

Wydział Elektroniki, Automatyki, Informatyki i Elektroniki
Katedra Informatyki

Autoreferat rozprawy doktorskiej

Algorytmy symulacji płynów rzeczywistych bazujące na modelach DPD oraz SPH dla komputerów z pamięcią współdzieloną oraz rozproszoną

mgr inż. Paweł Wróblewski

Promotor:

dr hab. inż. Krzysztof Boryczko, prof. n. AGH,
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Wydział EAIiE

Recenzenci:

dr hab. inż. Wojciech Jędruch, prof. n. PG,
Politechnika Gdańska, Wydział ETiI

dr hab. inż. Witold Dzwineł, prof. AGH,
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Wydział EAIiE

Cel i zakres pracy

Nowoczesne modele płynów pozwalają uwzględnić szereg aspektów symulowanych układów. W szczególności dotyczy to problemów z odpowiednim uwzględnieniem wielkości termodynamicznych modelowanego układu, właściwą realizacją przepływów w naczyniach o złożonych kształtach, czy modelowania zjawisk zachodzących w różnych skalach przestrzenno-czasowych. Wspomniane modele, umożliwiające symulacje wielu zagadnień oraz interakcji między nimi, charakteryzują się dużym stopniem skomplikowania, co przekłada się na trudniejszą ich implementację. Uzyskanie akceptowalnych czasów obliczeń wymaga użycia nowoczesnych architektur komputerowych i stosowania na nich efektywnych, dopasowanych do nich, algorytmów. Dotyczy to szczególnie implementacji równoległej.

Jednym z możliwych kryteriów, według których można podzielić architektury komputerowe, jest sposób dostępu do pamięci operacyjnej. Współczesne, wieloprocesorowe architektury komputerowe bazują na modelu z pamięcią współdzieloną lub na modelu z pamięcią rozproszoną. W przypadku modelu z pamięcią współdzieloną powszechnie uważa się, iż nakład pracy programistycznej koniecznej do uzyskania względnie efektywnego algorytmu jest dzięki dostępnym narzędziom niewielki. Niestety, uzyskiwane wartości wskaźników obliczenia równoległego w wielu przypadkach nie pokrywają się z oczekiwaniami. W modelu z pamięcią rozproszoną dominuje paradygmat programowania oparty o przesyłanie komunikatów. Znajduje się on w pewnej opozycji do wspomnianego wcześniej modelu z pamięcią współdzieloną. Wymaga relatywnie dużego nakładu pracy programistycznej. Pozwala jednak na osiąganie wyśrubowanych wartości współczynników obliczenia równoległego. W wielu przypadkach stwierdzenie, który z modeli będzie właściwy dla rozwiązywanego problemu nie jest możliwe wprost. Stąd, celem pracy jest m.in. określenie, który ze wspomnianych modeli jest bardziej efektywny w zastosowaniu do modelowania płynów złożonych przy pomocy metod cząstek.

Głównym celem omawianej rozprawy doktorskiej jest zaproponowanie efektywnej implementacji równoległej nowoczesnych modeli symulacji płynów, takich jak SPH, DPD oraz SDPD. Przedstawione w pracy rezultaty można podzielić na dwie grupy. W części algorytmicznej, należą do nich:

- zaproponowanie, w oparciu o istniejące metody, nowych algorytmów równoległych symulacji metodą oddziałujących cząstek,
- sformułowanie, na podstawie porównania wskaźników obliczenia równoległego dla implementacji z wykorzystaniem środowisk OpenMP oraz MPI, ogólnych przesłanek dotyczących metod i sposobów zrównoleglania algorytmów symulacji metodą cząstek wykorzystujących paradygmaty programowania dla komputerów z pamięcią współdzieloną i rozproszoną,
- zaproponowanie metod dynamicznej dekompozycji pudła obliczeniowego w celu równoważenia obciążenia dla algorytmów równoległych wykorzystujących środowiska programowania pracujące z wykorzystaniem przesyłania komunikatów.

W części dotyczącej zastosowań w dziedzinie symulacji komputerowych należy wskazać na:

- efektywną realizację teoretycznych, nieizotermicznych modeli oddziałujących cząstek, a w szczególności modelu SDPD,
- zaproponowanie oraz weryfikację nowego modelu lepkości w metodzie SPH służącego modelowaniu płynów o charakterze nie-newtonowskim,
- zaproponowanie modyfikacji metody SPH umożliwiającej symulowanie napięcia powierzchniowego cieczy,
- wykorzystanie modeli nieizotermicznych do modelowania zjawisk nierównowagowych, takich jak na przykład transport ciepła.

