

Всероссийская летняя XXXIX молодежная Школа-
конференция по параллельному программированию

Разработка клеточно-автоматной модели разделения фаз с целочисленным алфавитом состояний и её параллельная программная реализация

Участник: Глинский Кирилл Александрович
Руководитель: Медведев Юрий Геннадьевич

Описание моделируемого физического процесса

Если налить в плоский сосуд две несмешивающиеся жидкости (фазы) и перемешать их, то начнётся процесс разделения этих фаз: каждая жидкость будет собираться в крупные пятна.

Цель работы

- Создать новую клеточно-автоматную модель разделения фаз с целочисленным алфавитом состояний, сохраняющую массы взаимодействующих веществ, и выполнить её параллельную программную реализацию с использованием библиотеки клеточно-автоматных топологий.
- Изучить основы параллельного программирования.

Задачи

- Реализовать с использованием библиотеки клеточно-автоматных топологий существующую клеточно-автоматную модель разделения фаз с бинарным алфавитом.
- Разработать модель разделения фаз с целочисленным алфавитом и сохранением массы.
- Распараллелить модуль обхода клеточного массива из библиотеки клеточно-автоматных топологий в системе с общей памятью с помощью OpenMP.

Реализация существующей модели

- Клеточный массив имеет топологию двумерной квадратной решетки.
- У каждой клетки 8 соседей.
- Состояние клетки $X \in \{0,1\}$ обозначает наличие в данной клетке одной из двух несмешивающихся фаз (веществ).

- Функция переходов клетки состоит в подсчете суммы состояний соседей $S = \sum_{i=1,2,\dots,8} X_i$. Если $S > 5$ или $S = 4$, то клетка переходит в состояние $X' = 0$, иначе $X' = 1$.
- Начальное состояние - случайное распределение нулей и единиц (веществ).
- Реализована функция переходов клетки на языке Си, которая автоматически применяется ко всем клеткам массива средствами библиотеки клеточно-автоматных топологий.

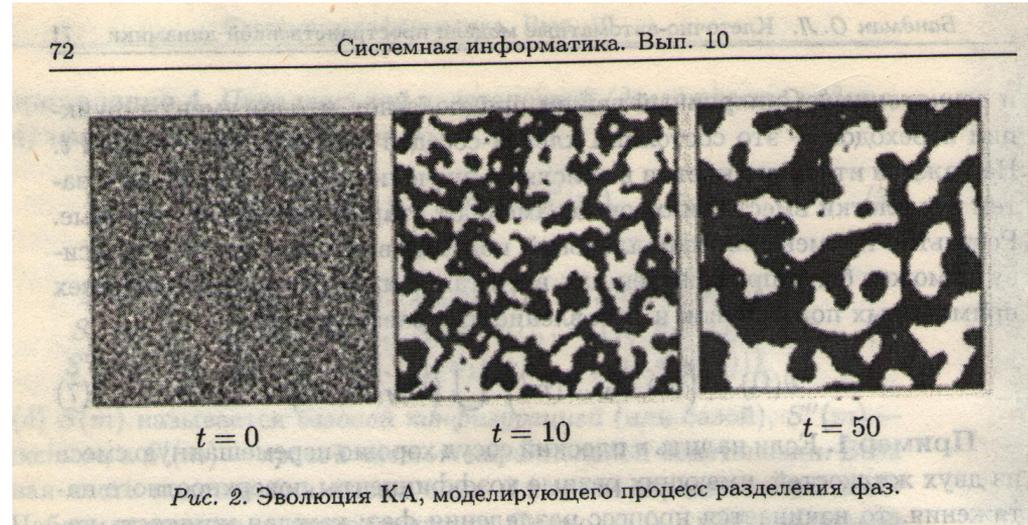
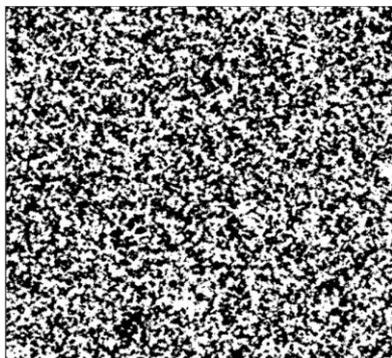
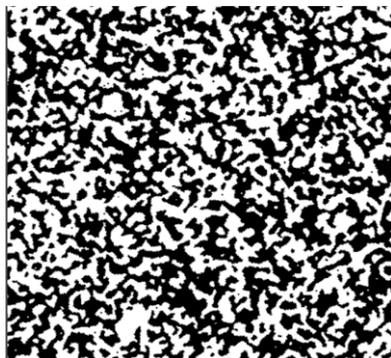


Иллюстрация из работы Бандман О. Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики размер клеточного массива 200x200 клеток

