

СРАВНЕНИЕ OPENMP- И CUDA- РЕАЛИЗАЦИЙ АЛГОРИТМА МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕНДРИТНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Д.И. Халирахманов, С.А. Маякова

1. Введение

Разработка и совершенствование различных методов исследования биологических жидкостей с каждым годом представляют все больший интерес при диагностике и моделировании патологических состояний и заболеваний. Данные современных исследований [1 – 8] свидетельствуют о том, что первичные изменения, связанные с действием патогенного фактора на организм возникают, прежде всего, на молекулярном уровне.

Одним из наиболее актуальных направлений в разработке новых, доступных для практической лаборатории диагностических методов является исследование структур биологических жидкостей, которые образуются при переходе их в твердое состояние в процессе кристаллизации. Преимуществами таких методов являются простота, информативность и возможность применения для широкого спектра исследуемых жидкостей. Например, медиками разрабатывается неинвазивный метод кристаллографического исследования различных биологических жидкостей – крови, слезной жидкости, лимфе и т.д. В нем исследуются кристаллограммы, которые представляют собой высушенную при определенной температуре каплю биологической жидкости. Простота и высокая чувствительность позволили методу занять определенное место в диагностике ряда заболеваний. Также данная задача актуальна в приложениях образовательного характера, например, для демонстрации исследуемых процессов при обучении студентов.

Математическое моделирование дает возможность построения моделей подобных процессов и структур, а также значительно упрощает процедуру самой диагностики. Проблемой при подобном изучении может стать значительная вычислительная ресурсоемкость. Рентгеновский анализ позволяет с большой точностью определять длину сторон ячейки кристалла. Элементарные ячейки очень малы и имеют порядок нанометра (10^{-9} м). Например, сторона кубической элементарной ячейки хлорида натрия равна 0,56 нм. Очевидно, что для получения достоверных результатов требуется брать гораздо более мелкое разбиение сетки, что приводит к необходимости проведения больших объемов вычислений.

Основной целью данного исследования является разработка быстрых алгоритмов моделирования роста дендритных кристаллических структур в биологических жидкостях и тестирование их эффективности на вычислительных системах с общей памятью. Выбор систем с общей памятью вызван их широкой распространенностью и общедоступностью, а также наличием большого количества перекрестных зависимостей в разрабатываемых алгоритмах. Использование OpenMP обусловлено гибкостью механизма контроля над поведением параллельного приложения, а также удобством «инкрементального распараллеливания» программ с большими циклами. Адаптация алгоритмов, включающих выполнение однотипных операций над большими объемами данных, к архитектуре ГПУ позволяет, как правило, получить существенное ускорение по сравнению с реализациями без использования ГПУ, что стало причиной выбора CUDA, как наиболее эффективного интерфейса программирования на графических картах.

2. Модель физических процессов, проходящих при кристаллизации

В настоящее время используются различные подходы к изучению структур твердой фазы биологических жидкостей с целью получения диагностической информации, однако основная часть полученных данных остается на уровне описания отдельных феноменов без выявления их ассоциативных связей с теми или иными патологическими отклонениями. Плохо изучена взаимосвязь процесса кристаллизации биологических жидкостей с данными их химического состава и физическими показателями. В большинстве работ, посвященных вопросам роста кристаллов, рассматриваются процессы роста из переохлажденной жидкости, что малоприменимо к жидкостям биологическим.

Данная работа является развитием модели, описанной в статье Баранова В.Г. и Храмова А.Г. «Моделирование процесса роста дендритных кристаллических структур» [1]. В ней рассматривается кристаллизация капли раствора заданного вещества с примесями, зажатой между двумя стеклами, что исключает испарение капли. При росте кристалла в таких условиях главную роль играет диффузия. Однако скорость диффузии – величина очень незначительная. Следовательно, вероятность попадания удаленных молекул к поверхности кристалла крайне мала. При создавшихся условиях кристалл может расти только таким образом, чтобы при минимальной затрате строительного материала продвигаться максимально дальше в ту сторону, где этот материал имеется. Кристалл начинает расти тонкими отростками - дендритами. На практике для диагностики используется метод клиновидной дегидратации – быстрого высушивания образца в течение 2 – 3 часов.

