

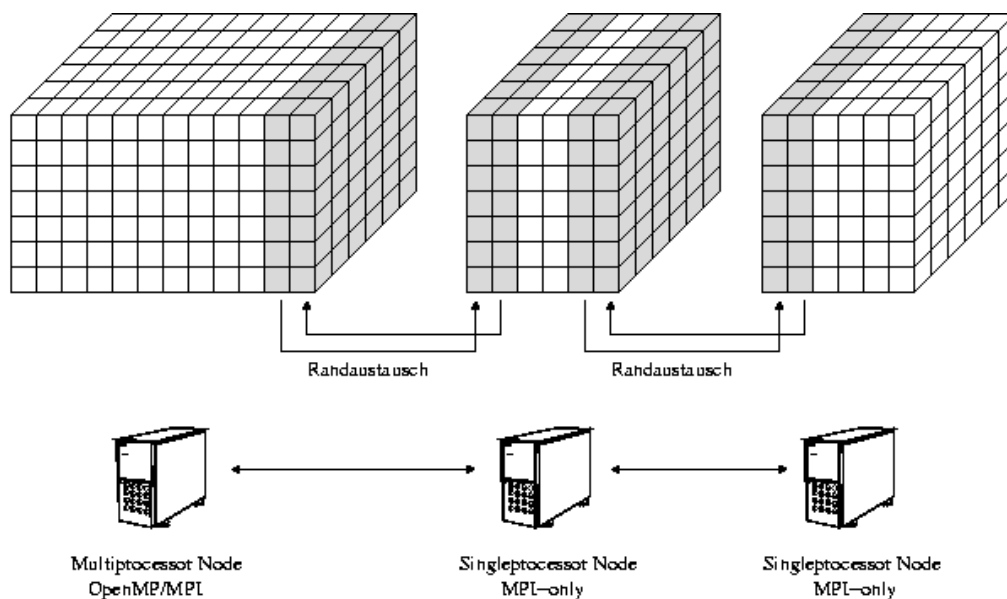
Das IT- und Medienstipendium für innovative Projekte von Studierenden

Tobias Frodl

Hochschule Karlsruhe – Technik und Wirtschaft
University of Applied Sciences

Parallele Simulation von metallischen Materialeigenschaften auf einem Linux Cluster

Abschlussbericht zum Stipendiumsprojekt
vom 01.11.2004-01.11.2005



Die im Rahmen des Karl-Steinbuch Stipendiums durchgeführten Arbeiten zum Thema „Parallele Simulation von metallischen Materialeigenschaften auf einem Linux Cluster“ sind unter der Betreuung von Frau Prof. Dr. B. Nestler innerhalb der Forschergruppe Pace3D (Parallel Algorithmus for Crystal Evolution in 3D) an der Fakultät für Informatik der Hochschule Karlsruhe entstanden.

Die in der Arbeitsgruppe laufenden Forschungsprojekte umfassen eine Vielzahl von Anwendungen in der computergestützten Materialforschung und haben die Entwicklung von Simulationsprogrammen zur Vorhersage von Eigenschaften metallischer Werkstoffe zum Ziel. Bei der Beschreibung von industriellen Herstellungs- und Verarbeitungsprozessen metallischer Legierungen müssen zahlreiche prozessrelevante und materialspezifische Systemvariable berücksichtigt und berechnet werden. Die Prozesse von der Erstarrung der anfänglichen Metallschmelze bis zur Vergrößerung der kristallinen Kornstruktur laufen auf verschiedenen Zeit- und Längenskalen ab und lassen sich nur durch dreidimensionale Simulationen in möglichst großen Rechengebieten beschreiben. Die von den Prozessabläufen vorgegebenen komplexen Anforderungen machen die Entwicklung und Verwendung paralleler Algorithmen auf Hochleistungsrechnern sowie eine Analyse und Optimierung der Performance der verwendeten Algorithmen erforderlich.

