

Load Balancing Methods for Molecular Dynamics Applications

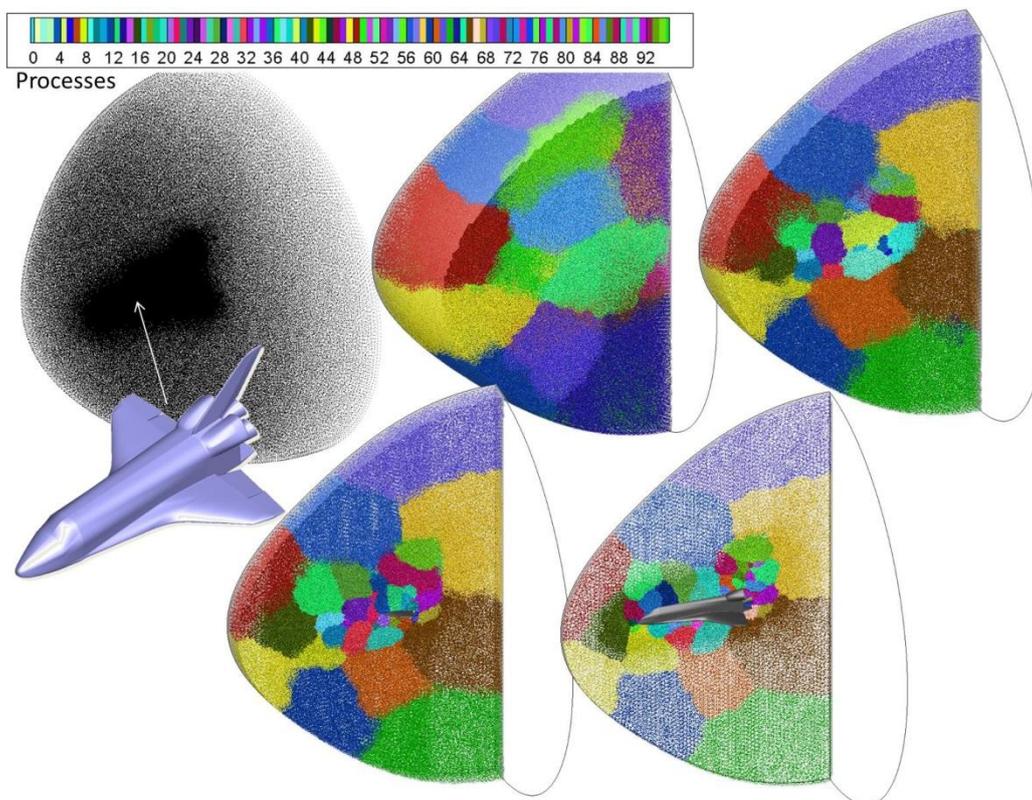
A.L. Zheleznyakova

*A.Yu. Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences,
119526, Moscow, Russia
a.zheleznyakova@mail.ru*

Abstract

A parallel implementation of computer code for generation of uniform and non-uniform unstructured grids in two- or three-dimensional domains based on the molecular dynamics method is presented. The calculation of particle trajectories during molecular dynamics simulation demands significant computational resources. Thus, high-performance computing systems must be used for large size adaptive grids and complex computational domains. Thereby, the effective load balancing methods for molecular dynamics simulation are implemented and investigated. Algorithms are based on geometric and graph representations. Geometric techniques (such as recursive coordinate bisection, recursive inertial bisection and space-filling curve methods) and multilevel schemes are applied. Some test cases are considered to examine of the quantitative and qualitative characteristics of the dynamic load balancing methods.

Keywords: the molecular dynamics method, unstructured mesh, multiprocessor simulation, graph decomposition, data decomposition



Example of the model of parallel computing for molecular dynamics simulation on 96 processors

УДК 533.6+519.6+519.178+004.94

Балансировка нагрузки процессоров при решении задач молекулярной динамики

А.Л. Железнякова

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук,
119526, Москва, проспект Вернадского, 101-1
a.zheleznyakova@mail.ru*

Аннотация

Представлена параллельная реализация компьютерного кода, предназначенного для создания двумерных и трехмерных, однородных и адаптивных неструктурированных расчетных сеток для различных задач механики сплошной среды с использованием классических методов молекулярной динамики. Расчет траекторий в процессе молекулярно-динамического моделирования требует существенных затрат компьютерных ресурсов. Таким образом, для сеток большой размерности со значительным сгущением узлов в зонах больших градиентов и сложных расчетных областей необходимо использовать высокопроизводительные вычислительные системы. В связи с этим реализуются и исследуются различные эффективные методы балансировки нагрузки процессоров при проведении молекулярно-динамического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах в ходе оптимального распределения узлов будущей расчетной сетки. Алгоритмы строятся на основе геометрических и графовых моделей и используют принципы координатной или моментной рекурсивной бисекции, либо применяют заполняющие пространство кривые; также рассматриваются многоуровневые технологии. В ходе работы проведена качественная и количественная оценка эффективности исследованных технологий динамической декомпозиции данных на ряде двумерных и трехмерных тестовых задач.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, неструктурированная сетка, многопроцессорное моделирование, декомпозиция графов, декомпозиция данных

1. Введение

Для современных задач вычислительной газовой динамики, представляющих практический интерес, форма расчетной области очень сложна. При автоматизированном проектировании нового изделия, будь то корпус автомобиля, корабля или летательного аппарата, важно обеспечить так называемый сквозной цикл проектирования – от создания виртуальной модели поверхности, с использованием современных систем автоматизированного проектирования, поверхностных и объемных сеточных моделей, до получения полного набора газодинамических данных, интересующих инженеров. Как показывает опыт, процесс создания расчетной сетки в этой технологической цепочке является самым трудоемким [1].

Автоматически построить структурированную сетку для реалистичных конфигураций такой сложности в настоящее время просто невозможно, даже с использованием блочного подхода. При решении задач автоматизированного проектирования необходимо в максимально сжатые сроки рассмотреть множество вариантов компоновок и конструкций отдельных элементов изделия в широком диапазоне условий эксплуатации. Поэтому развитие методов построения неструктурированных сеток является перспективным направлением.

В предшествующих работах [2–5] был предложен новый численный метод построения объемных и поверхностных неструктурированных сеток с использованием молекулярно-динамического моделирования. Алгоритм позволяет создавать качественные однородные и адаптивные тетраэдральные сетки для сложных многосвязных областей. В качестве исход-

ных данных используются составные NURBS-поверхности и ограничивающие кривые [6–8]. NURBS-подход основан на специальной кусочно-полиномиальной форме представления – неоднородных рациональных B-сплайнах [6–8] и способен обеспечить любую требуемую точность задания поверхности модели. Разработанная технология создания расчетных сеток основана на иерархическом применении и последовательно используется для разбиения сначала NURBS-кривых, затем NURBS-поверхностей. Сетка в объеме расчетной области строится на основе уже полученного оптимального распределения узлов на сложных ограничивающих поверхностях. Метод позволяет автоматизировать процесс перехода между геометрической и сеточной моделями и сохранить высокую точность, заложенную в исходной геометрии объекта.

Динамическая природа разработанного метода генерации расчетных сеток позволяет локально перестраивать сеточную модель, что обеспечивает возможность рассмотрения большого числа различных вариантов конструкции промышленных изделий в кратчайшие сроки, а также проводить динамическую адаптацию расчетной сетки в процессе решения уравнений механики сплошной среды.

2. Применение методов молекулярно-динамического моделирования для расстановки узлов при генерации неструктурированных расчетных сеток

Молекулярно-динамический метод построения поверхностных и объемных сеточных моделей основывается на идее динамического распределения подвижных узлов будущей сетки, которые попарно взаимодействуют друг с другом посредством электрических сил отталкивания. В идеале оптимально расположенные вершины однородной треугольной (на плоскости) или тетраэдральной (в пространстве) сетки должны располагаться в центрах максимально плотно упакованных кругов или шаров с диаметрами, равными шагу сетки. Для образования структуры близкой к оптимальной (заполнить плотно прилегающими друг к другу тетраэдрами трехмерное пространство невозможно) механизм взаимодействия между подвижными узлами описывается с использованием центральных ненаправленных сил отталкивания. В системе из N подвижных, попарно-взаимодействующих частиц на каждую i -ю частицу с зарядом q_i в произвольный момент времени будет воздействовать суммарная сила межчастичного взаимодействия:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} = \sum_{j=1}^N \left[-M_i \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^a} \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \right], \quad a \geq 1, \quad |\mathbf{r}_{ij}| = h_{ij}, \quad i=1, \dots, N. \quad (1)$$

В соотношении (1) абсолютная величина отталкивающей силы \mathbf{F}_{ij} , действующей между i -й и произвольной j -й частицей с зарядом q_j , обратно пропорциональна a -й степени мгновенного расстояния h_{ij} между соответствующей парой, а вектор силы направлен противоположно радиус-вектору \mathbf{r}_{ij} . Дискретная метрическая функция M_i задает “равновесное” расстояние между ближайшими взаимодействующими частицами (шаг будущей сетки) в результирующем распределении в точке расположения i -й частицы. Значение метрической функции определяется для каждого подвижного узла в каждый момент времени и зависит от мгновенного положения частицы в пространстве расчетной области. Для однородной сетки M_i – это одна и та же константа для всех частиц вне зависимости от их расположения ($M_i = const$). При необходимости сгущения узлов к произвольной границе, с целью создания адаптивных сеток, M_i варьируется в зависимости от расстояния между i -й частицей и стенкой.