Разобьем область, в которой рассматривается образование кристалла, сеткой на элементарные ячейки. Одну ячейку этой сетки мы будем считать минимальной неделимой единицей пространства – элементарным

объемом. Каждая элементарная ячейка характеризуется своим состоянием: раствором или кристаллом, находящимся в этой ячейке; концентрацией вещества в ячейке; концентрацией примеси в ячейке.

В растворе происходит диффузия вещества и примеси. В каждой точке границы между раствором и кристаллом в каждый момент есть вероятности кристаллизации элементарной ячейки за определенный промежуток времени. При реализации этого случайного события происходит перенос вещества и примеси помимо диффузии: недостающая примесь поступает в ячейку из окружающего раствора, избыточное вещество распределяется по соседним ячейкам. Стоит также отметить, что в каждой ячейке снижение содержания примеси в результате вышеуказанного события пропорционально ее изначальной концентрации. Примесь в уже кристаллизованных ячейках в вышеописанных процессах не участвует.

2.1. Диффузия вещества и примеси

Процессы диффузии вещества и примеси описываются следующим дифференциальным уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right), \quad (2.1)$$

где C – концентрация, D – коэффициент диффузии.

Считаются известными начальные условия (распределение концентрации вещества и примеси в начальный момент времени) и граничные условия (через границу раствора и кристалла диффузия не переносит вещество и примесь).

Для решения дифференциальных уравнений была выбрана простейшая пятиточечная явная разностная схема, имеющая следующий вид:

$$C_{ij}^{k+1} = C_{ij}^k + D \frac{h_t}{h_x^2} (C_{i+1,j}^k + C_{i-1,j}^k - 4C_{ij}^k + C_{i,j+1}^k + C_{i,j-1}^k), \quad C_{ij}^0 = \varphi_{ij} \leq C_{\max}, \quad \frac{\partial C_{ij}}{\partial n} = 0, (i, j) \in \Gamma. \quad (2.2)$$

Эта разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству h_x и первый по времени h_t и устойчива при выполнении условия $\frac{h_t}{h_x^2} \leq \frac{1}{4D}$.

2.2. Вероятности кристаллизации

Кристаллизация элементарной ячейки – это случайное событие, происходящее с некоторой вероятностью. Рост грани кристалла рассматривается как пуассоновский поток событий. Событием является кристаллизация элементарной ячейки. Вероятность кристаллизации p элементарной ячейки в зависимости от шага по времени Δt равна:

$$p = 1 - \exp\left(-V \frac{\Delta t}{\Delta x}\right), \quad (2.3)$$

где V – средняя скорость роста грани кристалла; Δt , Δx – соответственно шаги дискретизации по времени и пространству. За один шаг по времени кристаллизуется одна ячейка, выбранная случайно среди ячеек с одинаковой вероятностью кристаллизации, равной максимальной.

Концентрация насыщения раствора C_0 и базовая скорость роста кристалла V_0 являются известными величинами. Выражения для скорости роста имеют вид:

$$V = V_0 \frac{C_s}{C_0} \left(\frac{\rho_s - C_0}{\rho_s - C_s} \right). \quad (2.4)$$

2.3. Перенос вещества и примеси при кристаллизации

В момент осуществления события кристаллизации концентрация примеси в ячейке ниже плотности кристалла, и в ней имеется некоторое количество вещества. Таким образом, при изменении статуса ячейки необходимо корректировать в ней концентрации вещества и примеси. При этом в кристаллизующейся ячейке необходимо сохранять общее количество жидкости. Для этого при кристаллизации одной ячейки приходится корректировать состояния соседних ячеек – лишнее вещество вытесняется в них, а недостающая примесь забирается из них.