Allgemeine Beschreibung der Einbindung der Forschungsthematik:

Die charakteristischen Gefügemerkmale von Mikrostrukturen, die sich während des Erstarrungsprozesses einer metallischen Legierung bilden, spielen für die mechanischen Eigenschaften des entstehenden Werkstoffes eine wichtige Rolle und sind daher für die Entwicklung und Herstellung von Werkstoffen von sehr großer Wichtigkeit. Heutzutage gibt der Forschungsbereich der computergestützten Modellbildung und numerischen Simulation wertvolle und umfangreiche Möglichkeiten, um Einsicht in die ablaufenden Prozesse der Mikrostrukturbildung zu nehmen sowie Vorhersagen über die Erstarrungsprozesse und Optimierung der Prozessführung zu machen. Dadurch wird die gezielte Entwicklung von Werkstoffen mit spezifischen Eigenschaften für bestimmte Anwendungsbereiche möglich. Der Schwerpunkt der, von der Pace3D-Forschungsgruppe entwickelten Simulationsprogramme liegt in der Beschreibung

polykristalliner Kornstrukturen und Phasenumwandlungen in Mehrkomponenten- und Mehrphasensystemen unter Einbeziehung von Massendiffusion, Wärmediffusion, Konvektion, Anisotropie und Elastizität. Abbildung 1 zeigt exemplarisch den simulierten Vergrößerungsprozess einer polykristallinen Kornstruktur.

Die Basis für die komplexen Simulationen bildet ein von Frau Prof. Dr. B. Nestler und Koautoren in (1) entwickeltes, mathematisch-physikalisches Modell, das die Ausbildung der Mikrostrukturen durch einen gekoppelten Satz partieller Differentialgleichungen beschreibt. Im Verlauf der umfangreichen Forschungsarbeiten wurden durch wissenschaftliche Mitarbeiter und Studierende der Hochschule Karlsruhe Simulationsprogramme entwickelt, die die Evolutionsgleichungen auf der Basis eines „Finite Differenzen Verfahrens“ implementiert. Dieses numerische Lösungsverfahren ermöglicht die Simulation und anschließende Visualisierung dreidimensionaler Strukturausbildungen und Kristallisationsprozesse.

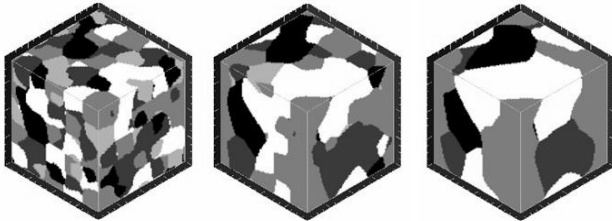


Abb. 1. Simulation des Vergrößerungsprozess einer polykristallinen Kornstruktur.

Parallelisierung der Software:

Um die Vorgänge in praxisrelevanten Legierungen mit diesem Modell simulieren zu können, wird die Berechnung einer Vielzahl von Systemvariablen benötigt. Die Behandlung der Prozesse ist mit einem großen Speicher- und Rechenzeitbedarf verbunden. Weiterhin muss das simulierte Gebiet möglichst groß sein, um akkurate Vorhersagen und die erforderliche Auflösung der Struktur zu gewährleisten. Um die Voraussetzungen erfüllen zu können, wird die Verwendung paralleler Hochleistungsrechner sowohl mit hoher Rechenleistung als auch großem Hauptspeicher unumgänglich. Auf solchen Hochleistungsrechnern kann auch gewöhnliche, serielle Software ausgeführt werden. Eine solche Softwarelösung besitzt aber nicht das Potential, die gebotenen Kapazitäten und Möglichkeiten vollständig auszunutzen. Um Parallelrechner effektiv einsetzen zu können, ist es essentiell, die verwendeten Algorithmen auf parallele Ausführung anzupassen und zu optimieren. Arbeiten zur Parallelisierung und Optimierung der numerischen Verfahren wurden im Rahmen einer Diplomarbeit (2) und einer Bachelor-Thesis (3) umgesetzt.

