Kapitel 8

Turbulenzsimulation auf Parallelrechnern

Im Rahmen einer Kooperation des Zentrums für Paralleles Rechnen (ZPR) mit der Deutschen Forschungsanstalt für Luft- und Raumfahrt (DLR) arbeiten wir an der Parallelisierung eines Programms zur Simulation turbulenter Strömung. Turbulenz ist ein Strömungszustand, der in vielfältigen Formen in unserer Atmosphäre auftritt und insbesondere bei der Vermischung von Stoffen wichtig ist. Innerhalb der aktuellen Umweltdiskussion ist die Erforschung dieser Diffusionsprozesse ein wesentlicher Baustein zum Verständnis der komplexen Abhängigkeiten zwischen Schadstoffemission und Umweltbelastung. Das Werkzeug zur Untersuchung der Turbulenz ist ein umfangreiches Programmpaket, mit dem eine Strömung unter dem Einfluß von Scherung, Trägheit und thermischen Kräften berechnet und nach vielfältigen Kriterien ausgewertet werden kann.

Modellbildung

Die Strömungsgrößen, wie Geschwindigkeiten, Temperatur und Druck, ergeben sich bei der Simulation aus der Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes- und Energiegleichungen, einem komplexen System von Differentialgleichungen, welches mit numerischen Verfahren näherungsweise gelöst wird. Die Größen sind auf einem dreidimensionalen Gitter definiert, welches das quaderförmige Simulationsgebiet gleichmäßig bedeckt. Der Grad der Übereinstimmung der Simulation mit atmosphärischen Strömungen hängt dabei, ein korrektes Verfahren zur Integration der Differentialgleichungen vorausgesetzt, im wesentlichen von der Anzahl der Gitterpunkte ab. Diese wiederum ist durch die Rechenleistung und Speicherkapazität des zur Simulation benutzten Computers beschränkt.

Die Lösung des expliziten Teils der Navier-Stokes-Gleichung erfolgt durch einen Adams-Bashforth-Schritt. Dies ist ein Finite-Differenzen-Verfahren zweiter Ordnung. In einer anschließenden Druckkorrektur wird der Druck als Lösung einer Poisson-Gleichung berechnet, und die Geschwindigkeitsfelder werden damit korrigiert. Die Auswertung der Strömungsgrößen erfolgt statistisch und spektral. Nach Transformation der Daten in den Fourier-Raum werden die Energie- und Dissipationsspektren erstellt.

Parallelisierung

Auf den Vektorrechnern der DLR werden zur Zeit Produktionsläufe mit Auflösungen von 128^3 Punkten im täglichen Betrieb durchgeführt. Mit einer dabei erreichten Rechenleistung von circa 150 MFlop/s und einem Speicherbedarf von einem halben Gigabyte benötigt eine solche Simulation 4 Stunden CPU Zeit auf einem Prozessor der Cray Y-MP. Der Grad der Turbulenz der so simulierten Strömung (gemessen als Reynoldszahl) ist jedoch im Vergleich zu atmosphärischen Strömungen zu gering. Eine entscheidende Verbesserung ist durch eine Verfeinerung des Gitters möglich. Die dafür notwendige Rechenleistung steht heutzutage nur auf Parallelrechnern zur Verfügung. Aus diesem Grunde wurde vor zwei Jahren mit der Parallelisierung des Programms begonnen.

In einem gemeinsamen Projekt des Zentrums für Paralleles Rechnen an der Universität zu Köln und der DLR wurde das Simulationsprogramm so umgestaltet, daß es jetzt auf einem breiten Spektrum von Parallelrechnern einsetzbar ist. Durch die Verwendung der portablen Kommunikationsbibliothek MPI, die den Datenaustausch zwischen den Prozessoren des Parallelrechners regelt, ist es möglich, das Programm in kürzester Zeit auf verschiedenen parallelen Architekturen zu implementieren. Dadurch konnten Höchstleistungsrechner mehrerer Anbieter miteinander verglichen werden.

Die Parallelisierung basiert auf dem Konzept der Datendekomposition. Dabei bearbeitet jeder Prozessor einen ihm zugeordneten Datenbereich und tauscht gegebenenfalls zusätzliche Informationen mit den restlichen Prozessoren aus. Durch eine doppelte Berechnung der Daten auf den Grenzschichten der einzelnen Bereiche können mit dieser Methode große Teile jedes Integrationsschrittes ohne weitere Kommunikation durchgeführt werden.

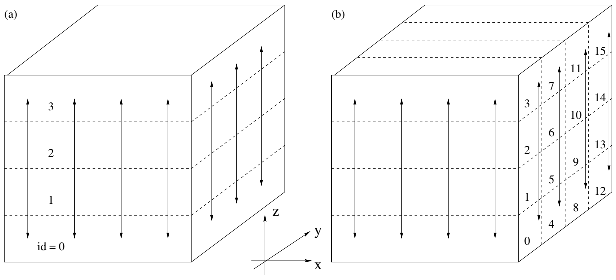

Abbildung 8.1: *Datendekomposition: (a) eindimensional und (b) zweidimensional. Die Pfeile bezeichnen die Verteilung der tridiagonalen Gleichungssysteme.*

Während der für inkompressible Strömungen notwendigen globalen Druckkorrektur sind eine zweidimensionale Fouriertransformation (FFT) und die Lösung tridiagonaler Gleichungssysteme erforderlich. Die zweidimensionale FFT kann als eine Folge von eindimensionalen Transformationen betrachtet werden, die jeweils autark auf den Daten eines Prozessors durchgeführt werden sollten. Aus diesem Grunde teilen wir das Simulationsgebiet in waagerechte Quader auf, die in x-Richtung über die gesamte Breite des Gebietes reichen. Nach der ersten eindimensionalen FFT (in x-Richtung) wird das Feld transponiert und die zweite FFT in y-Richtung durchgeführt. Eine sogenannte eindimensionale Aufteilung in horizontale Scheiben bietet zwar den Vorteil, die gesamte 2D-FFT ohne Datentransposition berechnen zu können, jedoch entstehen dabei zu wenige Teilgebiete, um sie auf massiv-parallelen Rechnern mit bis zu 512 Prozessoren auf die Knoten verteilen zu können.