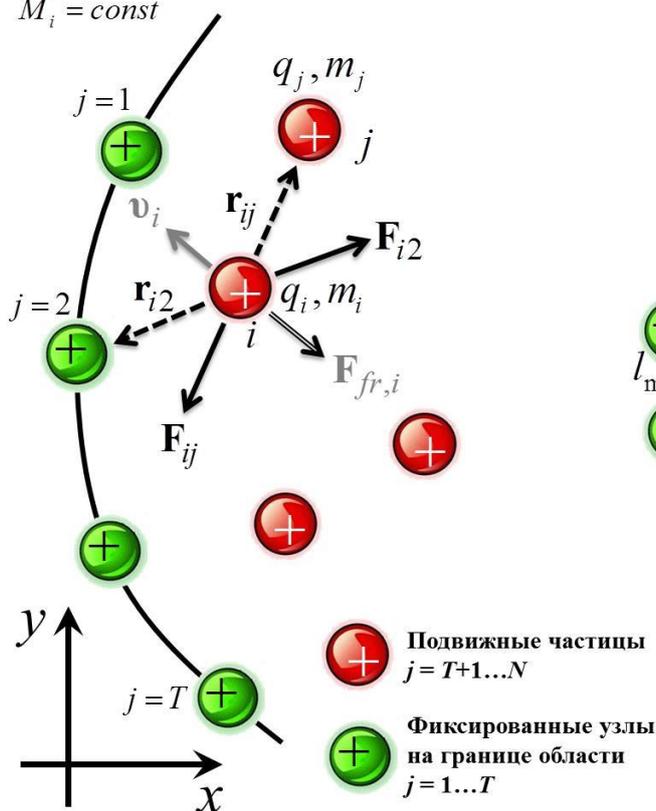
$$M_i = C [d_i + f(l_{\min_b})] \tag{2}$$

здесь C – постоянная нормировки, d_i – константа, задающая расстояние от стенки до первого слоя элементов, l_{\min_b} – дистанция между подвижной частицей и границей области. Закон сгущения узлов $f(l_{\min_b})$, по которому в результирующем распределении от слоя к слою будет изменяться шаг сетки, может быть практически произвольным, например линейным или квадратичным.

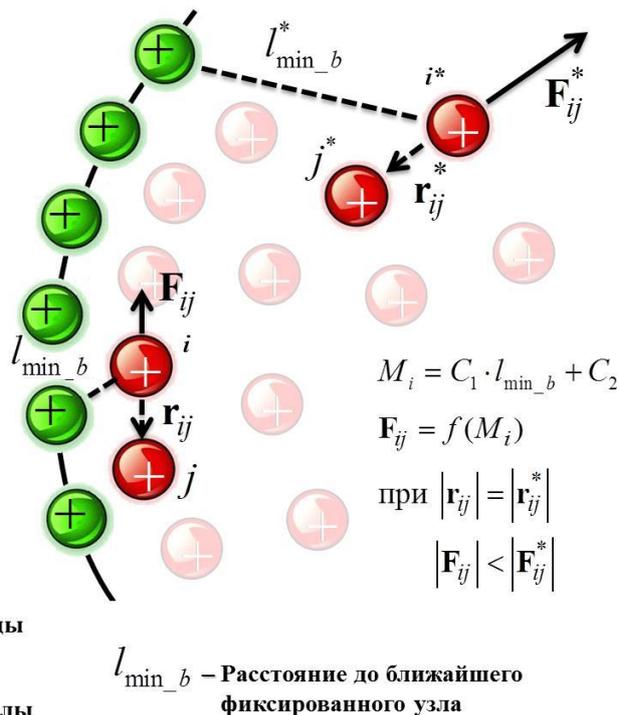
На рис. 1 показана схема, иллюстрирующая процесс взаимодействия между парами частиц, которые перемещаются в двумерной (для большей наглядности) расчетной области. Границы области рассматриваются как неподвижные частицы с теми же характеристиками. Фиксированные частицы предварительно распределяются вдоль ограничивающих линий с учетом желаемого шага разбиения, остаются неподвижными в процессе молекулярно-динамического моделирования и препятствуют перемещению мобильных частиц за границы области. Рис. 1, слева соответствует случаю однородного распределения вершин будущей сетки. Справа представлена схема взаимодействия подвижных узлов при их сгущении к границе. Благодаря отталкивающему характеру взаимодействия подвижных частиц, как с мобильными, так и с фиксированными узлами, исключается возможность образования пустот и локальных скоплений вершин.

Однородное распределение

$$M_i = const$$



Сгущение узлов к границе



$$M_i = C_1 \cdot l_{\min_b} + C_2$$

$$F_{ij} = f(M_i)$$

$$\text{при } |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_{ij}^*|$$

$$|\mathbf{F}_{ij}| < |\mathbf{F}_{ij}^*|$$

Рис.1. Схема взаимодействия подвижных частиц в расчетной области в процессе их однородного распределения (слева), а так же размещение узлов с локальным сгущением к границе области по линейному закону (справа)

Кроме силы взаимодействия на частицы действуют силы сопротивления $\mathbf{F}_{fr,i}$, которые определяются модулем вектора скорости \mathbf{v}_i и имеют противоположное ему направление. Таким образом, суммарное воздействие на i -ю подвижную частицу рассчитывается из соотношения:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{F}_{fr,i}. \quad (3)$$

Благодаря действию диссипативных сил, для определения которых используются различные степенные зависимости от скорости [2], система через достаточно короткий промежуток времени приходит к квазиравновесному состоянию. Частицы совершают лишь незначительные колебания около устойчивых положений равновесия, при этом распределение частиц становится в высокой степени упорядоченным (рис. 2). На рис. 2 для фрагмента двумерной расчетной области показана временная развертка процесса динамического распределения узлов будущей однородной (вверху) и адаптивной (внизу) расчетной сетки. Границы области заданы множеством неподвижных частиц. Между узлами (как мобильными, так и фиксированными) действуют исключительно отталкивающие силы.

При сгущении узлов к произвольной границе модуль отталкивающей силы варьируется в зависимости от положения подвижной частицы, благодаря использованию метрической функции (1), (2). В рассматриваемом случае отталкивание уменьшается по линейному закону по мере приближения к границе (ближайшему фиксированному узлу).

На основе полученного “оптимального” распределения, с использованием триангуляции Делоне [9,10], может быть создана качественная поверхностная или объемная сетка с расчетными элементами, форма которых близка к форме правильных треугольников или тетраэдров (в трехмерном случае). На рис. 3 представлены некоторые результаты качественного сравнения сеток, которые построены с использованием следующих подходов: метода распространяющегося фронта, реализованного в сеточном генераторе Gambit [11], инкрементного алгоритма Делоне (без предварительной расстановки вершин) и триангуляции Делоне множества узлов, распределенных молекулярно-динамическим методом. Из рисунка видно, что узлы расчетных сеток, построенных с использованием предложенного метода, упорядочены в большей степени, а сами расчетные сетки более однородны. Рядом приведены количественные показатели качества сеток, такие как аспектное соотношение, минимальный и максимальный углы элемента (критерий скошенности).

Аспектное соотношение 75% элементов “молекулярно-динамической сетки” не превышает 1.2. Для двух других подходов число ячеек близких к правильным треугольникам (для равностороннего треугольника аспектное соотношение равно единице) составляет 63% и 50% соответственно. Кроме этого применение молекулярно-динамического подхода позволяет генерировать сетки с хорошими показателями по критерию скошенности. Из представленных данных видно, что углы ячеек “молекулярно-динамической сетки” варьируются в самом узком интервале значений.

При переходе от двумерного пространства к трехмерному сложность реализации молекулярно-динамического алгоритма возрастает незначительно. Распределение узлов в объеме расчетной области с произвольной границей, проводится по иерархическому принципу. В качестве исходных данных используется “оптимальное” распределение узлов на сложных ограничивающих поверхностях, полученное предварительно тем же молекулярно-динамическим методом. Задача моделирования взаимодействия подвижных частиц со сложной границей, заданной упорядоченным множеством неподвижных узлов, решается идентично двумерному случаю, рассмотренному выше. Кроме этого, технология сгущения вершин расчетной сетки к произвольной границе в трехмерном пространстве концептуально не отличается от метода адаптации, разработанного для двумерного случая. Некоторую

сложность представляет лишь распределение частиц по произвольной ограничивающей поверхности, в общем случае многосвязной [3].

Однородное распределение

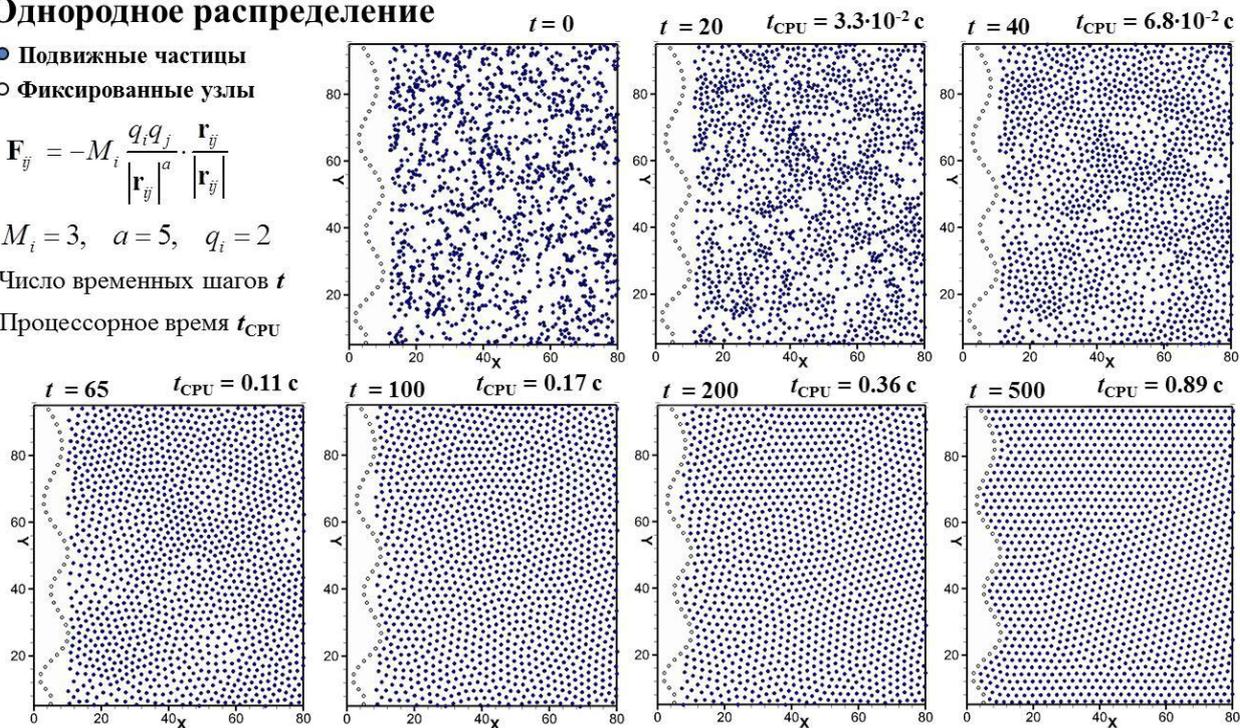
- Подвижные частицы
- Фиксированные узлы

