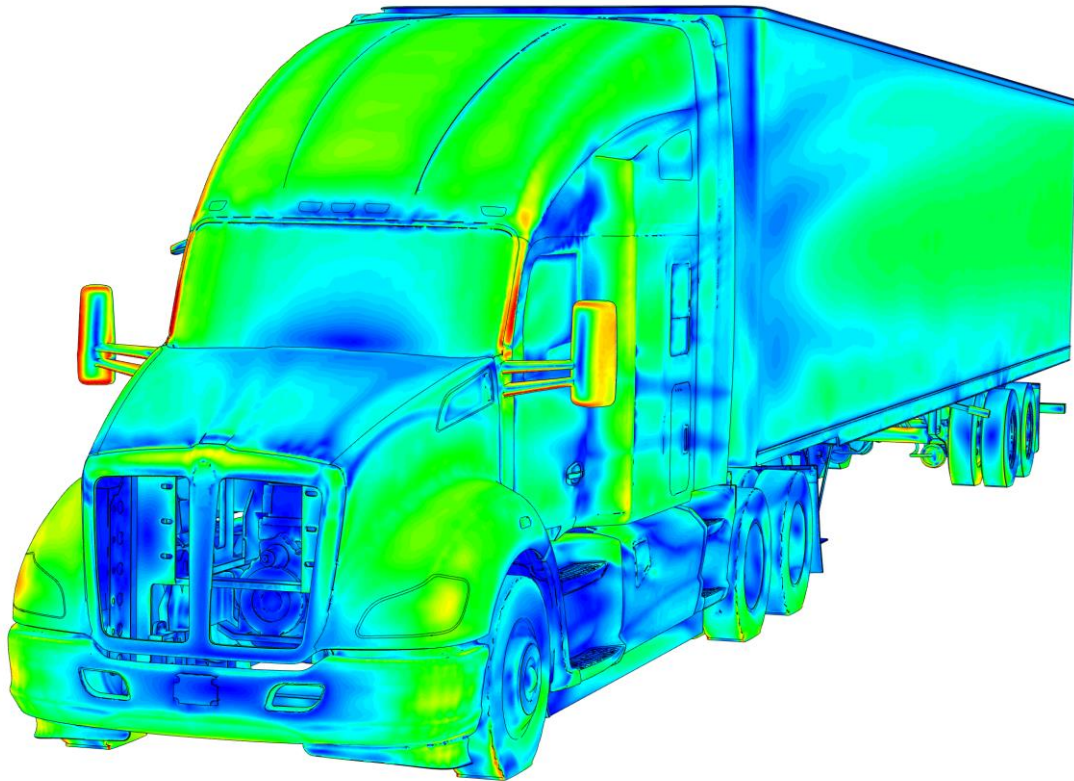
- **Truck poly 64M motivace**

- Detaily, velká doména
- Nestacionární řešič



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

- **Truck poly 64M motivace**
 - Nestacionární řešič



Co se stane, když ...

- ... se zajímám o frekvenci monitorování iterací a výsledků
- **Výpisy reziduí každou iteraci**
 - Zpomalí výpočetní odezvu málo: **03:48**
 - Zapnutí intervalu na 20: **03:35**
- **Výpisy hodnot monitorovaných veličin (síla na truck) každou iteraci**
 - Zpomalí výpočetní odezvu výrazně: **06:10**
 - Zapnutí intervalu na 20: **03:43**
- **Na HPC klastru nejsou v tomto rozdíly – obsluhuje to více jader**
 - Na GPU jen 1, 2, 3 procesy
- **Závěr**
 - Co nejméně výstupů
 - Sledovat doporučení ANSYSu, návody

```
/solve set report-interval 20
```



Co se stane, když ...