Parallelisierungsverfahren:

Es gibt generell zwei verschiedene Arten zur Umsetzung von Parallelisierung von Software-Programmen. Die erste Variante basiert auf einer Hardware-Architektur, die mehrere Prozessoren (CPUs) mit einem gemeinsamen Speicher verbindet (siehe Abb. 2). Die zweite Variante verwendet komplette, autonome Computersysteme, die lediglich über einen Kommunikationskanal miteinander verbunden sind (siehe Abb. 3). Da beide Varianten Vorteile sowie Nachteile besitzen, verwenden moderne Hochleistungsrechner meist eine hybride Architektur. Zum Zeitpunkt des Projektbeginns war die Realisierung beider Ansätze geplant, teilweise angegangen, aber noch nicht in konsequenter und praxistauglicher Weise umgesetzt.

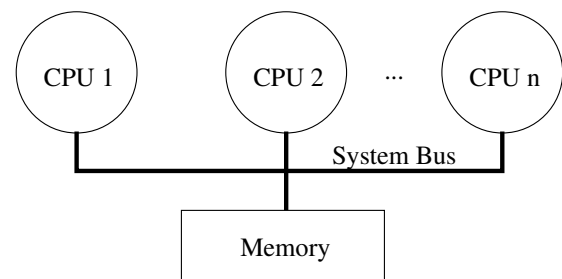


Abb. 2, Mehrprozessorsysteme

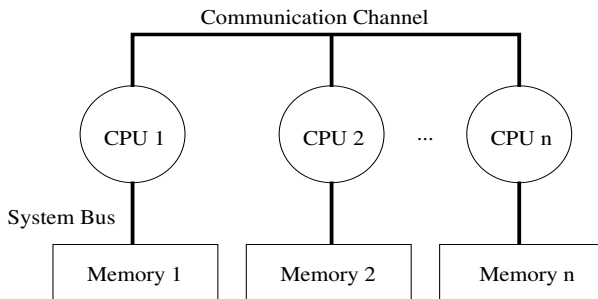


Abb. 3, Netz aus autonomen Systemen.

Projektziele

Ziel des durch das Karl-Steinbuch Stipendium geförderten Projektes waren die Umsetzung der geplanten Parallelisierungskonzepte für das gesamte Simulationsprogramm und die umfangreiche Analyse und Optimierung der Performance in der Anwendung auf reale Simulationsaufgaben. Im Rahmen der bisherigen Parallelisierungsansätze wurde zu Testzwecken Rechenzeit auf dem Hochleistungsrechner des Supercomputing-Centers der Universität Karlsruhe genutzt. Während der Stipendiumslaufzeit wurde an der Fakultät für Informatik der Hochschule Karlsruhe ein eigener, nur für die Forschungsarbeiten der Pace3D Arbeitsgruppe vorgesehenes Linux-Cluster mit 17 Dual-Prozessor Knoten angeschafft und installiert. Dieses System stand für die Projektbearbeitung und zur Entwicklung der parallelen Algorithmen zur Verfügung. Zur Nutzung des Clusters für parallele Simulationen mit der entwickelten Software und zur Durchführung der Performance Analyse wurde im Rahmen der Stipendiumsarbeiten die Vorbereitung und Inbetriebnahme dieses neuen Rechners unterstützend begleitet. Der Einsatz des 17 Knoten Linux Clusters der Arbeitsgrup-

pe ermöglicht eine ausführliche Performance-Analyse zur Bewertung und zum Vergleich der Effektivität des parallelisierten Gesamtsystems. Mit der Optimierung des parallelen Sourcecodes werden die Simulationsprogramme zu einem zukunfts-trächtigen Werkzeug für die virtuelle Materialherstellung und für die Anwendung auf verschiedene Materialsysteme und Werkstoffklassen.

