

MPI-PARALLELISIERUNG EINES CFD-FRAMEWORKS AUF BASIS VON PYTORCH

Fachrichtung(en): Maschinenbau und Informatik

Kontakt: Prof. Dr. Holger Foysi – holger.foysi@uni-siegen.de

Mario Bedrunka – mario.bedrunka@uni-siegen.de

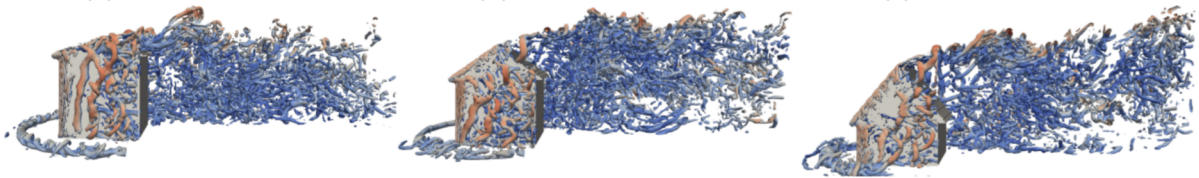


Abbildung 1: Exemplarische dreidimensionale Simulationsergebnisse aus vorausgegangen Abschlussarbeiten, die mit Hilfe von Lettuce berechnet wurden. (Quelle: Masterarbeit Martin Kliemank)

Computersimulationen von Strömungen (Computational Fluid Dynamics - CFD) spielen eine entscheidende Rolle in vielen ingenieurwissenschaftlichen und physikalischen Anwendungen. Die Lattice-Boltzmann Methode (LBM) ist in diesem komplexen Fachgebiet ein modernes Verfahren zur numerischen Strömungsberechnung. Sie zeichnet sich durch ein hohes Maß an Parallelisierbarkeit aus und gewinnt daher zunehmend an Beachtung. Die LBM-Arbeitsgruppe der Universität Siegen ist im Institut für Fluid- und Thermodynamik am Lehrstuhl für Strömungsmechanik angesiedelt und forscht seit 2012 zusammen mit der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg an der Weiterentwicklung der Methode.

Wir, die Arbeitsgruppe, entwickeln dazu Software und Methoden, um solche Simulationen effizient auf Hochleistungsrechnern und Grafikkarten durchzuführen. Dazu haben wir in das Framework 'Lettuce' entwickelt (<https://github.com/lettucecf/lettuce>). Dieses ist in Python geschrieben und setzt auf Facebooks Machine-Learning Framework PyTorch auf. Im Hintergrund nutzt der Code jedoch effiziente und vektorisierte Subroutinen, die in C++ und CUDA implementiert sind, sodass GPU beschleunigte Rechnungen durchführbar sind.

Zielgruppe dieser Arbeit sind Studentinnen und Studenten, die Interesse im interdisziplinären Bereich der numerischen Simulation - bestehend aus Elementen des Maschinenbaus, der Physik und Informatik - besitzen. Im Rahmen dieses Projekts geht es darum, eine bereits konzeptionell ausgearbeitete MPI-Umgebung umzusetzen, die parallele Berechnungen sowohl auf der CPU als auch der GPU ermöglicht. Die Grundidee umfasst eine sogenannte „Domain-Decomposition-Klasse“, die die vorhandene Domäne in Teilgebiete aufteilt, an die einzelnen Prozesse verteilt und Operationen wie eine lokale „Gitterverfeinerung“ ausführt. Die Schwierigkeit dieser Arbeit liegt darin, die aktuellen

Strukturen möglichst unverändert zu lassen. Dafür soll eine Tensor-Klasse entwickelt werden, die PyTorchs Tensoroperationen vererbt bekommt und unter Berücksichtigung der MPI-Topologie erweitert. Am Ende der Arbeit sollen die Studierenden eine hoch-aufgelöste Anwendung aus der Praxis simulieren und mit Referenzen vergleichen. Exemplarisch demonstriert die Abbildung 1, dass bereits moderne Problemstellungen untersucht werden können. Die Parallelisierung soll zum einen schnellere als auch detailliertere Simulationen ermöglichen, um realistische Szenarien untersuchen zu können.

Den Studentinnen und Studenten wird im Rahmen der Arbeit die Möglichkeit gegeben, die Lattice-Boltzmann-Methode zu erlernen und gezielt an die Forschung und Entwicklung auf diesem Gebiet herangeführt zu werden. Darüber hinaus werden Kenntnisse in der Programmierung, Strömungsmechanik und Softwareentwicklung vermittelt. Die Studierenden sollten bereits Programmiererfahrung in Python mitbringen und in der Lage sein, selbstständig zu arbeiten. Die erarbeiteten Ergebnisse sollen anschließend in das Lettuce-Framework einfließen, wodurch sich die Studentinnen und Studenten an aktuellen wissenschaftlichen Entwicklungen beteiligen.