

Суперкомпьютерное моделирование естественных систем

Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности

Д.А. Бикулов^{1,2}, С.С. Макаров², Е.А. Грачёв², Н.Е. Грачёв³, Л.В. Губский⁴

12 ноября 2013 года

¹ООО «Интровижн»

²Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

³ЛУКОЙЛ-Инжиниринг

⁴РНИМУ им. Н.И. Пирогова

Гибридные суперкомпьютеры

- гибридный суперкомпьютер «Ломоносов» включает в себя более тысячи узлов с графическими ускорителями (GPU)
- для эффективных расчетов на GPU подходят только алгоритмы с высокой параллельностью
- некоторые алгоритмы при реализации на GPU получают прирост производительности до двух порядков по сравнению с CPU реализацией
- многие естественные системы имеют в своей природе естественную параллельность
- поэтому GPU подходит для моделирования многих естественных систем

Абсолютная проницаемость пористой среды

Абсолютная проницаемость k

- характеризует проницаемость породы при однокомпонентной фильтрации жидкости или газа
- в реальных образцах колеблется от 1 миллидарси до 5 дарси
- для анизотропных сред используют тензор абсолютной проницаемости
- для определения используют линейный закон Дарси

$$v = \frac{k}{\mu} \nabla P$$

Метод решёточных уравнений Больцмана

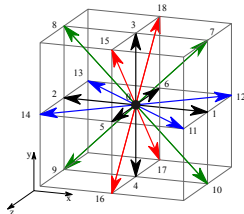
Кинетическое уравнение без учёта внешних сил⁵:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \frac{\mathbf{p}}{m} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

Решеточное
уравнение для интеграла столкновений BGK:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_f} (f_i^{eq} - f_i),$$

$$f_i^{eq}(\rho, \mathbf{v}) = \omega_i \rho \left[1 + \frac{(\mathbf{c}_i \mathbf{v})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \mathbf{v})^2}{2c_s^4} - \frac{(\mathbf{v}, \mathbf{v})}{2c_s^2} \right].$$



⁵Квасников И.А. Теория неравновесных систем. Москва: УРСС, 2003.

Основные проблемы и решения

- **Проблема:** ошибки в узких каналах
Решение: использование изображений с большим разрешением или искусственное увеличение изображений
- **Проблема:** большой объем данных
Решение: использование оптимизаций алгоритма по памяти
- **Проблема:** низкая скорость расчётов
Решение: реализация на графических ускорителях (GPU) и отдельный расчет задачи на множестве GPU

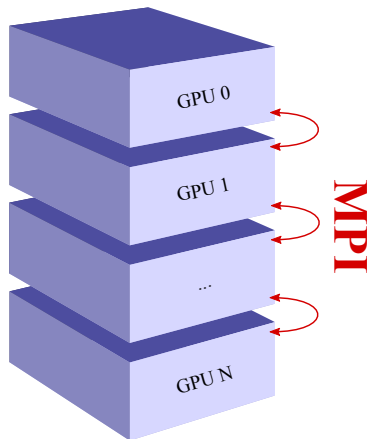
Оптимальная реализация РМБ на CUDA

- В каждой ячейке вычисления производятся независимо в отдельной нити (thread)
- Оптимальное объединение нитей в блоки подбирается для каждой модели GPU отдельно
- Для оптимального расхода памяти используется алгоритм без дополнительного массива данных⁶
- При малой пористости следует хранить значения функций распределения только в пронизаемых ячейках

⁶Jonas Latt, Technical report: How to implement your DdQq dynamics with only q variables per node (instead of 2q)

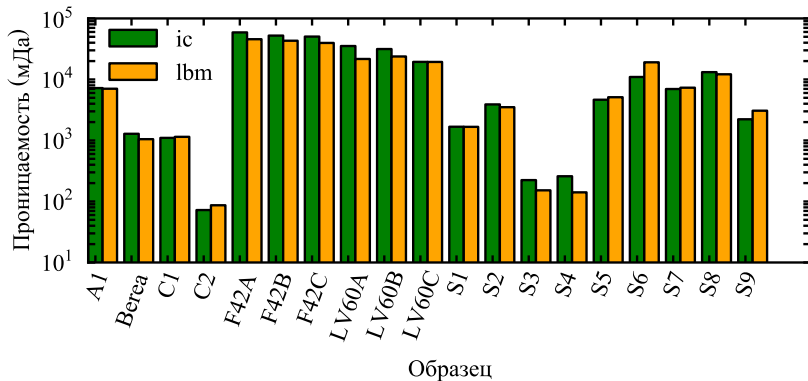
Масштабируемость на CUDA и MPI

- Локальность расчетов обеспечивает эффективную реализацию для архитектуры гибридных суперкомпьютеров
- Ускорение вычислений достигается за счет параллельности на двух уровнях: CUDA и MPI
- Линейный рост производительности РМБ кода при увеличении числа GPU