(1). Garcke, B. Nestler, B. Stinner, A diffuse interface model for alloys with multiple components and phases, SIAM J. Appl. Math. 64, 775 ff. (2004)

(2) Götz Olbrischewski, Diploma Thesis: Parallelization and Optimization of the Numerical Solving Algorithm for Phase Field Simulations, FH Karlsruhe, July 2004

(3) Tobias Frodl, Bachelor Thesis: Parallelization of Microstructure Simulations on Multiprocessor Systems, FH Karlsruhe, August 2004

Projektverlauf

1. Umsetzung der Parallelisierung für das vollständige 3D Simulationsprogramm:

In den Vorarbeiten (2) und (3) wurde das Simulationsprogramm mit Hilfe der Programmierstandards OpenMP und MPI für die generelle Verwendung auf Hochleistungsrechnern vorbereitet und getestet. Diese anfänglichen Arbeiten stellten sich allerdings für die in den Simulationsprogrammen verwendeten numerischen Lösungsverfahren als nicht sehr effektiv heraus. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieses Karl-Steinbuch Stipendiums in enger Anlehnung an das Forschungsteam an einer konzeptionell gut

strukturierten, transparenten und über den gesamten Sourcecode konsequenten, einheitlichen Parallelisierung mit Optimierungen wie z.B. dem Einbau von Komprimierungsverfahren zum Transfer von Daten im Netz gearbeitet. Der ursprünglich verfolgte Ansatz sah lediglich eine statische, einmalige Aufteilung des gesamten Gebietes auf die, zur Verfügung stehenden Rechner vor. Durch die Tatsache, dass die aufzubringende Rechenleistung nicht gleichmäßig über das Gesamtgebiet verteilt ist und sich im Verlaufe der Simulation ändert, war die Implementierung einer dynamischen Verteilung des Gebietes unabdinglich. Eine dynamische Gebietsverteilung auf Basis von Mehrprozessorrechnern mit Neuaufteilung der Teilschichten während einer laufenden Simulationsrechnung ist durch die Tatsache, dass alle beteiligten Recheneinheiten auf den gesamten Speicher zugreifen können, sehr gut und homogen zu bewerkstelligen. Im Vergleich dazu erfordert eine Implementierung auf Basis von Mehrknotenrechnern die Umsetzung vieler Subsysteme, da jeder beteiligte Knoten nur sein eigenes Teilgebiet speichert. Neben Kommunikationsfunktionalität zum Austausch von Teilgebieten wird ein zentrales System benötigt, das die Verteilung des Gebietes anhand von definierten Messgrößen vornimmt. Die Analyse der Gesamtarchitektur des Simulationsprogramms ergab als beste Lösung, ein separates Kontrollsystem zu implementieren, das als Monitor für die gesamte Simulation agiert. Neben der dynamischen Gebietsaufteilung übernimmt dieses System weitere Aufgaben wie beispielsweise das Zusammenfügen des Gesamtgebietes zur weiteren Verarbeitung durch Visualisierungstools. Ein wichtiger Aspekt der Parallelisierung war die Instandhaltung und Einpflegung

von neu entwickelten Modulen, die nicht direkt mit der Parallelisierung zusammenhängen. Neben den Anforderungen, die die Mitglieder der Forschungsgruppe an die Parallelisierung stellen, werden Teilaspekte des Systems im Rahmen von zeitlich beschränkten Studienarbeiten implementiert und verbessert. Um eine hohe Fehlerfreiheit zu erreichen, ist es erforderlich, jedes Teilprojekt vor der endgültigen Verwendung auf Fehlerfreiheit und korrekte Implementation sowie Funktionalität auf Parallelrechnern zu testen bzw. entsprechende Anpassungen und Erweiterungen vorzunehmen. Dies erforderte eine möglichst klare und transparente Umsetzung des Parallelisierungsverfahrens und der Algorithmen.

2. Inbetriebnahme des Lösungsprogramms auf einem Hochleistungsrechner

Neben der eigentlichen Parallelisierung des Lösungsprogramms waren die Konfiguration und Inbetriebnahme eines projekteigenen und für die Arbeiten zu Verfügung stehenden Hochleistungsrechners der Hochschule Karlsruhe Teilaufgaben während des Stipendiumszeitraums. Die Inbetriebnahme des Rechners erforderte die Planung eines, den Anforderungen angepassten Softwaresystems. Neben der Auswahl eines Betriebssystems und den, für das Forschungsprojekt wichtigen Softwarekomponenten, war es nötig, das System auf einfache Wartbarkeit hin zu optimieren. Bei Rechnern, die aus mehreren Knoten bestehen, erfordert dies die Implementierung von Mechanismen, die dafür sorgen, dass sämtliche Knoten mit identischer Software arbeiten sowie Änderungen an der Software möglichst effi-

zient auf alle Teilsysteme übertragbar sind.