- ... použiji víc CPU jader než mám GPU karet
- Celé se to pokazí:
- Získám rychlé čtení dat a i zápis
- Za cenu výrazného zhoršení výpočetní odezvy
- Vhodné tak pro veliké úlohy pro testování nastavení, ne pro simulace
- Příklad:
 - 1x A100-SXM4 @ 1core: **03:35**
 - 1x A100-SXM4 @ 2cores: **05:29**
 - 1x A100-SXM4 @ 8cores: **09:19**



Jak FLUENT vidí GPU karty

Zdá se, že výkon FLUENTu koresponduje nejvíc s propustností paměti – paralela s chováním na HPC klastrech

- Informace o propustnosti přímo z výpisu ANSYS FLUENTu
 - (V závorce hodnoty NVIDIA)

GPU	RAM [GB]	CUDA CPUs	Memory bandwidth [GB/s]	Interconnection bandwidth [GB/s]	Interconnection latency [usec]
A16	16	10 x 128	191 (4x 200)		
A40	48	84 x 128	663 (696)		
RTX A6000	48	84 x 128	733 (768)		
A100-PCI	40	108 x 64	1483 (2000)	1,78	26,6
A100-SXM4	80	108 x 64	1944 (2000)	4,44	8,19
RTX A6000 Ada Generation	48	142 x 128	915 (864)	0,77	24,4
H100 – PCI	80	144 x 128	1944 (2000)		
CPU HPC klastr			5	1,6 – 5 – 16	1,6



Fluent GPU Solver Licensing

- HPC licensing for the Fluent GPU solver is now based on the total number of streaming multiprocessors (SMs) used across all GPU cards
 - GPU cards are comprised of many SMs, and each SM contains many CUDA cores
 - More-powerful GPU cards typically contain more SMs



Tesla P100 Layout: 56 SMs, 3584 CUDA cores

GPU Card	Number of SMs
Quadro P6000	28
Quadro RTX 4000	36
Tesla P100	56
Quadro RTX A5000	64
Quadro GV100	80
Tesla V100	80
Tesla A100	108

Numbers of streaming multiprocessors in several common GPU cards



Fluent GPU Solver Licensing

- CFD Enterprise-level capabilities* are required to use the Fluent Multi-GPU Solver
- 40 SMs are included with CFD Enterprise
- Additional SMs can be enabled with HPC licensing
 - 1 HPC Task = 1 SM
 - HPC Packs scale as usual (e.g., 3 Packs enable 128 additional SMs)

# SM's	HPC Workgroups	HPC Packs
1 – 40	0	0
41 – 48	1 – 8	1
49 – 72	9 – 32	2
73 – 168	33 – 128	3
169 – 552	129 – 512	4
553 – 2088	513 – 2048	5

Notes:

- Fluent pre/post-processing for the GPU solver can use multiple CPUs without consuming additional HPC tasks
- When using multiple GPUs, licensing is based on the total number of SMs across all GPUs irrespective of the number of GPUs
- On startup, the Fluent TUI displays the number of SMs in use, e.g.: GPU Solver SMs: 56
- All available SMs are used on a GPU card. It is not possible to restrict usage to a subset of SMs.

* Provided by Ansys CFD Enterprise, Ansys CFD Enterprise Solver, Ansys Mechanical CFD or Ansys Mechanical CFD Maxwell



Přínosy GPU řešiče

- **Vhodné pro řadu úloh**
 - Dlouhé simulace – typicky nestacionární s velkým počtem časových kroků
 - Lze zapnout data sampling
- **Co je nevhodné s GPU řešičem provádět**
 - Moc monitorovat
 - Často zapisovat data
 - Používat více karet pro malé úlohy
 - Brzo to vzdát kvůli nestabilitám nebo podivnému chování
- **Co nelze s GPU řešičem provádět**
 - Nelze použít jen část GPU karty – všechno, nebo nic
 - Provádět postprocessing na běhu