Результаты

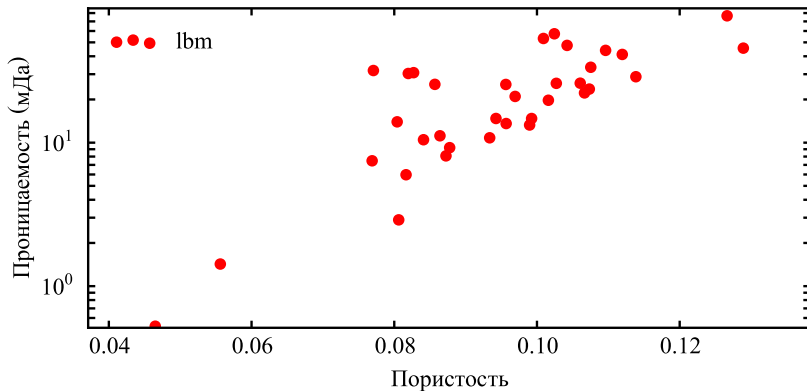
Определение абсолютной проницаемости образцов Imperial College⁷



⁷<http://www3.imperial.ac.uk/earthscienceandengineering/research/perm/porescalemodelling/micro-ct%20images%20and%20networks>

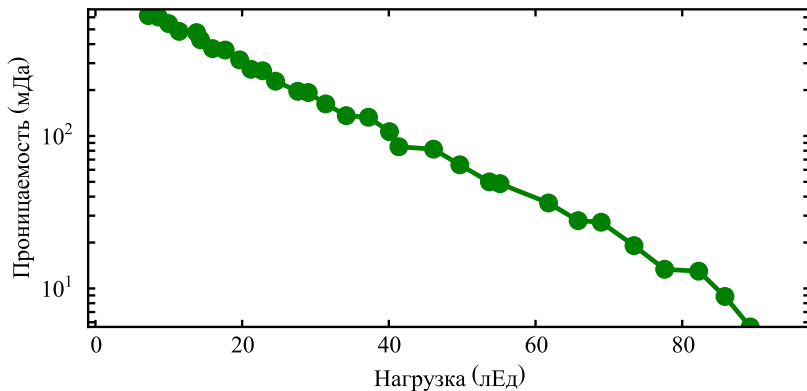
Результаты

Построение зависимостей проницаемость-пористость



Результаты

Проницаемость пропантной упаковки под нагрузкой



Дальнейшее развитие

- реализация различных расширений и дополнений метода решеточных уравнений Больцмана
- реализация многокомпонентной фильтрации для определения фазовых проницаемостей
- минимизация ошибок, возникающих из-за узких каналов в томограмме
- верификация результатов модели на лабораторные данные для низкопроницаемых образцов

Моделирование ишемического инсульта

Ишемический инсульт

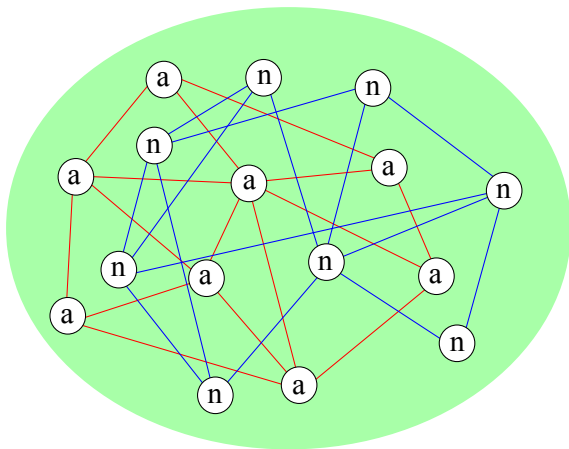
- В развитых странах ишемический инсульт – в тройке самых частых причин смертности и ведущая причина инвалидизации
- При поступлении пациента в клинику необходимо быстро определить время, прошедшее с начала развития инсульта. Для этого могут быть использованы данные МРТ
- Интерпретация данных МРТ в настоящий момент производится преимущественно врачом без применения компьютерного оборудования

Моделирование развития ишемического инсульта

- В настоящий момент несколькими группами учёных разрабатываются компьютерные модели ишемического инсульта, некоторые из них уже применяются для описания данных МРТ⁸
- Разработка модели развития инсульта и ПО по распознаванию пятен на МРТ позволит скорректировать процесс анализа данных МРТ и план лечения
- Физиологическая модель развития инсульта позволит исследовать возможное влияние медицинских препаратов на ход развития патологии и возможность её локализации

⁸Dumont et al. Simulation of Human Ischemic Stroke in Realistic 3D Geometry // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 1539-1557. 18. 6. 2013.