Neben der Einrichtung des Rechners war es notwendig, das Lösungsprogramm für die Verwendung auf dem Rechner vorzubereiten. Da vorhandene Linux-basierte Compiler bisher parallele Software nur sehr beschränkt unterstützen, wurden verschiedene kommerzielle Produkte auf dem Hochleistungsrechner auf Verwendbarkeit und Kosteneffektivität untersucht. Neben der technischen Funktionalität stand hier auch das verwendete Lizenzierungsmodell im Vordergrund. Rechtliche Fragestellungen, wie beispielsweise die zeitlich beschränkte Verwendung durch Studierende sowie die Benutzung auf mehreren Systemen durch eine einzige Person. Ein weiterer technischer Aspekt war die Möglichkeit, sowohl 32-bit Maschinencode für die Benutzung auf weniger leistungsfähigen Desktoprechnern zu Debug- und Testzwecken als auch 64-bit Code zur Durchführung von praxisrelevanten Simulationen auf dem Hochleistungsrechner erzeugen zu können.

Ergebnisse

Aktueller Stand des Lösungsprogramms:

Seit dem Beginn des Karl-Steinbuch-Stipendiums wurden im Gesamtprojekt zahlreiche Erweiterungen und Anpassungen vorgenommen. Durch die Fortführung der Arbeit an der Parallelisierung und der Integration verschiedener Studienarbeiten, existiert nun eine funktionsfähige, parallelisierte Version des Lösungsprogramms unter Berücksichtigung aller Module und Funktionalitäten, das auf mehreren Architekturen lauffähig ist. Neben gewöhnlichen Intel-basierten Desktop-Rechnern wird die x86-64 Architektur unterstützt, die u.a. von Prozessoren

des Herstellers AMD verwendet wird. Zusätzlich wurde die Kompatibilität mit dem Hochleistungsrechenzentrum der Universität Karlsruhe und dem dort verwendeten IBM AIX Betriebssystem sowie der Rechnerarchitektur beibehalten und neue eingebundene Programmteile entsprechend angepasst. Um eine höchstmögliche Kompatibilität mit anderen, bisher noch nicht beachteten Plattformen und Computersystemen zu gewährleisten, wurde bei der Entwicklung darauf geachtet, dass sämtlicher Source-Code, der für die parallele Ausführung notwendig ist, optional aktivierbar ist. Dies ermöglicht dem Forschungsteam, abhängig vom Zielsystem eine Auswahl der benötigten Funktionalität in beliebiger Kombination zu treffen. Weiterhin vereinfacht die Verwendung einer einzigen Quelle die Entwicklung neuer Programmteile und reduziert die Anzahl der Softwarefehler. Dieser Punkt ist besonders im Hinblick auf die Einbindung eines umfangreichen Moduls zur Simulation von Strömungen nicht zu unterschätzen. In den folgenden Abschnitten wird die grobe Funktionalität der einzelnen, parallelisierten Module erläutert:

Optimierung für Mehrknotenrechner

Merknotenrechner werden durch Anwendung des "Message Passing Interface" (MPI) unterstützt. MPI implementiert Funktionen, die eine standardisierte Kommunikation zwischen den einzelnen Knoten ermöglichen. Bei Aktivierung dieser Funktionalität wird das dreidimensionale Simulationsgebiet parallel zur XY-Ebene in mehrere Segmente aufgeteilt und gleichmäßig auf die teilnehmenden Rechner verteilt. Der Kern der Parallelisierung liegt hierbei im Randaustausch, der nach jedem Rechenschritt durchgeführt

wird, um die modelltechnischen Auswirkungen eines Gebietsteiles auf seine unmittelbaren Nachbarn zu implementieren. Neben dem einfachen Austausch der Ränder werden bestimmte Sonderbedingungen berücksichtigt. Ein Beispiel ist die benutzerinitiierte Gebietsverschiebung bei der Simulation eines, in eine einzige Richtung wachsenden Kristalls eines gerichteten Erstarrungsprozesses.