$$\mathbf{F}_{ij} = -M_i \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^a} \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|}$$

$$M_i = 3, \quad a = 5, \quad q_i = 2$$

Число временных шагов t

Процессорное время t_{CPU}



Сгущение узлов к границе

$$M_i = 3 + 0.1 \cdot l_{\min_b}$$

l_{\min_b} - Расстояние от i -й подвижной частицы до ближайшего фиксированного узла на границе

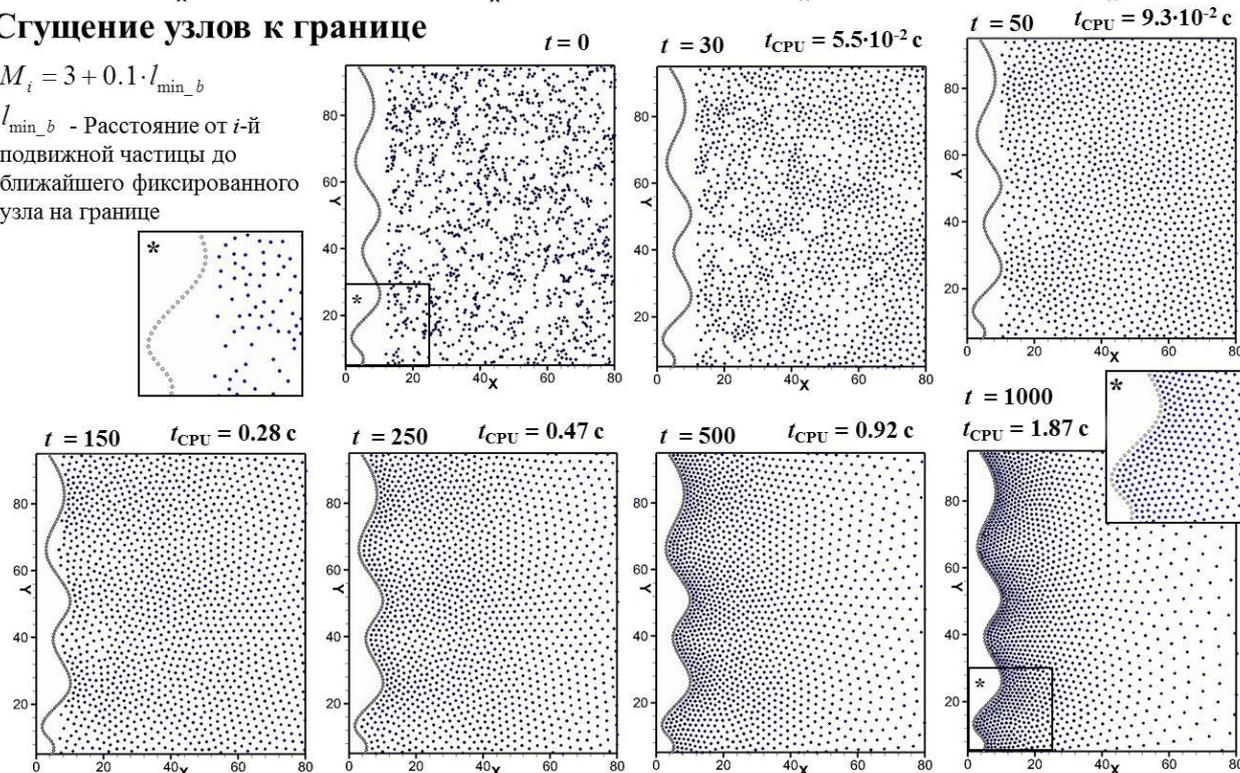


Рис.2. Процесс распределения взаимодействующих частиц в двумерной расчетной области с целью создания однородной (вверху) и адаптивной к границе (внизу) неструктурированной расчетной сетки

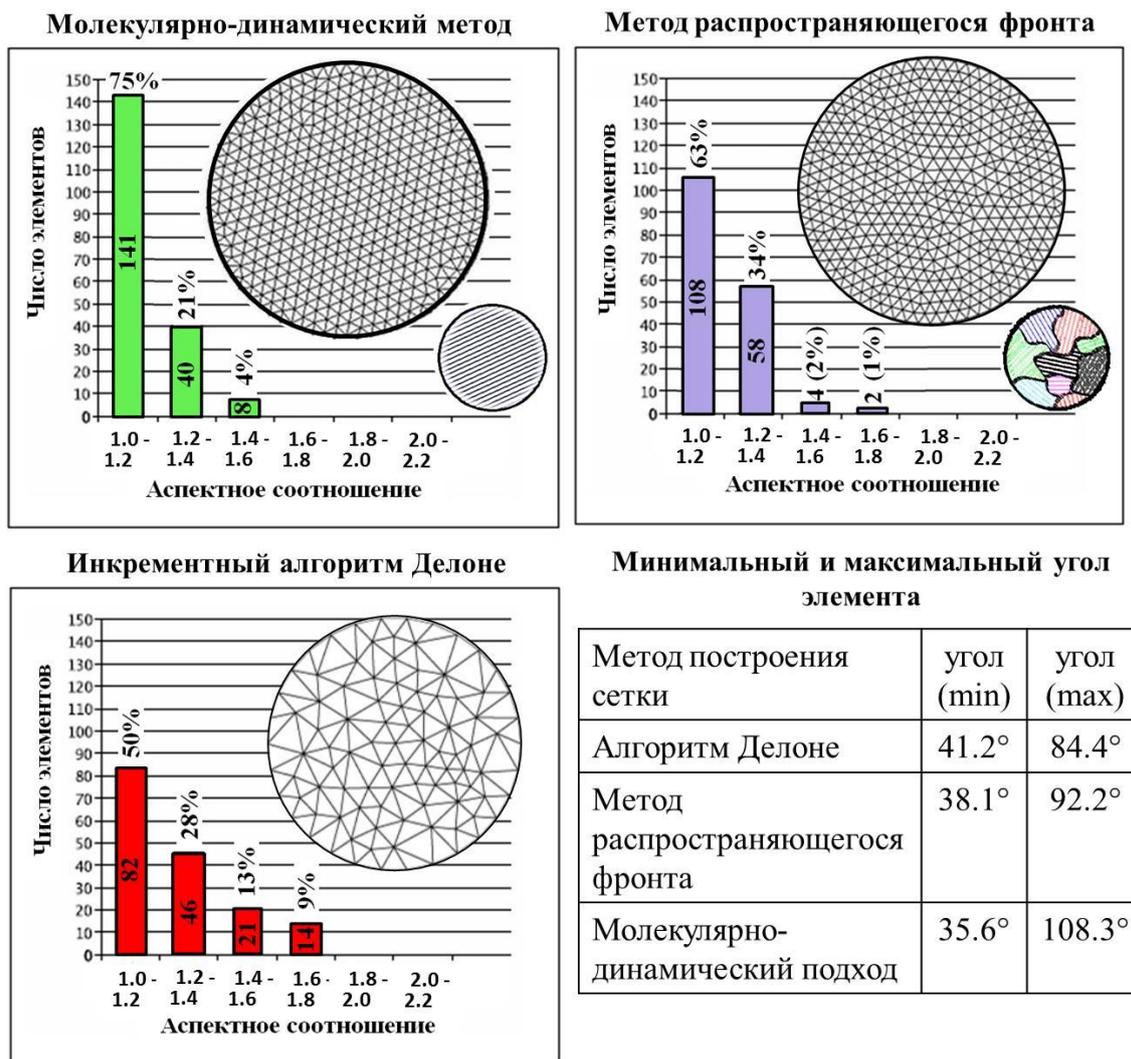


Рис.3. Сравнительная оценка качества расчетных сеток, построенных с использованием молекулярно-динамического моделирования, метода распространяющегося фронта и инкрементного алгоритма Делоне

Для расстановки узлов неструктурированной сетки по произвольным NURBS-поверхностям также используется молекулярно-динамический метод. В этом случае, подход применяется для распределения подвижных взаимодействующих между собой узлов в двумерном пространстве параметров NURBS-поверхности (рис. 4). Причем “равновесное” расстояние между соседними частицами опять же определяется с помощью метрической функции. По аналогии с двумерным случаем эта функция позволяет регулировать силы отталкивания с учетом плотности координатных линий (рис. 4, вверху слева) трехмерной поверхности в точке расположения i -й частицы в произвольный момент времени. В итоге полученная “оптимальная” конфигурация узлов отображается в физическое пространство с использованием соотношений Кокса – де Бура [12,13]. Теория NURBS-подхода, основанного на специальной кусочно-полиномиальной форме представления геометрии любой сложности – неоднородных рациональных B-сплайнах, подробно изложена в [6–8]. В самом общем случае, когда поверхность обрезается по произвольной кривой или содержит отверстия (рис. 5), задача распределения подвижных частиц решается с использованием фиксированных узлов, с помощью которых задаются внешние или внутренние границы области параметров.