Модельная сцена



Ⓝ нейроны

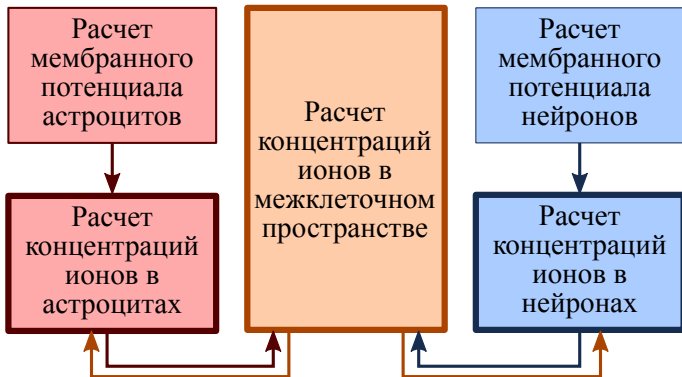
ⓐ астроциты

● межклеточное
пространство

синаптическая связь

щелевые контакты

Схема расчетов



Вычисление одной итерации для нейронов, астроцитов и межклеточного пространства производится независимо.

Математическая модель

Нейроны

$$\frac{dw_i}{dt}(n_l, t) = -f_{i,l}(\mathbf{u}, \mathbf{w}, V)$$
$$\sum_i z_i w_i(n_l, t) = Q_n$$

\mathbf{u} — концентрации ионов в межклеточном пространстве, \mathbf{w} — концентрации ионов внутри нейронов, V — мембранный потенциал нейронов, Q_n — константа.

Математическая модель

Астроциты

$$\begin{aligned}\frac{dw_i}{dt}(a_j, t) &= -f_{i,j+N}(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{q}, V) \\ \sum_i z_i w_i(a_j, t) &= Q_a \\ \frac{dq_k}{dt}(a_j, t) &= -\lambda_{kj}(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{q}, V)\end{aligned}$$

\mathbf{u} — концентрации ионов в межклеточном пространстве, \mathbf{w} — концентрации ионов внутри астроцитов, V — мембранный потенциал астроцитов, \mathbf{q} — физиологические параметры астроцитов, Q_a — константа

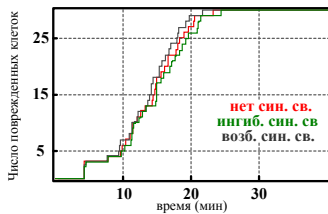
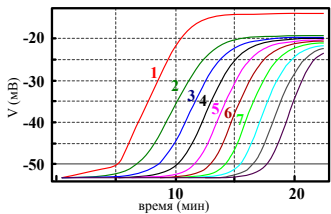
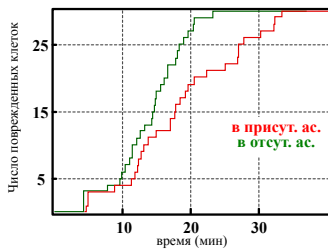
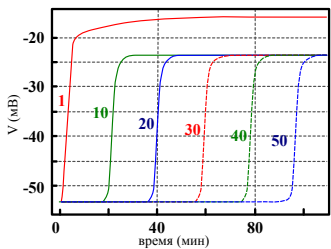
Математическая модель

Межклеточное пространство

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial x_m} \left(D_{mn} \frac{\partial u_i}{\partial x_n}(\mathbf{r}, t) \right) + g_i(\mathbf{u}, \mathbf{w}, V, \mathbf{r})$$

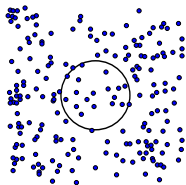
u_i — концентрации ионов i -го типа в межклеточном пространстве, w_i — концентрации ионов i -го типа внутри клеток (нейронов и астроцитов), V — мембранный потенциал клеток.