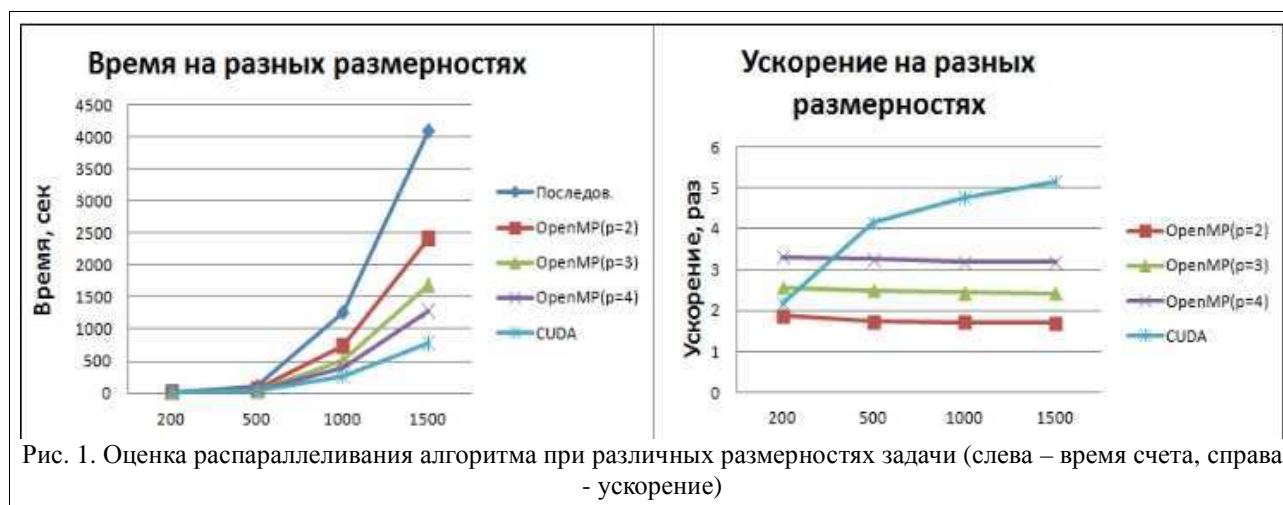
Пусть кристаллизуется ячейка с концентрацией примеси C . После кристаллизации ее концентрация должна стать равной плотности вещества кристалла ρ . То есть в эту ячейку должна дополнительно поступить примесь в количестве $C_n = \rho - C$ из соседних ячеек. Если примеси в них не хватает, то нужное ее количество добывается из следующей группы соседей. В группу относятся все ячейки из раствора, находящиеся на одинаковом расстоянии от кристаллизующейся ячейки. Количество доступных «донорских» групп ограничено из соображений сохранения физичности процесса. Если же примеси не хватает во всех доступных группах, то

кристаллизации не происходит и эта ячейка на следующем временном шаге как потенциальный претендент не рассматривается. При отсутствии изменения количества кристаллизованных ячеек на протяжении заданного числа шагов по времени процесс роста кристалла считается прекращенным.

3. Сравнение быстродействия различных реализаций программы

В процессе решения задачи о кристаллизации биологической жидкости была создана последовательная версия программы, реализующей модель (2.2) – (2.4). При использовании явной разностной схемы, которая занимает значительную часть расчетного времени, а также реализованного алгоритма переноса вещества, модель программирования на общей памяти наиболее предпочтительна из-за большого количества перекрестных зависимостей, которые сложно спрогнозировать. Поэтому в ходе разработки параллельной программы было решено использовать OpenMP и интерфейс программирования приложений CUDA, где все потоки могут иметь доступ к общим массивам данных, таким образом отсутствуют затраты на пересылку. Далее были разработаны и оптимизированы параллельные версии программы с использованием OpenMP и CUDA.

Более подробно с особенностями работы алгоритма и OpenMP – реализации можно ознакомиться в статье «Параллельный алгоритм моделирования роста дендритных кристаллических структур» [6]. Стоит отметить, что в OpenMP - реализации было применено распараллеливание циклов путем распределения итераций между потоками с использованием управляемого планирования и выделение участков алгоритма, не



входящих в циклы и не зависящих друг от друга, в области параллельных структурных блоков. Выполнение расчётов на ГПУ показывает отличные результаты в алгоритмах, использующих параллельную обработку данных, то есть, когда одну и ту же последовательность математических операций применяют к большому объёму данных. При этом лучшие результаты достигаются, если отношение числа арифметических инструкций к числу обращений к памяти достаточно велико. Это предъявляет меньшие требования к управлению исполнением (flow control), а высокая интенсивность вычислений и большой объём данных отменяет необходимость в больших кэшах, как на ЦПУ (операции выполняются над одними и теми же данными). Особенностью CUDA – реализации является то, что самые ресурсоемкие вычисления (до 76% от общего количества арифметических операций) выполняются на ГПУ на каждом временном шаге и результаты пересылаются в оперативную память компьютера. При вычислениях используется декомпозиция по пространству, так же как и в OpenMP - реализации. При этом синхронизация данных между устройствами хоть и занимает значительное количество времени, но может выполняться параллельно с выполнениями на ЦПУ операций, независимых от вычислений ГПУ на данном шаге. Результаты тестирования различных версий данной реализации позволили установить, что операции по переносу вещества при кристаллизации ячейки выгоднее выполнять на центральном процессоре, пересылая при этом сделанные изменения на графический сопроцессор. Таким образом дополнительный выигрыш достигается за счет того, что распараллеливание вычислительных задач происходит не только на графическом процессоре, но и между вычислительными устройствами различной архитектуры. Основной проблемой так же остаются значительные временные затраты на пересылку данных между устройствами.