Weiterhin konnte ein Konzept für die dynamischen Gebietsverschiebung entwickelt und deren Implementierung erreicht werden. Sowohl die Neuverteilung des Gebietes während der Simulation als auch die Konsolidierung der einzelnen Teilergebnisse wird nun automatisch im Verlauf der Simulation durchgeführt. Neben der Verbesserung der Laufzeit des Algorithmus wird dadurch auch eine effiziente Nutzung des Programms auf asymmetrischen Rechnerkonfigurationen wie beispielsweise Computer-Poolräumen ermöglicht.

Optimierung für Mehrprozessorrechner

Die Funktionalität für Mehrprozessorrechner basiert auf OpenMP, einem offenen Standard mit dem Ziel, ein genormtes Interface für die von verschiedenen Betriebssystemen implementierten Mehrprozessorfunktionen sowie weiterer Algorithmen zur Lastverteilung und Synchronisation bereitzustellen. Der Aufbau von OpenMP als Spracherweiterung erleichtert sowohl die Anpassung existierender Programme als auch die Entwicklung neuer Anwendungen.

In dem momentanen Stand des Lösungsprogramms ist eine Parallelisierung auf Ebene einzelner Zellen des simulierten Gebiets implementiert.

Ausblick

Auf der Basis der Simulationsprogramme und der Parallelisierung werden innerhalb der Pace3D Forschungsgruppe und unter Mitwirkung von Studierenden Forschungsprojekte in vielerlei Richtungen fortgeführt und die Funktionalität der Source-Codes erweitert. Die Parallelisierung ist ein Thema, das sich ständig weiterentwickelt und mit dem Source-Code und den Anforderungen wächst und kann daher zu keinem Zeitpunkt als vollständig angesehen werden. Es ist folglich zu erwarten, dass sich in diesem Bereich weitere Arbeiten anschließen. Nach der im Rahmen des Karl-Steinbuch Stipendium erreichten Optimierungen der parallelen Algorithmen wird insbesondere eine umfangreiche Performance-Analyse abhängig von der Komplexität der Systemvariablen, Gebietsgrößen und Rechenumfang angestrebt. Im Jahr 2006 ist eine weitere Veröffentlichung der Ergebnisse in Form eines Beitrages einer Fachzeitschrift oder als Präsentation auf einer Fachtagung vorgesehen.

Veröffentlichungen des Stipendiaten

- (1) Tobias Frodl, Britta Nestler, Michael Selzer:
Parallelization and Optimization of Microstructure Simulations;
SCS Publishing House e. V.: Frontiers in Simulation, ISBN 3-936150-41-9, (2005) 161 – 169.
- (2) Nestler, F. Wendler, T. Frodl, D. Schabunow;
Ein paralleler 3D Simulator zum mikrostrukturbasierten Materialdesign,
Fraunhofer IRB Verlag, Herausgeber: Dieter Spath, Klaus Haasis, Dieter

Klumpp, Aktuelle Trends in der Softwareforschung, ISBN 3-8167-6955-1

(2005), 239-258.

MFG Stiftung

Karl-Steinbuch-Stipendium
Breitscheidstr. 4
70174 Stuttgart
Tel. +49/711/90715/314
stiftung@mfg.de

Über das Stipendiumprogramm

Mit dem Karl-Steinbuch-Stipendium fördert die MFG Stiftung Baden-Württemberg innovative wissenschaftliche und künstlerische IT- und Medienprojekte, die Studierende aus Baden-Württemberg zusätzlich zu Ihrem Studium durchführen.

Die Projekte dauern 6-12 Monate und werden mit bis zu 9.600 € gefördert.

Weitere Informationen:

<http://www.karl-steinbuch-stipendium.de/>