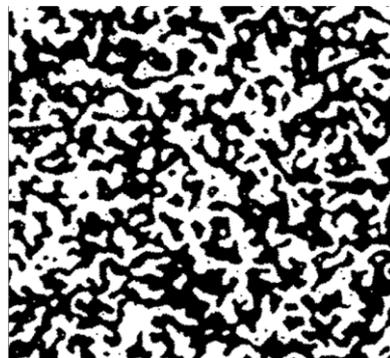
Результаты моделирования 500x500 клеток



T = 0



T = 5



T = 20



T = 100



T = 200



T = 500



T = 1000



T = 2000

Разработка и реализация новой модели

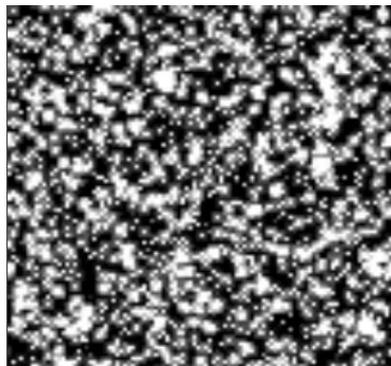
Существующая модель при некоторых начальных условиях дает некорректный результат, т.к. не гарантируется сохранение массы веществ. Поскольку новая модель сохраняет массу, то она лишена этого недостатка. Также она имеет целочисленный алфавит, состояние её клеток $X \in \{0, 1, \dots, X_{\max}\}$ отражает количество вещества в клетке.

Реализована функция переходов клетки на языке Си, которая автоматически применяется ко всем клеткам массива средствами библиотеки клеточно-автоматных топологий.

Правила переходов клетки.

- Количество вещества в клетке, при котором наблюдается равновесие силы тяжести и поверхностного натяжения, выбирается произвольно и принимается равным K .
- Если состояние клетки $X > K$, то она оставляет у себя количество вещества $X' = K$ и распределяет между выбранными соседями поровну величину $X - K$. Соседи выбираются из тех, состояние которых $X_i < K$ таким образом, чтобы сумма величин $X - K$ и $\sum X_i$ выбираемых соседей, деленная на количество выбираемых соседей, была не меньше X_i каждого выбранного соседа. При этом X_i каждого выбранного соседа не должно превосходить X_j любого невыбранного соседа и количество выбранных соседей должно быть максимально возможным. Остаток от деления отдаётся случайному из выбранных соседей.
- Если состояние клетки $X = K$ и она имеет менее трёх соседей с состояниями $X_i \geq K$, то эта клетка выбирает соседа, состояние X_i которого максимально среди всех соседей с состояниями $X_j < K$ и передаёт ему величину $K - X_i$, так что состояние этого соседа становится $X_i' = K$, а у себя оставляет величину $X' = X_i$.
- Если состояние клетки $X < K$ и у неё нет соседей с состоянием $X_i \geq K$, то она распределяет максимальную из двух величин: X и $8 \cdot K - \sum X_i$, $i = 1 \dots 8$, среди своих соседей, передавая по $K - X_i$ каждому, начиная с соседа с максимальным X_i . Тогда эта клетка перейдёт в состояние X' , равное максимальной из двух величин: 0 и $X - 8 \cdot K - \sum X_i$.
- В остальных случаях состояния клеток остаются неизменными: $X' = X$, $X_i' = X_i$, $i = 1 \dots 8$.

Результаты реализации новой модели 100x100 клеток



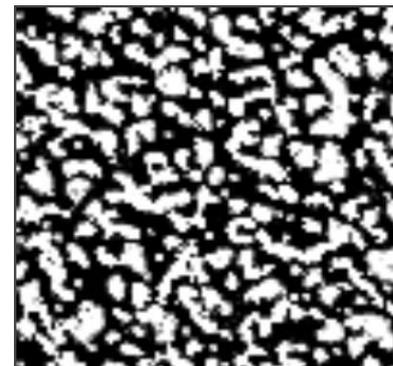
T=1



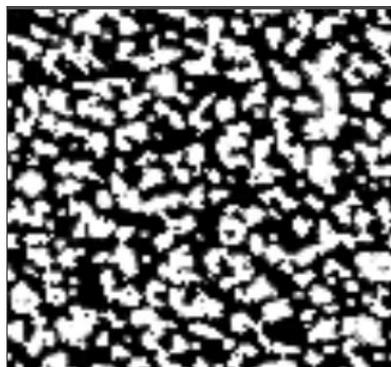
T=10



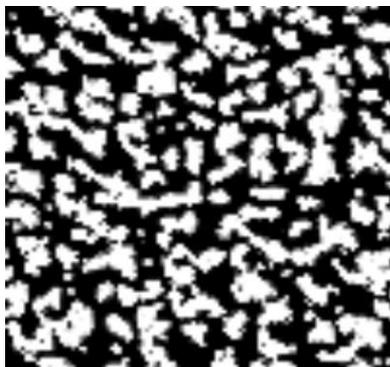
T=50



T=100



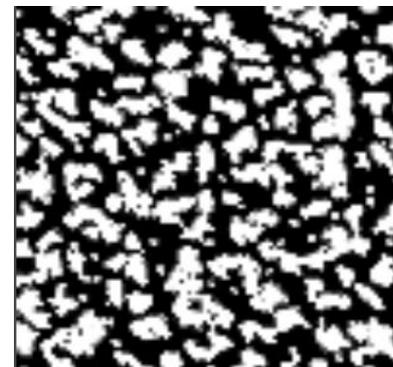
T=500



T=1000



T=2000



T=5000

Распараллеливание модуля обхода клеточного массива библиотеки

Распараллеливание осуществлялось с помощью OpenMP.