Результирующее распределение мобильных взаимодействующих частиц в двумерной параметрической области NURBS-поверхности с вырезом показано на рис. 5. Границы отверстия предварительно определяются множеством фиксированных узлов, которые остаются неподвижными в процессе молекулярно-динамического моделирования.

Сетка в объеме расчетной области, в соответствии с используемым иерархическим подходом, строится на основе уже полученного оптимального распределения узлов на сложных ограничивающих поверхностях (рис. 6). Развитие процесса взаимодействия частиц для фрагмента трехмерной расчетной области показано на рис. 6, сверху. Следует отметить, что тетраэдризация строится один раз на завершающем этапе распределения подвижных узлов и для трехмерного случая, рассмотренного на рис. 6, сверху, выполняется для нескольких временных шагов лишь с целью более наглядного представления.

Ниже представлен процесс упорядочивания частиц в пространственной области, ограниченной произвольной поверхностью. Сложная граница задана множеством предварительно распределенных фиксированных узлов.

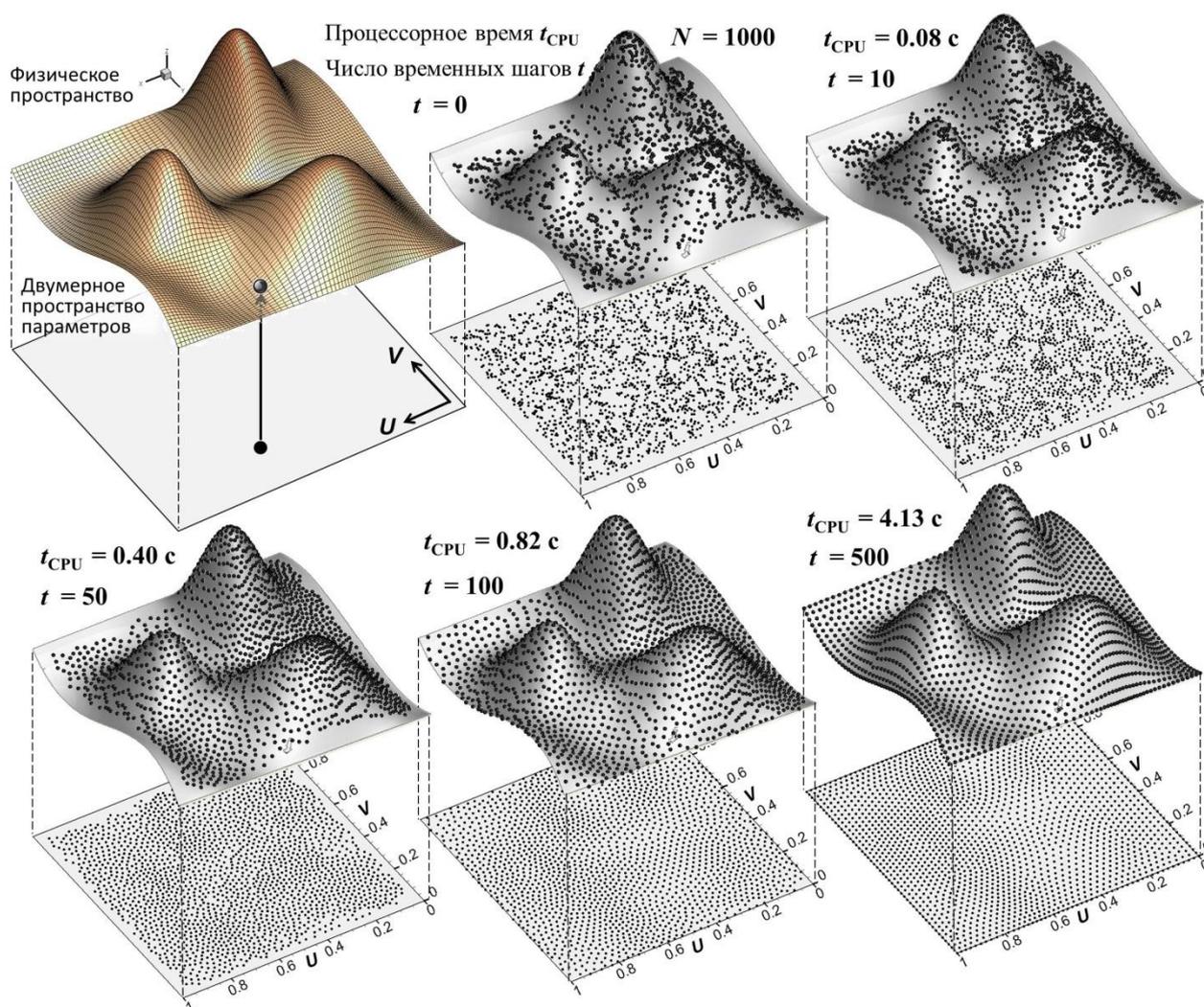


Рис.4. Распределение подвижных частиц в двумерном параметрическом пространстве сложной NURBS-поверхности, и последующее отображение в физическое пространство

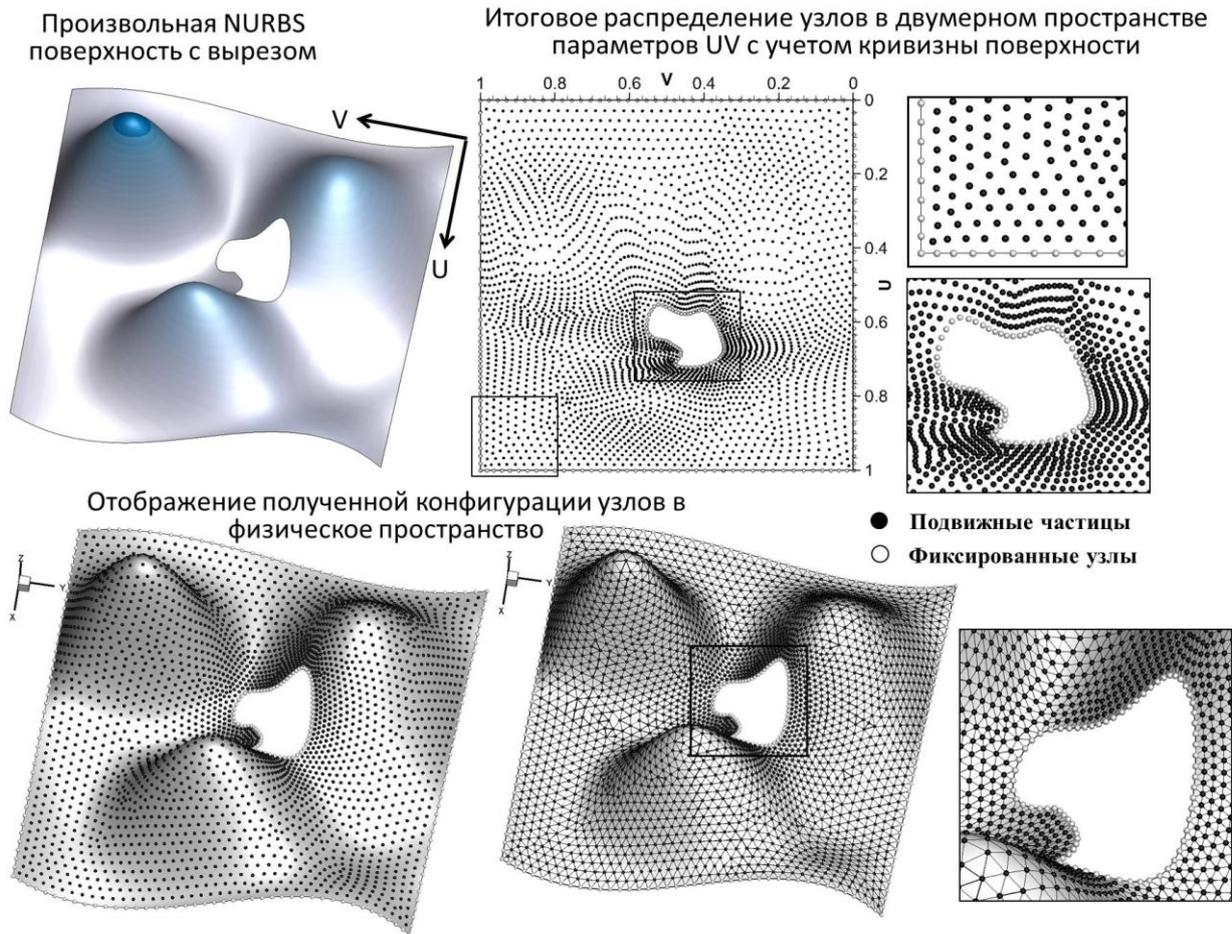


Рис.5. Результирующее распределение узлов будущей расчетной сетки в пространстве параметров произвольной NURBS-поверхности с вырезом, и последующее отображение полученной конфигурации в трехмерное физическое пространство

При переходе к трехмерному пространству технология наследует все преимущества двумерного подхода, в частности хорошее качество элементов расчетной сетки, которая может быть построена по полученной 3D конфигурации узлов (рис. 6, справа внизу). Внизу слева приведены некоторые показатели качества полученной сетки в виде гистограммы – распределения тетрадральных элементов по значениям аспектного соотношения (данный критерий характеризует, насколько расчетные ячейки по форме близки к правильным тетрадрам).

Моделирование динамики системы одноименно заряженных, попарно взаимодействующих частиц (узлов), проводится путем решения уравнений движения Ньютона для отдельной i -й частицы. На каждом шаге вычислений равнодействующая всех сил, действующая на подвижный узел, используется для обновления его координат и скоростей. Численное интегрирование уравнений движения проводится по известному алгоритму Верле [14, 15].