Результаты моделирования

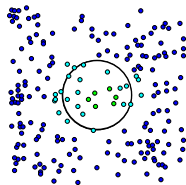


Распространение в однородной и неоднородной среде

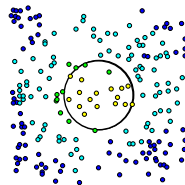
Однородная среда



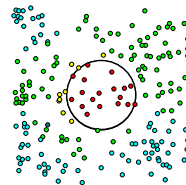
$T = 0$ мин



$T = 7.5$ мин

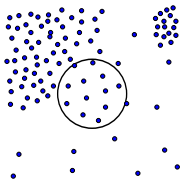


$T = 10$ мин

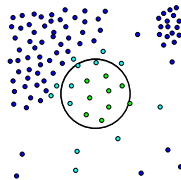


$T = 12$ мин

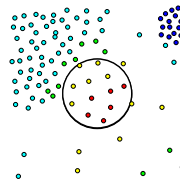
Неоднородная среда



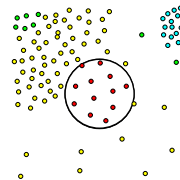
$T = 0$ мин



$T = 7$ мин

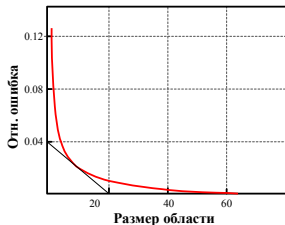
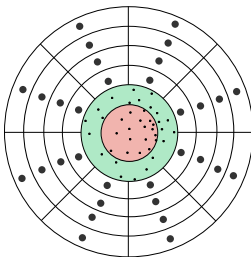
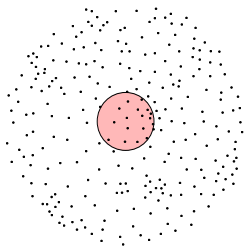


$T = 9.5$ мин



$T = 12$ мин

Метод перенормировки для ускорения решения уравнения диффузии



Производится перенормировка источников в удаленных областях⁹

⁹С.С. Макаров и др. Ускорение вычислений при решении неоднородного уравнения диффузии с помощью перенормировочного метода // Вычислительные методы и программирование. 239-246. 13. 2012.

Метод решеточных уравнений Больцмана для уравнения диффузии¹⁰

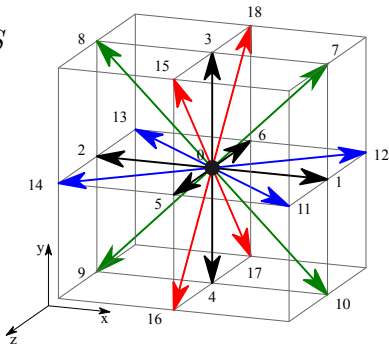
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial x_m} \left(D_{mn} \frac{\partial u}{\partial x_n} \right) + S$$

⇓

$$\mathbf{f}(t + \delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t) = L\mathbf{f}(t, \mathbf{x}) + S\omega$$

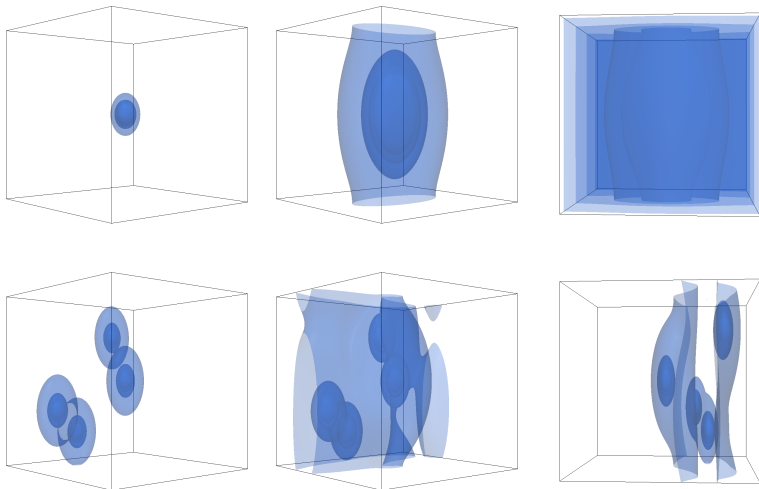
$$\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_Q)$$

$$\sum_q^Q f_q = u$$



¹⁰Hiroaki Yoshida and Makoto Nagaoka. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for the convection and anisotropic diffusion equation // J. of Comp. Phys. 7774-7795. 229. 2010.

Решение уравнения диффузии с помощью РМБ



Результаты

- построена физико-математическая модель, адекватно описывающая процессы развития ишемического инсульта в сером веществе
- предложены методы решения уравнений модели
- получены первые результаты моделирования, проведено их сравнение с доступными экспериментальными данными

Дальнейшее развитие

- оптимизация программного обеспечения для суперкомпьютеров с гибридной архитектурой
- рассмотрение белого вещества и новых переменных (концентраций нейромедиаторов, электролитов, изменений клеточных объёмов), учёт взаимодействия системы клеток с гематоэнцефалическим барьером, добавление модели сосудистой сети
- адаптация трехмерной модели к атласу головного мозга
- верификация результатов модели на данные магнитно-резонансной томографии

Заключение

- многие процессы в природе параллельны изначально по своей структуре
- суперкомпьютерные вычисления позволяют моделировать эти процессы
- гибридные суперкомпьютерные вычисления для некоторого подмножества задач оказываются эффективнее традиционных
- суперкомпьютерный прибор — «последний шанс» моделирования полноразмерной задачи перед непосредственным экспериментальным исследованием

Спасибо за внимание!

Дмитрий Бикулов
<dmitry@bikulov.org>