Результаты тестовых запусков параллельной программы для ряда фиксированных размерностей решетки ($N \times N$) с максимальной концентрацией примеси 5,5%, коэффициентом диффузии $1,5 \cdot 10^{-5}$ см²/сек, концентрацией насыщения 0,36 г/см³, базовой скоростью роста 0,001 см/сек и глубиной забора вещества при кристаллизации в 3 группы ближайших ячеек представлены в Таблице 1 и на Рисунке 1.

Таблица 1. Усредненные результаты запусков различных версий программы при разных размерностях

N	Показатель	Послед.	OpenMP	CUDA
---	------------	---------	--------	------

		программа	p = 2	p = 3	p = 4	
200	Время, сек	9,05	4,84	3,53	2,73	4,16
	Ускорение	1	1,87	2,56	3,32	2,17
500	Время, сек	110,37	63,55	44,36	33,85	26,63
	Ускорение	1	1,74	2,49	3,26	4,15
1000	Время, сек	1261,59	738,12	516,61	395,41	264,32
	Ускорение	1	1,71	2,44	3,19	4,77
1500	Время, сек	4089,41	2419,38	1688,88	1286,83	793,44
	Ускорение	1	1,69	2,42	3,18	5,15

Таким образом, можно отметить что применение CUDA становится целесообразным и гораздо более выгодным на больших размерностях сетки (от 500×500 ячеек и более).

Все запуски последовательной и параллельных версий программы производились на рабочей станции с двумя двухъядерными процессорами Intel Xeon (2.00 ГГц), 4 МБ кэш, 4 ГБ ОЗУ, NVIDIA GeForce GTX 550 Ti и операционной системой Windows 7 x64.

4. Экспериментальная часть

Для описанной в пункте 3 тестовой задачи был проведен анализ влияния основных физических параметров (базовой скорости кристаллизации V_0 , концентрации насыщения C_0 , коэффициента диффузии D и максимальной концентрации примеси в растворе C_{max}) на геометрию и форму кристалла. Множество проведенных экспериментов выявили закономерности, представленные в Таблице 2. Влияние этих же параметров на форму кристалла представлено на Рисунках 2-5.

Таблица 2. Влияние основных физических параметров на геометрию кристалла (↑ - прямая зависимость, ↓ - обратная зависимость, ⇕ - зависимость меняется).

Параметр	C_{max}	C_0	V_0	D
Время роста	↑	↓	↓	⇕
Толщина ветви	↑	не изм.	не изм.	не изм.
Частота ветвей	↑	не изм.	не изм.	не изм.
Диаметр кристалла	не изм.	↓	не изм.	↓

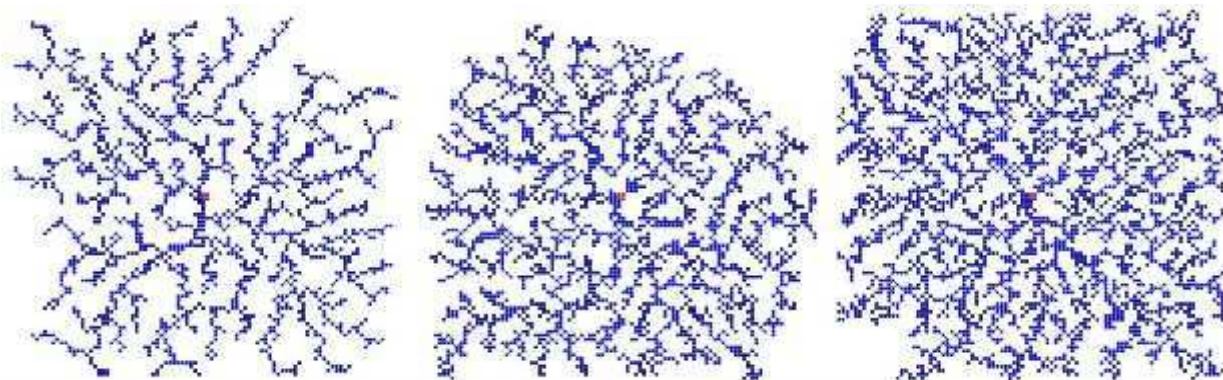


Рис. 2. Влияние максимальной концентрации примеси C_{max} (слева – 4.2%, по центру – 4.5%, справа – 4.7%) на форму и геометрию дендрита для размерности сетки 100×100 ячеек.