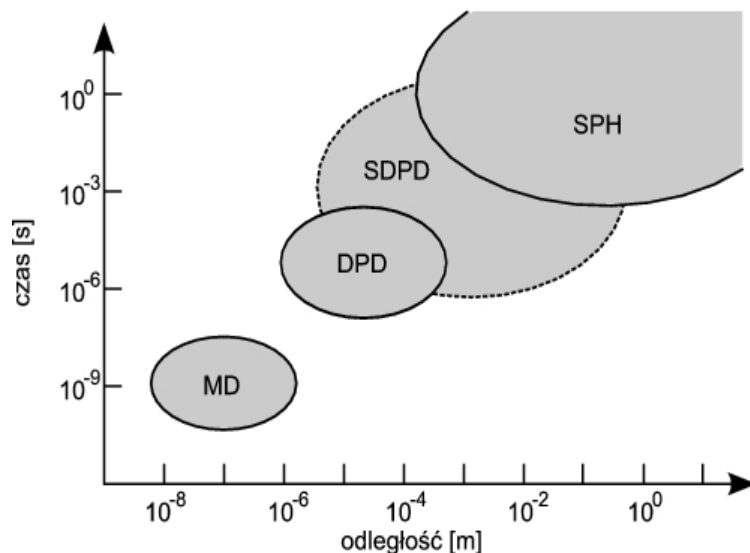
Przedstawione powyżej zagadnienia oraz metodologia ich rozwiązania zostały tak sformułowane, aby wykazać ogólną tezę omawianej rozprawy doktorskiej, która brzmi następująco:

Nowoczesne teoretyczne modele płynów mogą zostać efektywnie zaimplementowane z wykorzystaniem paradygmatów programowania dla komputerów z pamięcią współdzieloną oraz rozproszoną. Tak opracowane algorytmy mogą służyć symulacji zjawisk złożonych zachodzących w różnych skalach przestrzenno-czasowych.

Metody cząstek

Algorytmy symulacji płynów prezentowane w omawianej pracy opierają się na bezsiatkowych metodach cząstek. Oddziaływanie cząstek płynu w rozpatrywanych modelach ma charakter krótkozasięgowy, co determinuje algorytmy obliczania sił oddziaływania. W pracy przedstawiono podstawowe zagadnienia symulacji metodą oddziałujących cząstek. Przedstawiono również podstawy algorytmiczne takich symulacji. Wprowadzono podstawowe pojęcia, podział systematyczny metod cząstek oraz przedstawiono podstawowe informacje dotyczące technik implementacji. Opis konkretnych metod oraz szczegóły ich implementacji zostały rozwinięte w poszczególnych rozdziałach pracy.

Przedmiotem rozważań są zarówno metody dobrze udokumentowane i szeroko stosowane, do których można zaliczyć klasyczną dynamikę molekularną (MD), dyssypatywną dynamikę cząstek (DPD) oraz hydrodynamikę cząstek wygładzonych (SPH), jak i te, które zostały wyprowadzone stosunkowo niedawno i nie znalazły jeszcze, głównie ze względu na złożoność, szerokiego zastosowania. Przykładem tych ostatnich może być wygładzona dyssypatywna dynamika cząstek (SDPD). Opisując wybrane modele oddziaływań zwrócono uwagę na zakres ich zastosowań. Dokonano również przeglądu najczęściej stosowanych metod rozwiązywania równań ruchu oraz przeprowadzono dyskusję ich stosowalności w różnych skalach przestrzenno-czasowych. Umieszczenie omówionych w pracy metod na tle skal przestrzenno-czasowych przedstawiono na rysunku 1. Dla każdej metody podano również przykładowe zastosowania.



Rys. 1. Zakres zastosowania metod symulacji omawianych w rozprawie.