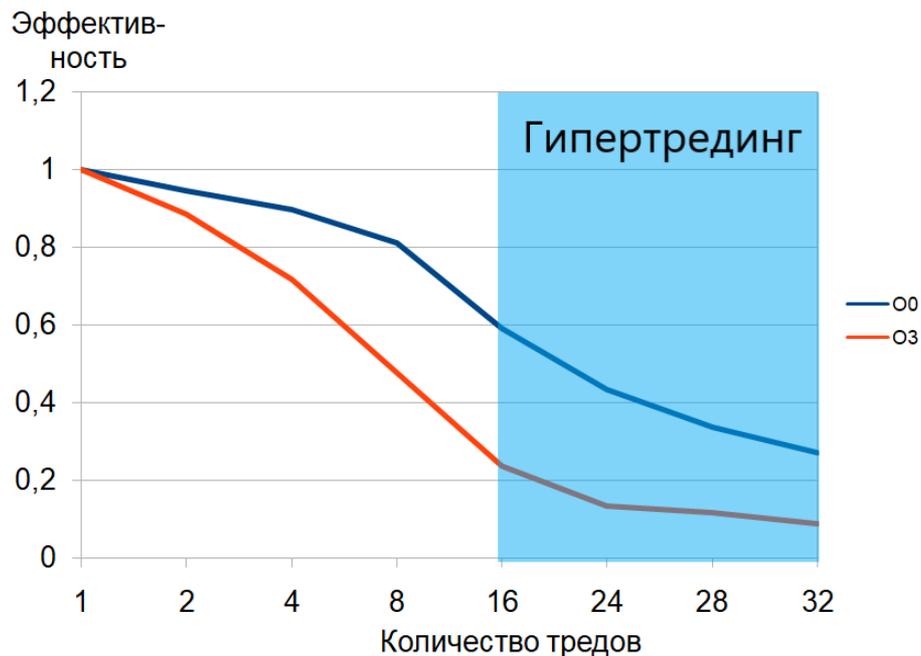
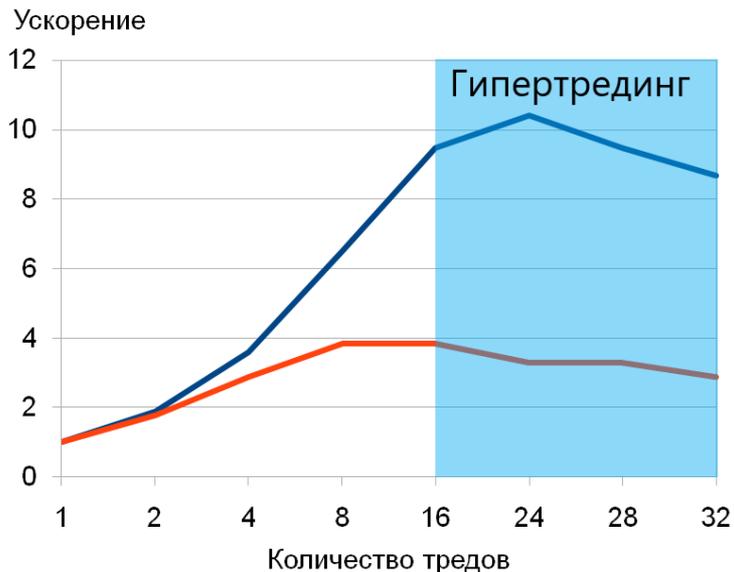
Декомпозиция клеточного массива по тредам путём вставки директив компилятора в участок кода программы, отвечающий за обход клеточного массива.

2 * 8 Core Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620 v4 @ 2.10GHz

Эффективность распараллеливания

| Уровень оптимизации | количество тредов | | | | | | | |
|---------------------|-------------------|----|----|----|----|----|----|----|
| | 1 | 2 | 4 | 8 | 16 | 24 | 28 | 32 |
| 00 | 104 | 55 | 29 | 16 | 11 | 10 | 11 | 12 |
| 03 | 23 | 13 | 8 | 6 | 6 | 7 | 7 | 8 |

Время выполнения 100 итераций, 800x400 клеток
Компилятор gcc version 7.5.0



Планы на будущее: еще одна новая модель

Представленная в докладе новая целочисленная модель не собирает вещество в крупные круглые капли, даже при выполнении большого количества итераций.

Ведётся разработка новой модели, более точно описывающей процесс разделения фаз на длительных временных интервалах.

Результаты

- Реализована существующая клеточно-автоматная модель разделения фаз с бинарным алфавитом с использованием библиотеки клеточно-автоматных топологий.
- Разработана модель разделения фаз с целочисленным алфавитом и сохранением массы и реализована с помощью библиотеки клеточно-автоматных топологий.
- Реализовано распараллеливание модуля обхода клеточного массива из библиотеки клеточно-автоматных топологий в системе с общей памятью.
- Получен частичный результат в разработке еще одной модели разделения фаз.

Спасибо за внимание!