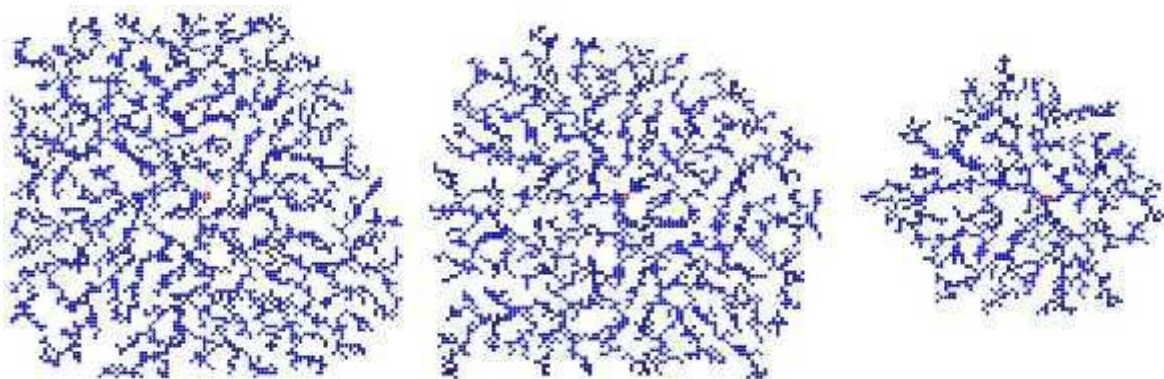


Рис. 3. Влияние концентрации насыщения C_0 (слева – 0.25 г/см³, по центру – 0.36 г/см³, справа – 0.5 г/см³) на форму и геометрию дендрита для размерности сетки 100×100 ячеек.

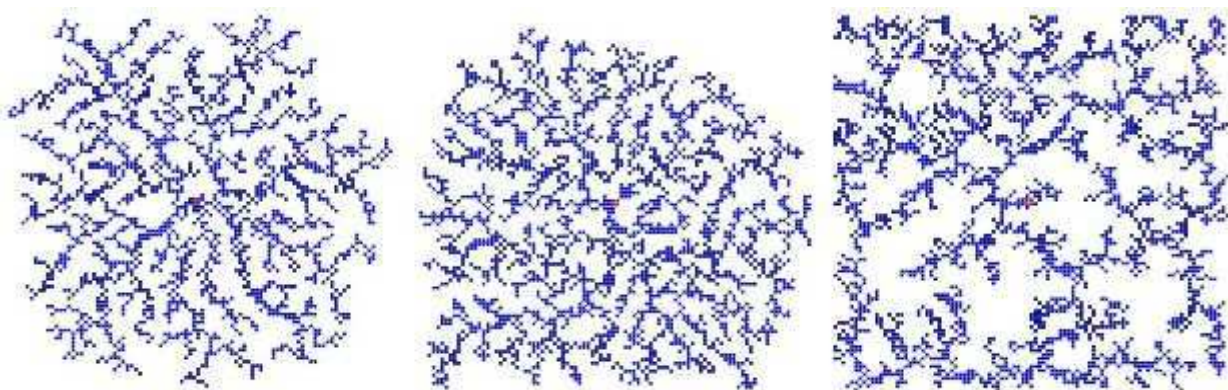


Рис. 4. Влияние базовой скорости роста V_0 (слева – 0.0005 см/сек, по центру – 0.001 см/сек, справа – 0.01 см/сек) на форму и геометрию дендрита для размерности сетки 100×100 ячеек.