Расчет траекторий требует использования существенных компьютерных ресурсов, кроме того, высокая вычислительная сложность определяется особенностями рассматриваемой системы. Во-первых, для промышленного моделирования необходимы сетки большой размерности с числом узлов ($N = 10^6 - 10^8$). Во-вторых, в задачах, представляющих практический интерес, форма расчетной области очень сложна, и значительная часть машинного времени расходуется на моделирование взаимодействия частиц с ее границами. В-третьих, частицы (узлы расчетной сетки) должны распределяться неоднородно, со значительным сгущением в зонах больших градиентов.

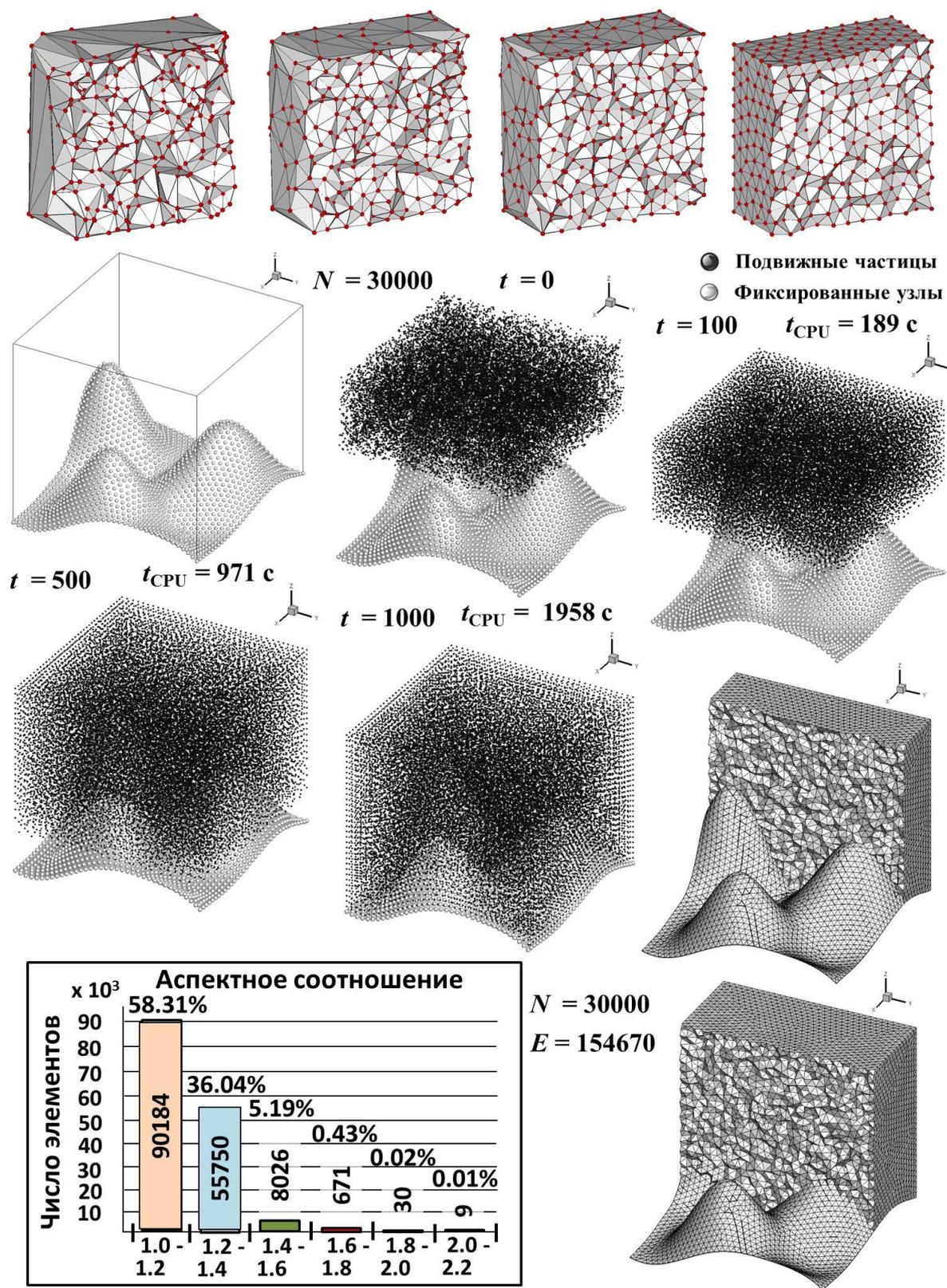


Рис.6. Фрагмент трехмерного пространства, в котором динамически распределяются подвижные частицы. Временная развертка процесса расстановки $N = 30000$ узлов в 3D области, ограниченной сложной поверхностью. Расчетная сетка размерностью $E = 154670$ тетрадральных ячеек, построенная по результирующему распределению вершин, и некоторые количественные характеристики ее качества

Учитывая, что алгоритмы метода молекулярной динамики хорошо поддаются распараллеливанию, единственным способом решения поставленной задачи за разумное время является использование высокопроизводительных вычислительных систем.

3. Параллельная реализация алгоритмов молекулярно-динамического моделирования с использованием методов динамической балансировки нагрузки процессоров

Для высокопроизводительных систем, включающих сотни и тысячи вычислительных узлов является характерным то, что при наращивании числа процессоров наступает момент, когда эффективность параллельных вычислений начинает резко снижаться, вследствие превышения времени пересылки данных над временем вычислений. Поэтому организация расчетов в параллельном режиме требует решения целого ряда специфических проблем, среди которых балансировка работы процессоров, обеспечивающая их равномерную загрузку, и минимизация межпроцессорных обменов.

Достижение хорошего баланса загрузки процессоров при параллельной реализации молекулярно-динамического метода построения расчетных сеток имеет решающее значение для оптимального использования ресурсов компьютера. Особенно учитывая, что временные издержки определяются максимальным временем, затраченным одним из процессоров на выполнение своей части работы.

Отдельный процессор в определенный момент времени отвечает за группу “локальных” частиц, которые располагаются внутри подконтрольного домена с соответствующими условными границами. Объем вычислений, выполняемых каждым процессором, будет зависеть от выбора модели межчастичного взаимодействия (радиуса действия сил, радиуса обрезания потенциалов взаимодействия, скорости убывания сил с расстоянием). В настоящем исследовании использовались короткодействующие силы, которые убывают пропорционально пятой степени расстояния ($F_{ij} \sim 1/|r_{ij}|^a$, $a = 5$). На относительно небольшой дистанции R_{\max} действие сил считалось пренебрежимо малым, а взаимодействие между частицами, находящимися друг от друга на расстоянии большем, чем радиус обрезания, не учитывалось. Стандартный прием, основанный на введении радиуса обрезания, позволил снизить трудоемкость вычислений с $O(n^2)$ до $O(n)$.

Для моделирования эволюции своей подсистемы каждый вычислительный узел должен также обладать информацией о координатах расположенных в смежных подобластях “удаленных” частиц, с которыми вступают во взаимодействие его “локальные” частицы. В соответствии с принятой моделью, действие сил парного отталкивания распространяется за границы подобласти на расстояние R_{\max} . Таким образом, сбалансированность нагрузки процессоров и коммуникационная нагрузка будут определяться соответственно числом “локальных” и “отдаленных” частиц.

В большинстве практически важных случаев используются сетки со значительным сгущением вершин вблизи ограничивающих поверхностей, зон больших градиентов. Локальная неоднородность плотности узлов приводит к существенным различиям в трудоемкости вычисления сил парного взаимодействия, в зависимости от местоположения частицы в расчетной области. Очевидно, что при фиксированном R_{\max} увеличение концентрации частиц приведет к возрастанию числа парных сил, которые необходимо учесть. В настоящем исследовании не моделируются конкретная среда или физический процесс, в отличие от подавляющего большинства задач, решаемых молекулярно-динамическим методом, поэтому отсутствуют строгие ограничения в выборе модели взаимодействия, что дает возможность принять R_{\max} за переменную величину, равную, например, двум или трем межузловым расстояниям результирующего равновесного распределения частиц в данной

точке расчетной области. Это не представляет большой сложности, так как возможности молекулярно-динамического метода позволяют достаточно точно контролировать “равновесное” расстояние между ближайшими взаимодействующими частицами. Благодаря последнему допущению, на обработку каждой частицы затрачивается примерно одинаковое процессорное время.

Молекулярно-динамический метод относительно прост алгоритмически и заключается в вычислении сил взаимодействия между частицами и интегрировании их траекторий. Однако эффективная параллельная реализация подхода является сложной задачей из-за постоянного изменения вычислительной нагрузки.

Для генерации на многопроцессорных системах больших сеток, содержащих до 10^8 узлов, разработана параллельная MPI реализация [16,17] алгоритма молекулярно-динамического моделирования с динамической балансировкой загрузки процессоров.

При решении рассматриваемого класса задач широко применяется два подхода к распараллеливанию: декомпозиция по расчету сил и разбиение по пространству. Поскольку силы, действующие в системе – короткодействующие, в качестве метода распараллеливания было целесообразно применить декомпозицию по пространству.

Технология основана на разделении области моделирования на домены, что представляет собой более сложную проблему, по сравнению с известной процедурой статической декомпозиции сеток. Рассматриваемая система состоит из достаточно мобильных частиц, не имеющих постоянных соседей, поэтому сеточное разбиение расчетной области не проводится. Кроме того, в ходе молекулярно-динамического моделирования узлы непрерывно перемещаются, изменяя условные границы подобластей, поэтому перераспределение частиц должно проводиться в динамическом режиме после одного или нескольких временных шагов. И, наконец, граф, в котором каждой частице ставится в соответствие его вершина, а дуги отображают парное взаимодействие между частицами, имеет более высокую связность, чем граф, двойственный неструктурированной конечно-объемной или конечно-элементной сетке.