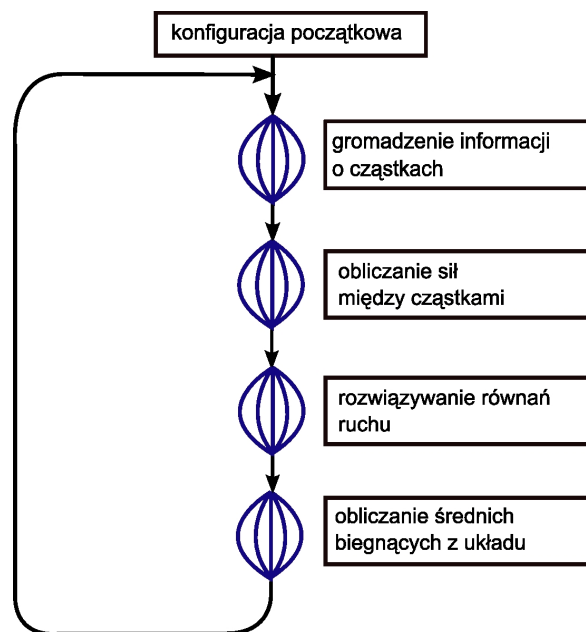
Aspekty implementacji sekwencyjnej

Opisane w pracy metody cząstek wymagają ich efektywnej implementacji. Dotyczące jej zagadnienia obejmują zarówno dobór struktur danych, wybór właściwych algorytmów (np. znajdowania sąsiadów cząstki czy rozwiązywania równań ruchu) jak również zapis instrukcji programu realizujących wyznaczenie wartości zmiennych charakterystycznych modelu. Dla zapewnienia poprawności symulacji istotne są również wartości parametrów fizycznych modelowanego układu, takich jak np. temperatura czy krok czasowy. W rozprawie zostały przedstawione, dla każdej z metod, zasady doboru wielkości kroku czasowego. Dla metody SPH omówiono zasady doboru funkcji ważącej mającej istotny wpływ na właściwości symulowanej cieczy. Opisano również zagadnienie budowy konfiguracji początkowej symulowanego układu. Szczegółowo przedstawiono przebieg jednego kroku pętli głównej symulacji wraz z wykorzystywanymi zmiennymi, strukturami danych oraz podziałem na poszczególne bloki obliczeniowe.

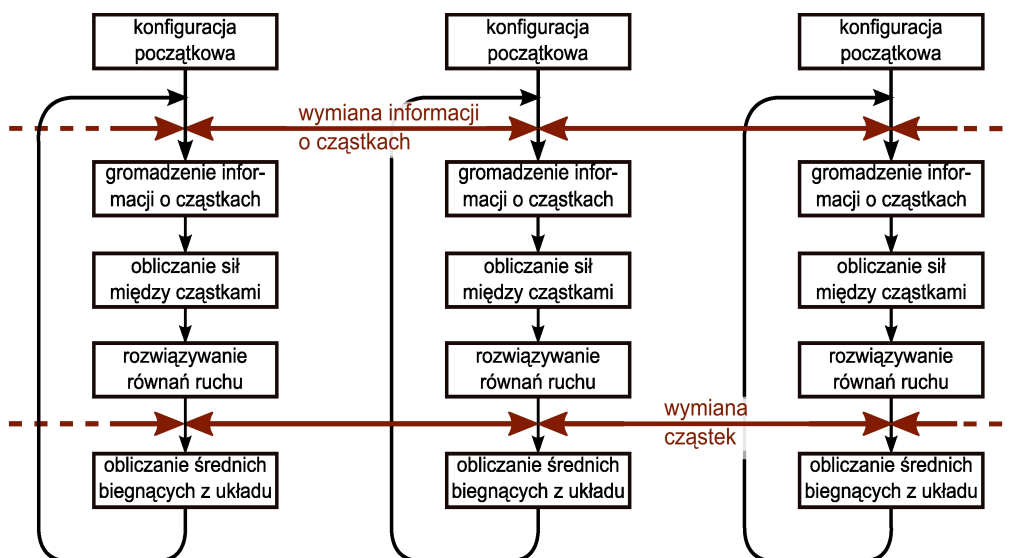
W pracy zaproponowano także wykorzystanie w metodzie SPH definicji sąsiedztwa opartej na stałym promieniu obcięcia. W metodzie tej powszechnie stosowano dotychczas definicję sąsiedztwa opartą na stałej liczbie sąsiadów. Praktyczne aspekty obu definicji zostały w pracy porównane. Z porównania wynika, że jeśli metoda SPH jest wykorzystywana do modelowania płynów nieściśliwych, wówczas o wiele efektywniej jest stosować definicję sąsiedztwa opartą na stałym promieniu obcięcia, niż na stałej liczbie sąsiadów. Wyniki jakościowe otrzymane przy użyciu obydwu definicji są bardzo do siebie zbliżone, a nieraz praktycznie nierozróżnialne, podczas gdy koszty obliczeniowe dla obydwu definicji jednoznacznie wskazują na tę opartą na stałym promieniu obcięcia jako korzystniejszą. Należy także wspomnieć o prostocie implementacji, która cechuje definicję opartą na stałym promieniu obcięcia. Definicja sąsiedztwa oparta na stałej liczbie sąsiadów wciąż jest jednak niezastąpiona w zastosowaniach dotyczących płynów ściśliwych. Wówczas zmienny zasięg oddziaływań jest rzeczą pożądaną i może być łatwo osiągnięty poprzez zastosowanie definicji ze stałą liczbą sąsiadów.