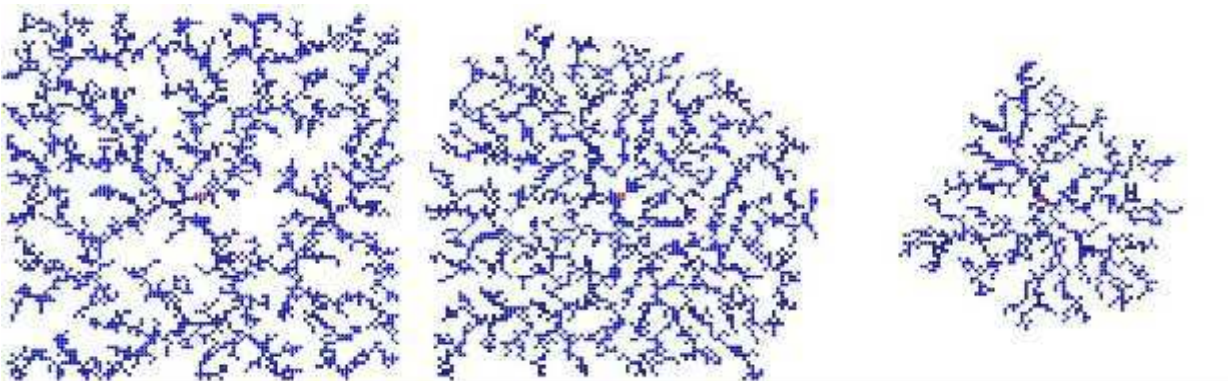


Рис. 5. Влияние коэффициента диффузии D (слева – $0.4 \cdot 10^{-5}$ см²/сек, по центру – $1.5 \cdot 10^{-5}$ см²/сек, справа – $9 \cdot 10^{-5}$ см²/сек) на форму и геометрию дендрита для размерности сетки 100×100 ячеек.

5. Заключение

В ходе данной работы разработан алгоритм для решения задачи моделирования и изучения процесса роста дендритных кристаллических структур из растворов биологических жидкостей. На основе данного алгоритма спроектирована программная система с графическим пользовательским интерфейсом, который позволяет редактировать параметры алгоритма и входные данные, запускать этот алгоритм на исполнение, а также визуализировать процесс роста рассматриваемого кристалла. Использование интерфейса программирования CUDA позволило ощутимо сократить время выполнения программы на по сравнению с последовательной версией (до 4 раз на размерностях от 500 до 1000, до 5 раз на размерностях от 1500 и более). На маленьких размерностях (до 500) наблюдается проигрыш во времени относительно OpenMP программы, однако при увеличении размерности (от 1000 и более) вычисления на ГПУ не только опережают вычисления на ЦПУ, но и продолжают наращивать преимущество с ростом размерности (на размерности 1500 ускорение на

OpenMP достигает 3 против 5 на CUDA). Представленные результаты вычислительных экспериментов показывают эффективность предложенного алгоритма.

С помощью имитационного моделирования исследовано влияние основных параметров, рассмотренных в работе, на форму кристаллов, а также установлена взаимосвязь между доступными для измерения геометрическими параметрами изображений кристаллов и физическими параметрами раствора, а также расширена функциональность и информативность программы путем расчета дополнительных параметров изучаемого процесса.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Баранов В.Г., Храмов А.Г. Моделирование процесса роста дендритных кристаллических структур // Компьютерная оптика, Самара-Москва, 2001, № 21, с. 193-197.
2. Бузовера М.Э., Сельченков В.Л., Сельченкова Н.И. и другие. Математический анализ структур твердой фазы биологических жидкостей // Альманах «Геронтология и гериатрия» Вып. 1. - М., 2001, с. 55-60.
3. Денисов А.Б. Слюнные железы. Слюна. М: РАМН 2003, 132 с.
4. Егорова Э.В., Шилкин Г.А., Толчинский А.И. и др. Кристаллографический анализ слезной жидкости пациентов с катарактой до и после оперативного вмешательства // Брошевные чтения: Тр. Всерос. конф.- Самара, 2002, с. 530-531.
5. Тарасевич Ю.Ю., Православнова Д.М. Качественный анализ закономерностей высыхания капли многокомпонентного раствора на твердой подложке // Журнал технической физики, 2007, т. 77, вып. 2, с. 17-21.
6. Халирахманов Д.И., Маякова С.А. Параллельный алгоритм моделирования роста дендритных кристаллических структур // Сборник научных трудов Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии 2012», 2012, с. 704–710.
7. Шабалин В.Н., Шатохина С.Н. Морфология биологических жидкостей человека. М 2001, 303 с.
8. Шабалин В.Н., Шатохина С.Н. Структурная форма информации в биологических жидкостях // Актуальные проблемы геронтологии.- М., 1999, с. 139-143.