С целью оптимальной декомпозиции исследовались возможности геометрических и графовых подходов.

Геометрический подход к оптимальной декомпозиции является интуитивным. Методы разбиения данных, относящиеся к данному классу, основываются только на информации о координатах подвижных узлов, что с легкостью обеспечивается в ходе молекулярно-динамического моделирования. Технология, основанная на геометрическом представлении [18–21], изначально разрабатывалась как статическая, но благодаря относительно простой алгоритмической реализации и минимальным временным затратам на исполнение она идеально подходит для выполнения в динамическом режиме.

К семейству геометрических методов относится алгоритм рекурсивной координатной бисекции. Подход основан на рекурсивном разбиении множества узлов с минимизацией протяженности границ между подобластями, посредством половинного деления исходной области, а затем ее потомков [18]. Декомпозиция проводится по наиболее длинной стороне домена, по линии перпендикулярной одной из координатных осей. Работа алгоритма может быть описана следующим образом:

- 1) Центры масс точечных узлов проецируются на координатную ось, вдоль которой протяженность рассматриваемой системы частиц максимальна (последнее условие обеспечивает минимизацию протяженности границ между подобластями).
- 2) Упорядоченный список узлов делится поровну.
- 3) Алгоритм рекурсивного разбиения применяется к каждой подобласти нужное число раз.

Метод имеет существенное ограничение в том, что разделение проводится строго перпендикулярно одной из координатных осей. Для многих случаев это приводит к далеко не оптимальному разбиению с границами большой протяженности между областями.

Рекурсивная инерционная бисекция является развитием предыдущего метода и позволяет проводить разбиение вдоль линий ориентированных под произвольным углом к координатным осям [19]. Подход предполагает определять инерционную ось всей системы точечных масс. Декомпозиция по линии перпендикулярной оси инерции, как правило, приводит к образованию непротяженной границы между доменами. В ходе выполнения алгоритма инерционной бисекции, по аналогии с предыдущим методом, центры масс точечных частиц проецируются на инерционную ось. Затем их упорядоченное множество разбивается на две равные части. Далее проводится рекурсивное деление подобластей нужное число раз.

Этапы геометрической декомпозиции неструктурированных данных в процессе молекулярно-динамического моделирования с использованием рекурсивной координатной и моментной бисекций для некоторого момента времени представлены на рис. 7.

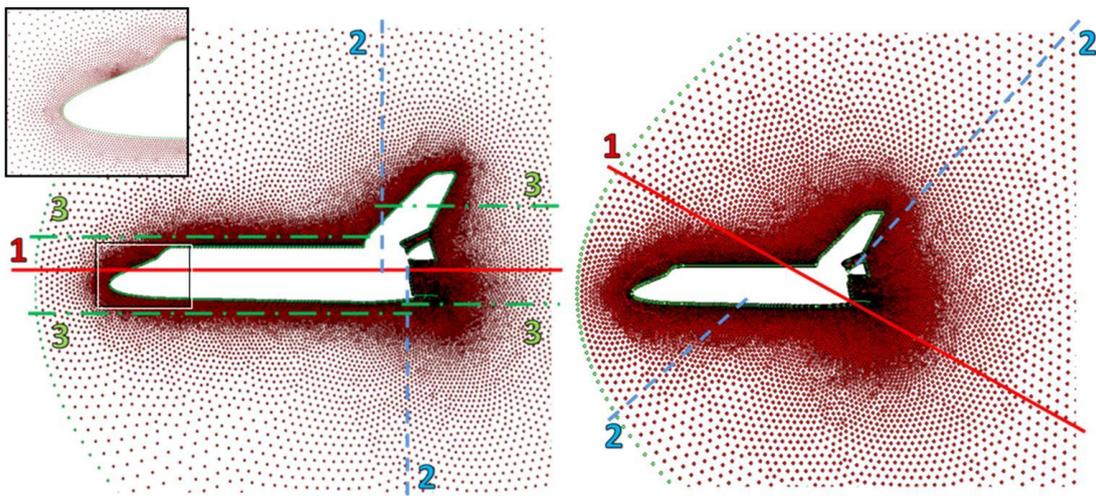


Рис.7. Этапы геометрической декомпозиции двумерной расчетной области около орбитально-го корабля Space Shuttle с использованием рекурсивной координатной бисекции и рекурсивной инерционной бисекции

Алгоритмы, основанные на координатной или моментной рекурсивной бисекции, распределяют упорядоченные узлы поровну между подобластями. Упорядочивание частиц вдоль выделенного направления проводится посредством их проецирования на координатную или моментную оси.

Качество разбиения можно значительно улучшить, если проводить упорядочивание элементов в более чем одном измерении с использованием непрерывных кривых [20,21], которые полностью заполняют многомерное пространство (например, кривая Гильберта). Эти фрактальные [22] математические объекты обладают замечательными свойствами, благодаря которым они нашли широкое применение в научных вычислениях и могут использоваться для упорядочивания неструктурированных данных в 2D и 3D пространстве. Такие кривые представляют собой непрерывные функции, по сути отображающие многомерное (2D или 3D) пространство в одномерное. Кривая Гильберта – это непрерывная, фрактально заполняющая квадрат или куб кривая, которая строится с использованием рекурсии (рис. 8). Ее дискретное представление определяется уровнем рекурсии или порядком кривой [23] и применяется для индексации узлов (присвоения индекса каждой подвижной частице в определенном порядке). В трехмерном случае заполняющая пространство кривая Гильберта обеспечивает упорядоченную нумерацию системы частиц размерностью 2^{3p} , где p глубина рекурсии, в которую вкладывается расчетная область. Каждой частице присваивается индекс квадрата или куба, в котором она оказалась [20,21].

В дальнейшем список упорядоченных узлов используется для разбиения множества частиц на нужное число подобластей. При этом полученная последовательность обладает

нужными характеристиками: частицы близко расположенные в пространстве расчетной области имеют близкие номера индексов в списке. Алгоритмы, основанные на декомпозиции с использованием заполняющих пространство кривых, очень быстрые, а разбиения, полученные в ходе их работы, превосходят по качеству координатную и моментную бисекции.

Рис. 9 иллюстрирует применение кривой Гильберта, для упорядочивания множества узлов будущей расчетной сетки в процессе их распределения в пространстве около аэродинамического профиля с механизацией [24].

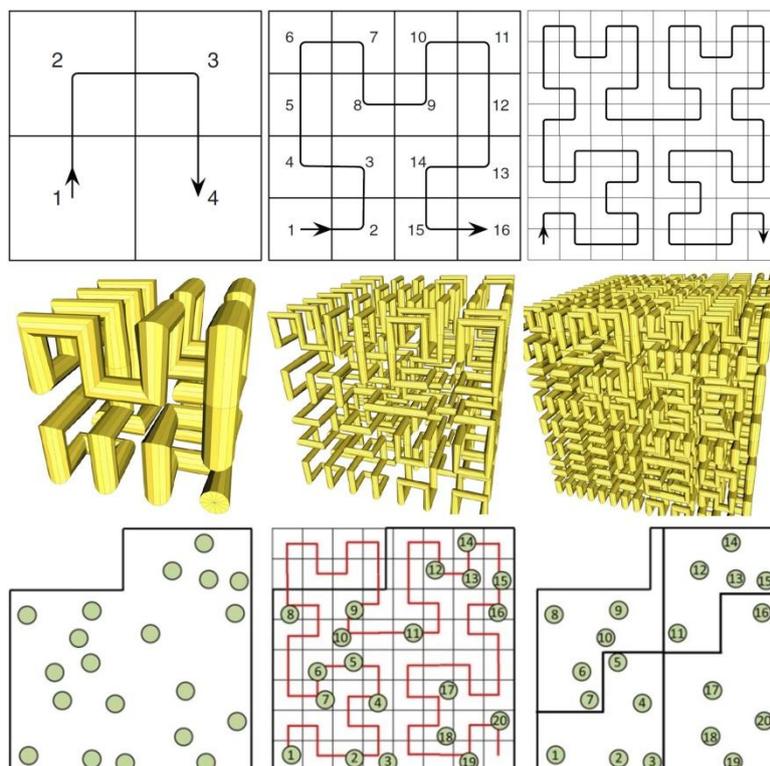


Рис.8. Представление кривой Гильберта первого, второго и третьего порядка в двумерном пространстве (вверху), а также кривой Гильберта второго, третьего и четвертого порядка в трехмерном пространстве (в середине) [23]. Принцип упорядочивания подвижных частиц с использованием кривой Гильберта и их распределение между подобластями (внизу)

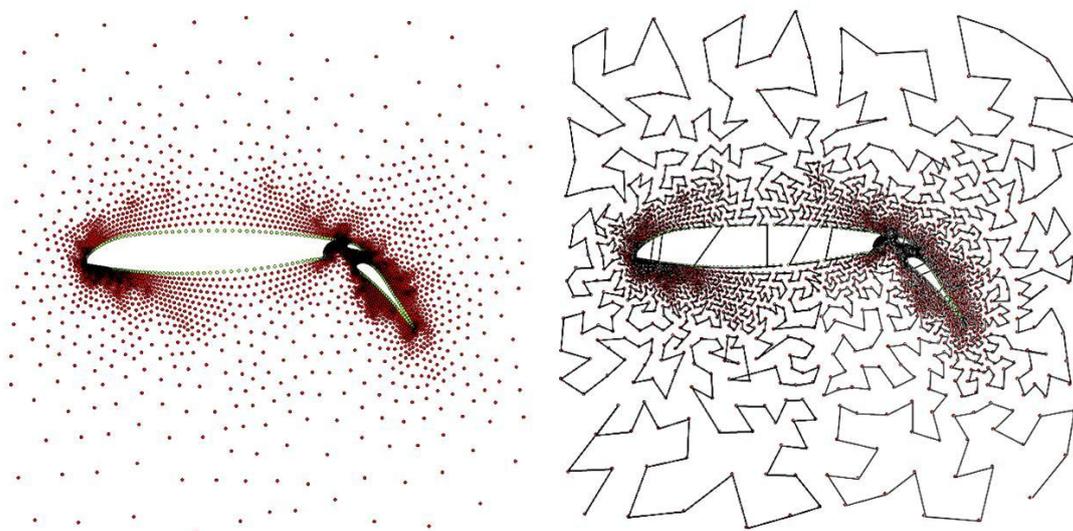


Рис.9. Упорядочивание подвижных узлов будущей расчетной сетки для крылового профиля с использованием кривой Гильберта [24]