Aspekty implementacji równoległej

Wykorzystywanie w symulacjach architektur wieloprocessorowych umożliwia z jednej strony obserwacje układów zbudowanych z coraz większej liczby cząstek, z drugiej, wykonywanie większej liczby kroków symulacji, czyli obserwacje zjawisk o długim czasie przebiegu. Implikuje to również możliwość stosowania coraz bardziej złożonych modeli oddziaływań bez konieczności stosowania istotnych uproszczeń implementacyjnych. Metody cząstek rozpatrywane w pracy zostały zaimplementowane przy pomocy środowisk OpenMP oraz MPI, które realizują paradygmaty programowania równoległego odpowiednio dla komputerów z pamięcią współdzieloną i rozproszoną. Schematy blokowe algorytmów zostały przedstawione odpowiednio na rysunku 2 oraz rysunku 3.

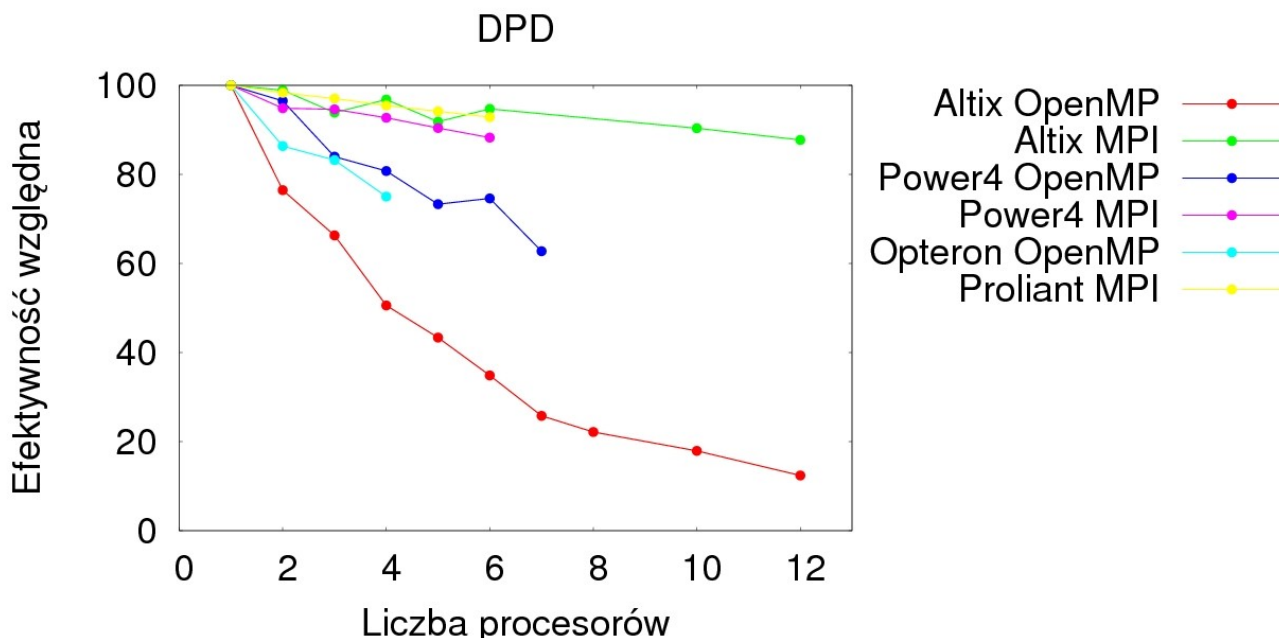


Rys. 2. Schemat blokowy wersji równoległej algorytmu symulacji metodą cząstek dla komputerów z pamięcią współdzieloną.



Rys. 3. Schemat blokowy wersji równoległej algorytmu symulacji metodą cząstek dla komputerów z pamięcią rozproszoną.