Nach der Fouriertransformation sind tridiagonale Gleichungssysteme zu lösen, die wie in Abbildung 8.1 angedeutet verteilt sind. Hierfür haben wir ein neues Verfahren entwickelt, welches auf einer Divide-and-conquer-Strategie basiert. Jeder Prozessor löst dabei in einem ersten Schritt die ihm zugeordneten Teile des Systems. Mit den Lösungen eines globalen Korrektursystems werden anschließend die Teillösungen korrigiert.

Rechnertyp	*Anzahl Prozessoren*	*Laufzeit pro Zeitschritt*	*Speed-up*
Cray T3D	16	6.07	
	32	3.22	
	64	1.77	
	128	0.93	
IBM SP-2	1	36.51	1.0
	2	17.76	2.0
	4	7.85	4.6
	8	3.74	9.7
	16	1.86	19.6
	32	0.96	38.0
	64	0.58	62.9
SNI SC900	1	24.92	1.0
	2	13.05	1.9
	4	6.18	4.0
	8	3.34	7.5
	16	3.30	7.6

Tabelle 8.1: Laufzeiten in Sekunden und Speed-ups für Simulationen auf 128^3 Gitterpunkten.

Erfahrungen und Ergebnisse

Wir haben die parallele Turbulenzsimulation auf verschiedenen Parallelrechnern implementiert und dabei einen Überblick über die Leistungsfähigkeit des Programms auf diesen Rechnerarchitekturen erhalten. Besonders interessant waren folgende Parallelrechner der Firmen Cray, IBM und Silicon Graphics:

CRAY T3D: 256 DEC Alpha Prozessoren mit je 64 MB Speicher und einer maximalen Rechenleistung von 150 MFlop/s (Installation am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin).

IBM SP-2: 58 Power2-Prozessoren mit je 256 MB und einer maximalen Rechenleistung von 267 MFlop/s. Zusätzlich 8 Power2 mit 128 MB und 133 MFlop/s (Deutsche Forschungsanstalt für Luft- und Raumfahrt in Köln-Porz).

SNI SC900/ SGI Power Challenge: 16 MIPS R8000 Prozessoren mit 8 GB gemeinsamem Speicher und einer Prozessorleistung von 300 MFlop/s (Regionales Rechenzentrum an der Universität zu Köln).

Alle drei Rechner unterstützen das SPMD (Single Program Multiple Data) Programmiermodell. Die Kommunikation erfolgt auf der Cray T3D über eine dreidimensionale Gittertopologie, auf der SP-2 über einen Kreuzschienenschalter, der direkte Schaltungen zwischen zwei beliebigen Prozessoren zuläßt und auf der SNI SC900 über einen gemeinsamen Datenbus mit 1,2 GB Bandbreite.

Die Portierung des Codes auf die oben beschriebenen Rechnersysteme gestaltete sich aufgrund der Verwendung von MPI unkompliziert. Obwohl das Shared-Memory-Konzept der SGI Power Challenge grundsätzlich nicht für die Message-Passing-Programmierung entwickelt wurde, stellte sich heraus, daß die Maschine gut für diese Art von Parallelisierung geeignet ist.
Bei einem Vergleich der Laufzeiten ist zu berücksichtigen, daß die Leistungsmessung auf der SGI im normalen Benutzerbetrieb stattfand. Der Datenbus und die Prozessoren mußten also mit vielen anderen Benutzern geteilt werden. Grundsätzlich anders ist dies auf der Cray T3D. Hier erhält man eine feste Anzahl Prozessoren zur exklusiven Nutzung zugeteilt. Auch auf der SP-2 der DLR wurden für die Zeitmessung die Prozessoren und die Kommunikation über den High Performance Switch in diesem dedizierten Modus betrieben.

Die in der Tabelle (8.1) dargestellten Zeiten beziehen sich auf Simulationen mit einer Auflösung von 128^3 Gitterpunkten. Mit *Laufzeit pro Zeitschritt* bezeichnen wir die Zeit in Sekunden, die für einen Integrationsschritt benötigt wird. Ein Produktionslauf benötigt bei dieser Auflösung typischerweise mehrere tausend solcher Zeitschritte. Der Speed-up bezieht sich auf die Laufzeit auf einem Prozessor innerhalb des gleichen Rechners. Auf der Cray T3D konnte aus Speicherplatzgründen das Programm nicht auf einem Prozessor laufen. Aus diesem Grunde kann hierfür kein Speed-up angegeben werden.

Das Programm skaliert auf allen drei Architekturen sehr gut. Dabei ist der superlineare Speed-up auf der IBM SP-2 auf eine effektivere Nutzung des Caches zurückzuführen, wenn die auf dem einzelnen Prozessor zu berechnenden Teilfelder kleiner werden. Die schnellste Laufzeit erreicht man auf 64 Prozessoren der SP-2 mit 0.58 Sekunden. Auf der T3D ist man auf 128 Prozessoren mit 0.93 Sekunden um das 1.6-fache langsamer und erhält in etwa die gleiche Leistung wie auf 32 Prozessoren der SP-2. Mit nur 8 Prozessoren benötigt die SGI zwar wesentlich länger (3.34 Sekunden), erreicht aber die höchste Rechenleistung pro Prozessor.