Альтернативный подход к декомпозиции данных использует представление системы взаимодействующих частиц в виде графовой модели, где каждой взаимодействующей частице ставится в соответствие вершина графа, а связи между вершинами отображают парное взаимодействие между узлами. Разбиение вершин графа на непересекающиеся подобласти эквивалентно распределению частиц по соответствующему числу процессоров. Оптимальная декомпозиция графа состоит в уравнивании числа вершин каждого подмножества и минимизации числа ребер соединяющих вершины разных подобластей (так называемых разрезанных ребер). Выполнение данных условий обеспечивает балансировку вычислительной нагрузки и минимизацию коммуникационной нагрузки соответственно. Поскольку коммуникации между вершинами графа, описывающего систему взаимодействующих узлов, определены неявно, возникают некоторые сложности в использовании графового подхода, что отмечалось выше. Во-первых, граф будет иметь очень значительное число ребер, даже при введении радиуса обрезания сил взаимодействия. Граф, представляющий систему взаимодействующих частиц, имеет более высокую связность, чем граф, двойственный неструктурированной треугольной или тетраэдральной сетке. Это увеличивает время выполнения алгоритмов, которые и так являются достаточно затратными с точки зрения вычислительных ресурсов.

Для решения поставленной задачи, как будет показано ниже, может успешно применяться метод балансировки нагрузки процессоров, основанный на использовании иерархического подхода. Иерархическая технология получила широкое распространение как статический метод декомпозиции сеточных моделей и состоит из трех этапов: огрубление исходного графа, предварительное разбиение и многоуровневое уточнение [25–27].

Эффективные методы огрубления начальной структуры графа посредством согласованного попарного слияния вершин предложены в работе [26].

На втором этапе проводится декомпозиция самого грубого графа, что требует минимальных затрат расчетного времени. Третья стадия заключается в оптимизации разбиения, которая применяется к соответствующим подобластям графов различных уровней, начиная с самого грубого и заканчивая самым подробным исходным графом. На данном этапе обычно используются алгоритмы оптимизации типа Кернигана-Лина и Фидуччи-Маттейсеса [28,29].

Эффективность рассмотренных подходов к построению моделей распараллеливания для динамического распределения узлов будущей расчетной сетки оценивалась по результатам решения ряда двумерных и трехмерных тестовых задач (рис. 10,11). При этом реализация алгоритмов лишь незначительно усложняется при переходе от двумерного случая к трехмерному.

Декомпозиция расчетных данных на плоскости различными методами для пяти и восьми процессов в ходе распределения узлов около профиля крыла с механизацией (4500 частиц) представлена на рис. 10. Геометрия профиля крыла позаимствована из демонстрационного примера MATLAB “airfoil” [30]. Для оптимального распределения частиц применяются геометрические способы декомпозиции, которые используют принципы координатной или моментной рекурсивной бисекции, а также многоуровневые (иерархические) технологии.

На рис. 11 показан результат использования иерархического подхода для динамической декомпозиции неструктурированных данных в ходе распределения подвижных узлов в трехмерной расчетной области около пространственной модели орбитального корабля Space Shuttle. Узлы распределяются между 96 процессами для некоторого момента времени. Количественные характеристики качества декомпозиции приводятся в табл. 1.

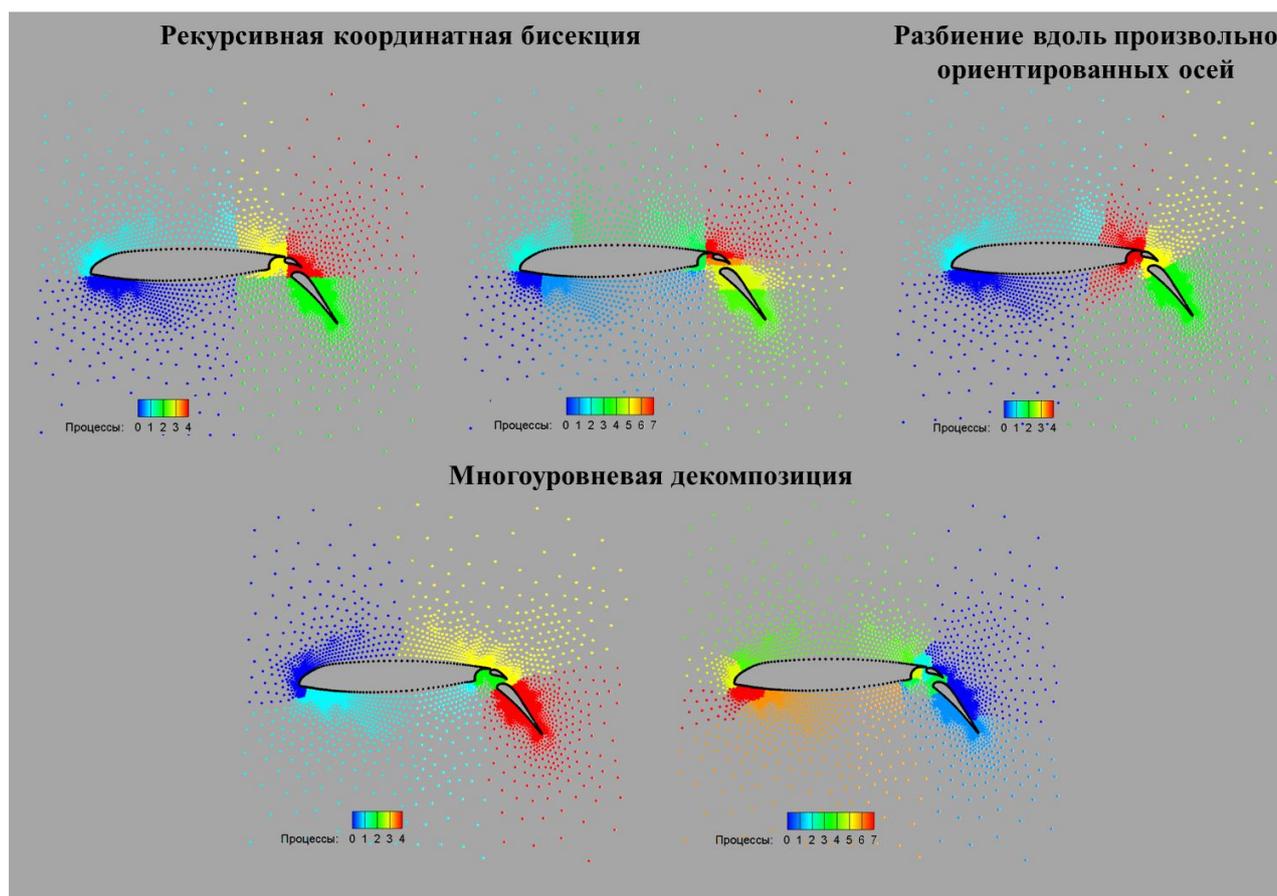


Рис.10. Применение различных методов декомпозиции неструктурированных данных для распределения подвижных узлов будущей расчетной сетки между процессами в некоторый момент времени в ходе молекулярно-динамического моделирования

Представленное разбиение достаточно сбалансировано, так как число “локальных” частиц каждой подобласти отклоняется от среднего значения не более чем на 3%. Число удаленных частиц для каждого поддомена (так называемая область перекрытия) не превышает 20.3% от общего числа подконтрольных узлов. Кроме этого, как видно из рисунка, иерархический подход позволяет максимально снизить коммуникационную нагрузку при обмене данными между соседними подобластями благодаря минимизации их площади соприкосновения.

Перекрытие областей (за счет необходимости учета “отдаленных” частиц) создает дополнительную вычислительную нагрузку, которая составляет 14.57 % от первоначального числа частиц (2 000 000) по всем 96 доменам (для случая, представленного на рис. 11 необходимо обрабатывать 291 334 лишних узла). Как отмечалось ранее, многоуровневый подход является надежным и для большинства случаев превосходит любые геометрические методы по качеству разбиения.