W pracy omówiono obydwie implementacje, dokonano testów porównawczych, omówiono ich wyniki oraz wyciągnięto wnioski. Wyniki te, przedstawione na rysunku 4, jednoznacznie wskazują na komputery z pamięcią rozproszoną jako te, które pozwalają osiągać lepsze wartości wskaźników obliczenia równoległego. W poszczególnych podrozdziałach przedstawiono optymalizacje tych implementacji. W obu przypadkach stosunkowo niskim nakładem pracy można uzyskać znaczący wzrost efektywności ich wykonania.



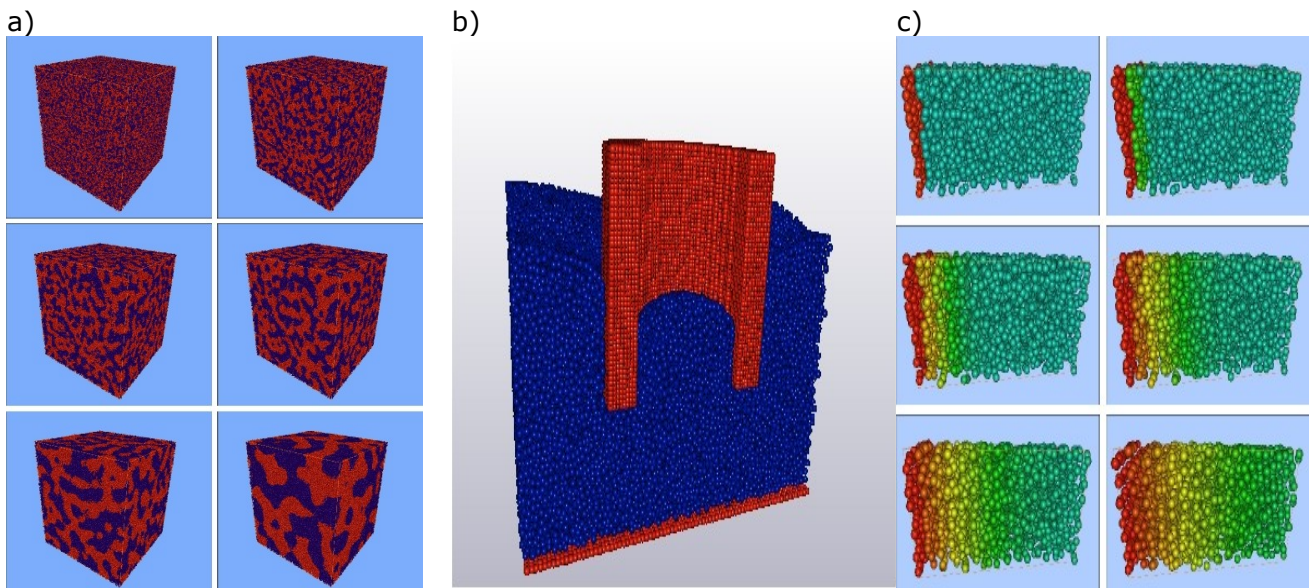
Rys. 4. Porównanie efektywności względnej algorytmów równoległych dla komputerów z pamięcią współdzieloną (środowisko OpenMP) oraz z pamięcią rozproszoną (środowisko MPI) na przykładzie metody DPD.

W pracy zaproponowano również trzy sposoby uwzględnienia losowego charakteru sił w metodach DPD oraz SDPD dla implementacji równoległej z wykorzystaniem przesyłania komunikatów. Porównano koszty ich implementacji oraz wskazano propozycję najbardziej efektywną obliczeniowo.

Dodatkowo, zaproponowano oraz zaimplementowano algorytm dynamicznego równoważenia obciążenia dla implementacji pracującej w oparciu o przesyłanie komunikatów.

Przykładowe wyniki

Przedstawione algorytmy symulacji zostały wykorzystane do symulacji przebiegu kilku wybranych zjawisk fizycznych. Są to zjawiska, które dość powszechnie są opisywane w literaturze jako przypadki testowe, bądź też znajdują się w obszarze będącym w szczególnym zainteresowaniu z punktu widzenia nowoczesnej inżynierii. Część z nich przedstawiono na rysunku 5.



Rys. 5. Przykładowe wyniki symulacji uzyskane w ramach badania algorytmów opisanych w pracy. Od lewej do prawej: a) separacja faz (DPD), b) menisk wypukły (SPH), c) transport ciepła (SDPD).