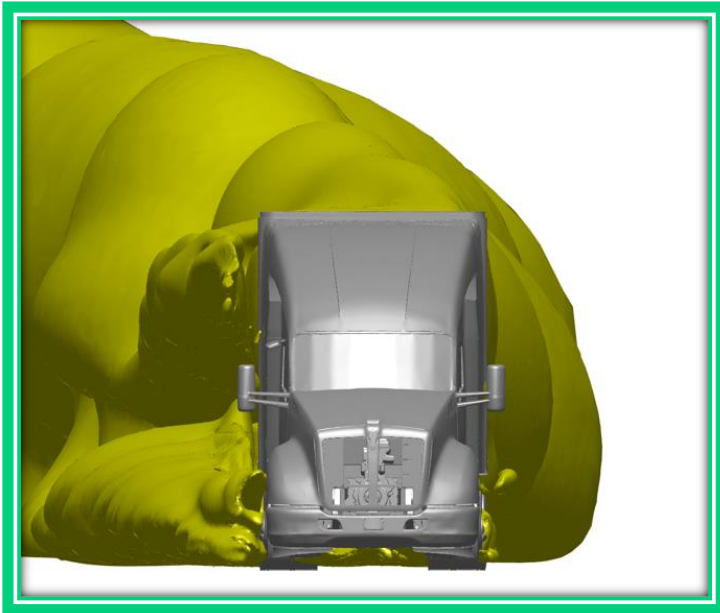
Faktory ovlivňující výpočetní odezvu

- **Výběr konkrétní karty**
 - Lze ovlivnit – nejlépe testováním pro typickou úlohu
- **Operační systém a drivery**
 - Lze částečně ovlivnit instalací doporučených balíčků
- **Konkrétní aplikace**
 - Nelze ovlivnit, lze jen doufat, že to bude lepší a lepší
 - 2023 R2 je výkonnější o 15% – je kompilována lépe?
 - Vliv portace vidíme i na HPC klastru (Linux)
- **Charakter počítané úlohy**
 - Velikost, složitost, zapojení různých modelů (stlačitelnost, porozita, teplo)
 - Lze jen korigovat s přihlédnutím k nutnosti dosáhnout potřebných výstupů

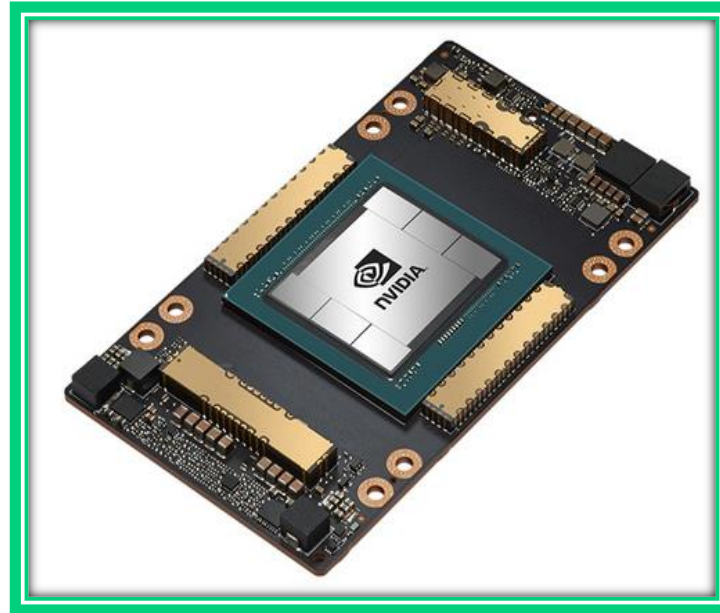


Doporučení a zjištění závěrem

- **Před nákupem zkoušejte a testujte**
 - Pro konkrétní aplikaci, použití, rozpočet na HW i na SW
- **Těšte se na nový release ANSYS FLUENTu – GPU řešiče a na nový GPU hardware**
- **A když se potomek zeptá?**



Čím se chcete zabývat ...

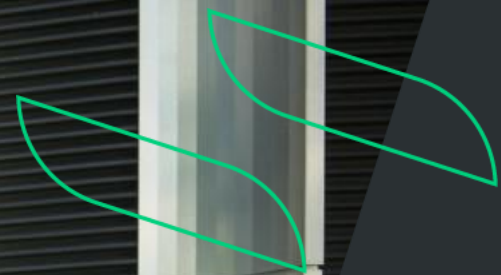


... čím se doopravdy zabýváte ...