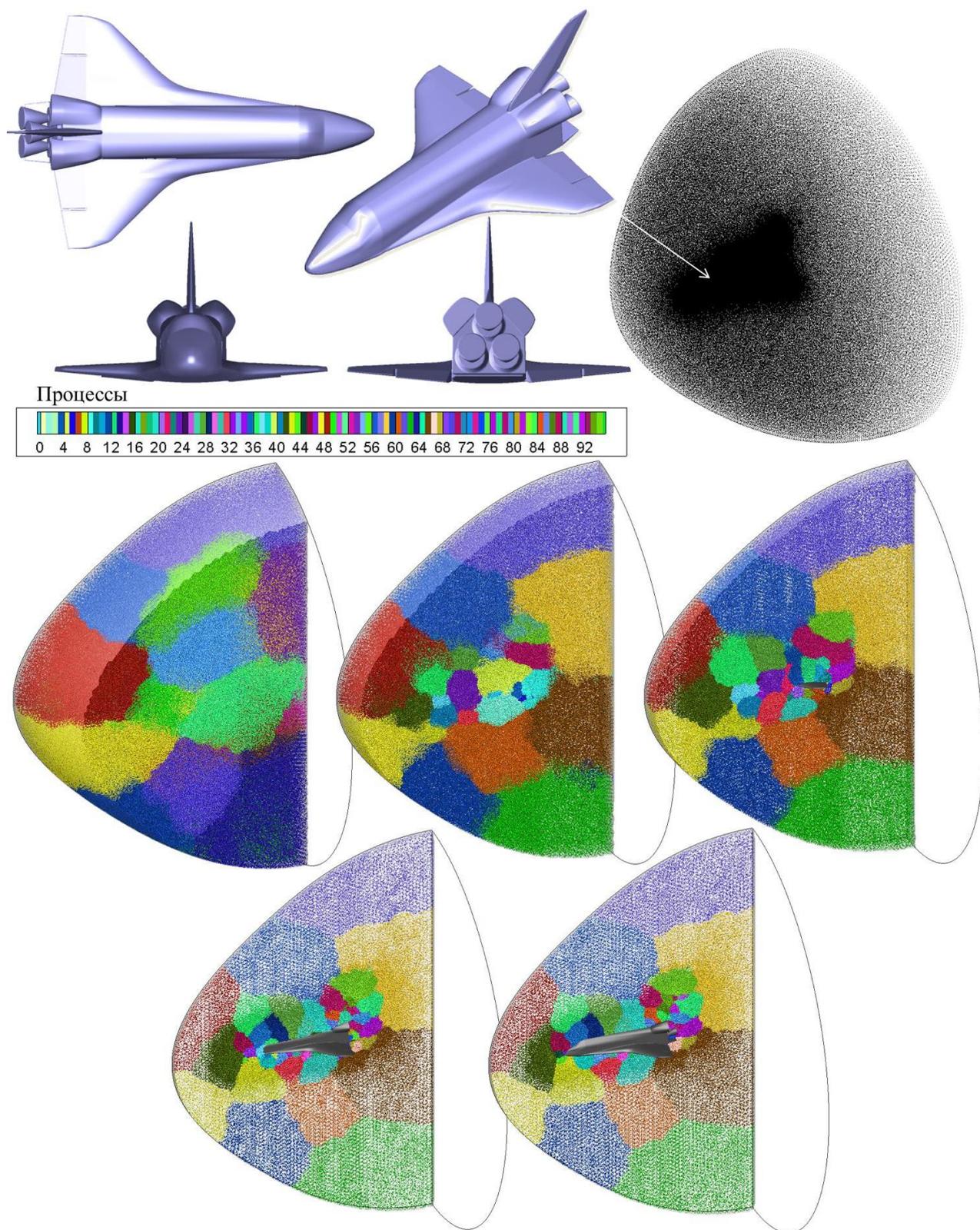


Рис.11. Виртуальная поверхность модели орбитального корабля Space Shuttle и мгновенное распределение 2 млн подвижных узлов в расчетной области между 96 процессами. Деконпозиция данных в ходе молекулярно-динамического моделирования с использованием многоуровневого метода. Виды расчетной области для разных сечений в некоторый момент времени

Таблица 1

Характеристики качества декомпозиции данных (в некоторый момент времени) в ходе динамического распределения $N = 2\,000\,000$ узлов будущей сетки в пространстве расчетной области около виртуальной поверхности орбитальной ступени Space Shuttle

Число подобластей N_p	96		
Число подвижных частиц	2 000 000 (100%)		
Суммарная вычислительная нагрузка с учетом “локальных” и “отдаленных” частиц	2 291 334		
Область перекрытия	291 334 (14.57 %)		
	Минимальное	Максимальное	Среднее
Число локальных частиц (отклонение от среднего, %)	20 214 (-2.97%)	21465 (3.03%)	20 833
Вычислительная нагрузка на отдельный процессор (общее число подконтрольных частиц: “локальных” и “отдаленных”)	21 817	25969	2 291 334
Число “отдаленных” частиц (% от общей нагрузки на процессор)	7.3%	20.3%	12.64%

4. Заключение

Разработана параллельная реализация компьютерного кода для создания двумерных и трехмерных, однородных и адаптивных неструктурированных расчетных сеток, основанного на использовании классических методов молекулярной динамики. Реализованы и изучены эффективные алгоритмы балансировки нагрузки процессоров, использующие геометрические методы или иерархическую технологию.

Представлены результаты использования различных эффективных подходов к динамической декомпозиции неструктурированных данных в ходе распределения подвижных узлов в двумерной расчетной области и трехмерном пространстве около тел сложной формы.

Геометрические методы балансировки не применяют графовое представление системы частиц и не учитывают структурную связность между взаимодействующими узлами, поэтому при использовании геометрического подхода невозможно минимизировать число коммуникационных связей между подобластями. Следовательно, по качеству декомпозиции данных, которое характеризуется не только сбалансированностью разбиения, но коммуникационной нагрузкой, геометрические алгоритмы значительно уступают иерархическому методу.

Эффективность многоуровневого подхода к декомпозиции данных оценивалась по ряду критериев, таких как: сбалансированность разбиения (число локальных частиц в каждой подобласти); число отдаленных частиц для каждой подобласти, определяющее коммуникационную нагрузку; размер областей перекрытия доменов.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю, академику РАН, проф. С.Т. Суржикову за идеи, положенные в основу работы.

Работа выполнена в Лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН в рамках Программы фундаментальных исследований Российской академии наук, при поддержке гранта РФФИ 16-01-00379.

Литература

1. Железнякова А.Л. Унифицированный подход к созданию сложных виртуальных поверхностей и расчетных сеток для комплексного имитационного 3D моделирования современных изделий аэрокосмической техники // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2016. Том 17, вып. 2. 24 с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-2/articles/634/>
2. Zheleznyakova A.L., Surzhikov S.T. Molecular dynamic-based unstructured grid generation method for aerodynamic application // Computer Physics Communication, v.184, (2013) 2711-2727.
3. Zheleznyakova A.L. Molecular dynamics-based triangulation algorithm of free-form parametric surfaces for computer-aided engineering // Computer Physics Communications v.190 (2015) 1-14.
4. Железнякова А.Л. Молекулярно-динамический метод построения неструктурированных сеток в сложных пространственных областях и на криволинейных поверхностях // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2012. Том 13, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2012-13-4/articles/368/>
5. Железнякова А. Л., Суржиков С. Т. Построение пространственных неструктурированных сеток на NURBS-поверхностях сложных изделий авиационной и ракетно-космической техники методом молекулярной динамики // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т.15, вып. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-1/articles/108/>
6. Rogers D.F. An Introduction to NURBS with Historical Perspective. Morgan Kaufman Publishers, San Fransisco, 2001. 324 p.
7. Piegl L.A., Tiller W. The NURBS Book. Springer, 1997. 646 p.
8. Lee K. Principles of CAD/CAM/CAE Systems. Addison-Wesley, California, 1999. 582 p.
9. Скворцов А.В. Алгоритмы построения триангуляции с ограничениями // Вычислительные методы и программирование. №3, 2002. С. 82–92.
10. Скворцов А.В. Обзор алгоритмов построения триангуляции Делоне // Вычислительные методы и программирование. №3, 2002, С. 14–39.
11. FLUENT, Inc., GAMBIT 2.2, User's Guide, Lebanon, NH, USA, 2004. 630 с.
12. Cox M.G. The Numerical Evaluation of B-Splines // J. Inst. Maths. Applies. Vol. 15, 1972. P.95–108.
13. de Boor C. On calculating with B-Splines // J. of Approx. Theory. Vol. 6, 1972. P. 52–60.
14. Verlet L. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamic properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev, 1967, v. 159, p. 98-103.
15. Verlet L. Computer experiments on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions // Phys. Rev, 1968, v. 165, p. 201-214.
16. Немнюгин С., Стесик О. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. 400 с.
17. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений. Интернет – университет информационных технологий. – М: Бином, 2007. 424 с.
18. Berger M.J., Bokhari S. A partitioning strategy for nonuniform problems on multiprocessors // IEEE Trans. Comp. Vol. 36. 1987. P. 570–580.
19. Nour-Omid B., Raefsky A., Lyzenga G. Solving finite element equations on concurrent computers. / In A.K. Noor, editor, Parallel Computations and Their Impact on Mechanics, ASME, 1986. P. 209–227.
20. Patra A., Kim D.W. Efficient mesh partitioning for adaptive hp finite element methods / In International Conference on Domain Decomposition Methods, 1998.
21. Pilkington J.R., Baden S.B. Partitioning with spacefilling curves / Technical Report CS94-349, Dept. of Computer Science and Engineering, Univ. of California, 1994.
22. Mandelbrot B.B. The Fractal Geometry of Nature / New York: W. H. Freeman and Co., 1982.
23. Alauzet F., Loseille A. On the use of space filling curves for parallel anisotropic mesh adaptation // Proc. in 18th International Meshing Roundtable, Springer-Verlag, 2009. P. 337–357.
24. Schamberger S., Wierum J.M. A locality preserving graph ordering approach for implicit partitioning: Graph-filling curves // Proc. 17th Intl. Conf. on Parallel and Distributed Computing Systems, PDCS 2004, ISCA, 2004. P. 51–57.
25. Hendrickson B., Leland R. A multilevel algorithm for partitioning graphs / Technical Report SAND 93-1301, Sandia National Laboratories, 1993.

26. Karypis G., Kumar V. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // *SIAM Journal on Scientific Computing*. Vol. 20, №1, 1998. P. 359–392.
27. Karypis G., Kumar V. Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs // *Journal of Parallel and Distributed Computing*. Vol. 48, № 1, 1998. P. 96–129.
28. Fiduccia C.M., Mattheyses R.M. A linear time heuristic for improving network partitions // *Proc. 19th IEEE Design Automation Conference*, 1982. P. 175–181.
29. Kernighan B.W., Lin S. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs // *The Bell System Technical Journal*. Vol. 49, №2, 1970. P. 291–307.
30. MATLAB. <http://www.mathworks.com/products/matlab/>

Статья поступила в редакцию 03 мая 2017 г.