Podsumowanie

W rozprawie doktorskiej zaprezentowano wyniki prac dotyczących realizacji algorytmów symulacji metodą cząstek na architekturach z pamięcią współdzieloną oraz rozproszoną. Przedstawiono propozycje algorytmów implementacji równoległej dla architektur komputerowych opartych na takich modelach pamięci. Zaprezentowano wyniki symulacji zjawisk i czasy wykonania implementacji w

zastosowaniu do symulacji płynów metodami DPD, SPH oraz SDPD. W pracy udało się zrealizować następujące cele:

- zaprezentowano efektywną implementację nowoczesnych, teoretycznych modeli płynów z wykorzystaniem paradygmatów programowania dla architektur z pamięcią współdzieloną i rozproszoną,
- zaproponowano nowe sposoby implementacji równoległej algorytmów symulacji cząstek z wykorzystaniem środowisk MPI oraz OpenMP. Sposoby te kładą specjalny nacisk na efektywne wykorzystanie dostępnych zasobów obliczeniowych,
- zbadano efektywność implementacji przeznaczonych na architektury z pamięcią rozproszoną i współdzieloną. Wnioski wynikające z porównania obydwu implementacji wskazują na istotne różnice pomiędzy nimi, które należy uwzględnić podczas konstruowania i wykonywania symulacji,
- zaproponowano sposób porównania definicji sąsiedztwa pomiędzy cząstkami. Na podstawie wykonanego porównania wysnuto wnioski dotyczące właściwej definicji w symulacjach zarówno płynów ściśliwych, jak i nieściśliwych,
- zaproponowano i przetestowano modyfikacje wzorów określających napięcie powierzchniowe w metodzie SPH,
- zaproponowano i sprawdzono nowy model lepkości pozwalający na modelowanie przepływów płynów nie-newtonowskich,
- wykorzystano zaprezentowaną implementację do symulacji złożonych zjawisk z wykorzystaniem metod DPD, SPH oraz SDPD.

Podczas przeprowadzania badań opisywanych w niniejszej rozprawie pojawiły się nowe kwestie wskazujące możliwe kierunki dalszych prac. Jako najważniejsze można wymienić:

- dalsze prace nad możliwościami implementacji równoległej metod cząstek z wykorzystaniem nowych środowisk i architektur zarówno komputerów, jak i procesorów,
- zbadanie możliwości implementacji hybrydowej na architekturach wyposażonych w oddzielne jednostki obliczeniowe składające się z procesorów wielordzeniowych,
- wzbogacenie opisywanej implementacji o dodatkowe funkcjonalności, takie jak bardziej złożone schematy całkowania, możliwość modelowania potencjałów dalekozasięgowych czy zdolność do przeprowadzania symulacji przy pomocy metod z dwóch różnych skal przestrzenno-czasowych, co wymaga stosowania kilku kroków czasowych jednocześnie,
- przetestowanie metod spójnych termodynamicznie (formalizm GENERIC) do symulowania zjawisk fizycznych nie posiadających do tej pory sprawdzonej metody obliczeniowej,
- zastosowanie metody SDPD do symulacji przebiegu skomplikowanych i złożonych procesów oraz zjawisk, w których konieczne staje się uwzględnienie termodynamicznych aspektów modelowanego układu.

Wydaje się, że przedstawione w pracy implementacje wyczerpały możliwości optymalizacji czasu wykonania symulacji. Dotyczy to zarówno wersji na architektury z pamięcią rozproszoną (środowisko MPI) jak i z pamięcią

współdzieloną (środowisko OpenMP). Wyniki te prezentują możliwości implementacji równoległej i świadczą o konieczności korzystania z architektur wieloprocessorowych w symulacji płynów nowoczesnymi modelami opartymi na metodach cząstek.

Można się spodziewać, że w najbliższym czasie spójne termodynamicznie metody cząstek osiągną swoją dojrzałość, jak również powstające architektury komputerowe zdolne będą do przeprowadzania symulacji za pomocą tych metod dla układów składających się z dużej, niedostępnej dzisiaj liczby cząstek. Wymaga to stosowania sprawdzonych technik implementacji równoległej w celu optymalnego wykorzystania zasobów obliczeniowych przyszłych architektur. Omawiana praca prezentuje istotne aspekty tych technik i zawiera wartościowe wnioski, które mogą być wykorzystane przy tworzeniu przyszłych implementacji równoległych symulacji metodami cząstek.