... jak to komunikujete





*Jsme připraveni Vám
pomoci vyřešit Vaše
úlohy*

Backup Slides



Porovnání výkonu úloh na různých GPU kartách

Sedan

- 4 mil cells
- External aerodynamic
- Turbulent viscous flow
- Stationary
- Constant air density
- Symmetry boundary condition
- Velocity inlet
- Pressure outlet

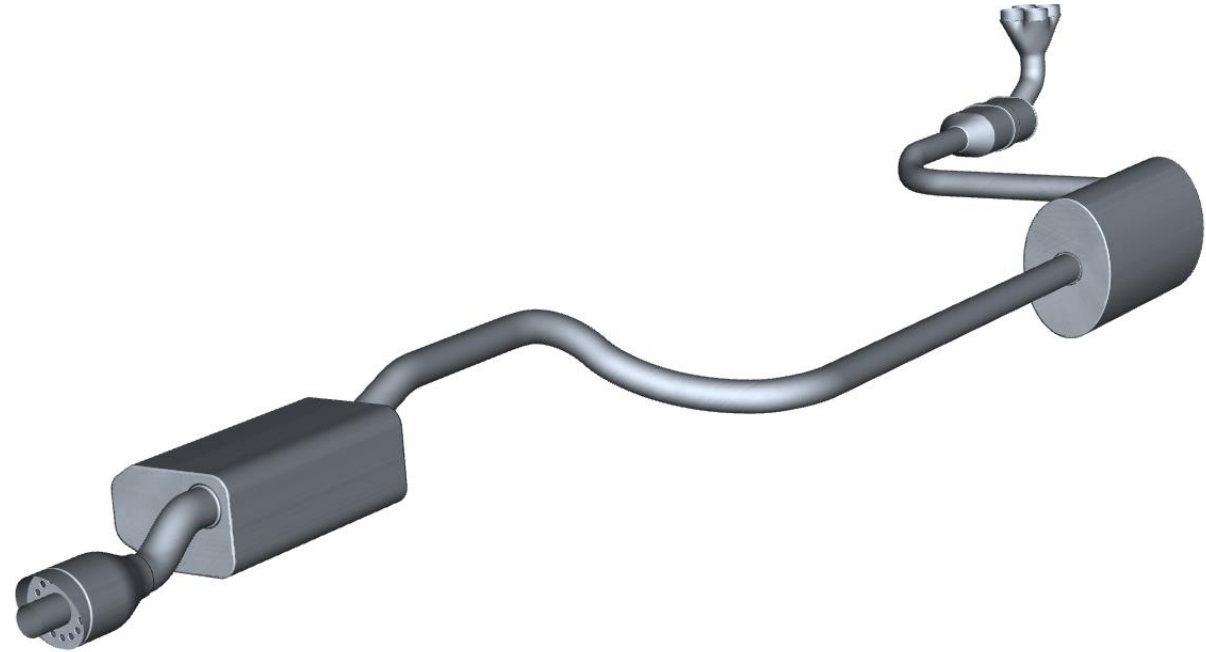


Dimenze	Precision	Time	Energie	Turbulence
3D	Single	Stacionar	no	k-epsilon Standard Wall Function
Typ	Pressure-velocity coupling	Gradient	Momentum, turbulent diskretization	Pressure discretization
Pressure based	Simple	Least Squares Cell Based	Second order	Second order



Exhaust system

- Internal aerodynamic
- Turbulent viscous flow
- Stationary
- Ideal gas
- Porous zone, laminar zone
- Mass flow inlet
- Pressure outlet
- 33 mil cells



Dimenze	Precision	Time	Energie	Turbulence
3D	Single	Stacionar	yes	SST k-omega Standard Wall Function

Typ	Pressure-velocity coupling	Gradient	Momentum, turbulent diskretization	Pressure discretization
Pressure based	Simple	Least Squares Cell Based	Second order	Second order



F1 Car

- External aerodynamic
- Turbulent viscous flow
- Stationary
- Air konstant density
- Symmetry
- Velocity inlet
- Pressure outlet
- 140 mil cells



Dimenze	Precision	Time	Energie	Turbulence
3D	Single	Stacionar	no	K-epsilon Non-Equilibrium Wall Function

Typ	Pressure-velocity coupling	Gradient	Momentum, turbulent diskretization	Pressure discretization
Pressure based	Simple	Least Squares Cell Based	Second order	Second order

