

GRISSLi

**METHODENBANK ZUM LÖSEN VON TECHNISCHEN UND
NATURWISSENSCHAFTLICHEN PROBLEMEN MIT
GITTEBASIERTEN VERFAHREN AUF PARALLELRECHNERN****Y. Ding, A. Müller, M. Münch**

Institute for Parallel and Distributed High Performance Systems (IPVR)

University of Stuttgart

Stuttgart, Germany

Abstract

Ding Y., Müller A., Münch M. GRISSLi. Integration of different calculation software systems in a parallel computing environment to solve natural and technological grid based application problems. Based on numeric algorithms modern calculation software can simulate natural and technological processes. The joint research project GRISSLi (IPVR, IBM High Performance Support Center and GMD National Research Center for Information Technology) is dedicated to the integration of different calculation software systems in a parallel computing environment to solve physically coupled, grid based application problems. In this article the problem of coupled simulation and the basic concepts for the realisation of a coupling software library are introduced; the GRISSLi pilot application - a coupled fluid flow and mechanic problem in the context of metal forming industry - is described as well.

Einführung

Die Simulation von natürlichen und technologischen Vorgängen gewinnt zunehmend an volkswirtschaftlicher Bedeutung. Dabei wird fast ausschließlich auf numerische Berechnungsverfahren zurückgegriffen, deren anwendungsspezifische Weiterentwicklung seit geraumer Zeit intensiv betrieben wird. Einer großen Anzahl numerischer Methoden ist gemein, daß mit ihnen ein Raum- (und Zeit-)ausschnitt eines in Natur bzw. Technik ablaufenden Prozesses modelliert wird. Von den kontinuierlichen Gleichungen der Physik wird dabei auf eine diskrete Beschreibung mit einer Vielzahl von Einzelwerten übergegangen.

Bedingt durch die in den letzten Jahren ständig wachsende Leistungsfähigkeit und Verbreitung von Rechenanlagen hat sich die Anwendbarkeit numerischer Berechnungsverfahren deutlich verbessert. In Zukunft werden nicht nur Vorgänge berechnet werden, die einer einzelnen Anwendungsdomäne zugeordnet sind, sondern auch zunehmend komplexe Simulationen zu bewältigen sein, die das Ineinandergreifen verschiedener Einflußgrößen berücksichtigen müssen und eine hohe Rechenkapazität erfordern. Von entscheidender Bedeutung für die weitergehende Nutzungsmöglichkeit der Simulationsrechnung ist daher die Frage, inwieweit es gelingt, für die Integration verschiedener Berechnungsverfahren auf verteilten Rechnerressourcen (Parallelrechnern) eine Softwarebasis bereitzustellen, die eine effiziente Kopplung der Anwendungsprogramme erlaubt.

Projektbeschreibung

Das Projekt GRISSLi geht zurück auf Vorarbeiten der drei Projektpartner. Am Institut für Parallele und Verteilte Höchstleistungsrechner der Universität Stuttgart (IPVR) wurde in Zusammenarbeit mit der IBM Informationssysteme GmbH das Projekt GRIDS bearbeitet. Am Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen der GMD Forschungszentrum Informationstechnik GmbH in St. Augustin (SCAI) wurde das parallele Simulationsprogramm LiSS entwickelt.

Im Projekt GRIDS wurde prototypisch eine parallele Programmierumgebung für Berechnungssysteme entwickelt, die auf Gittern mit beliebiger Anordnung der Knotenpunkte (unstrukturierte Gitter - siehe Beispiel Tragflügelprofil in Abb. 1 rechts) basieren. Das Programmiermodell von GRIDS geht davon aus, daß die Parallelität nicht sichtbar für den Entwickler des Berechnungsprogramms ist. Er muß sich folglich nicht um die Parallelisierung kümmern, kann diese aber auch nicht direkt unterstützen. Wie sich gezeigt hat, führt dieser Ansatz auf ein nicht effizientes Laufzeitverhalten.

Das Berechnungsprogramm LiSS implementiert Mehrgitterverfahren auf einer parallelen Rechnerarchitektur. Den Mehrgitterverfahren liegen blockstrukturierte Gitter zugrunde, die in mehreren Feinheitsstufen definiert sind. Jeder Block eines strukturierten Gitters läßt sich auf ein orthogonales Einheitsgitter abbilden (siehe Beispiel PKW in Abb. 1 links). In bestimmten Anwendungsbereichen (z.B. in der Strömungsberechnung) werden häufig Verfahren eingesetzt, die auf (block-)strukturierten Gittern arbeiten.

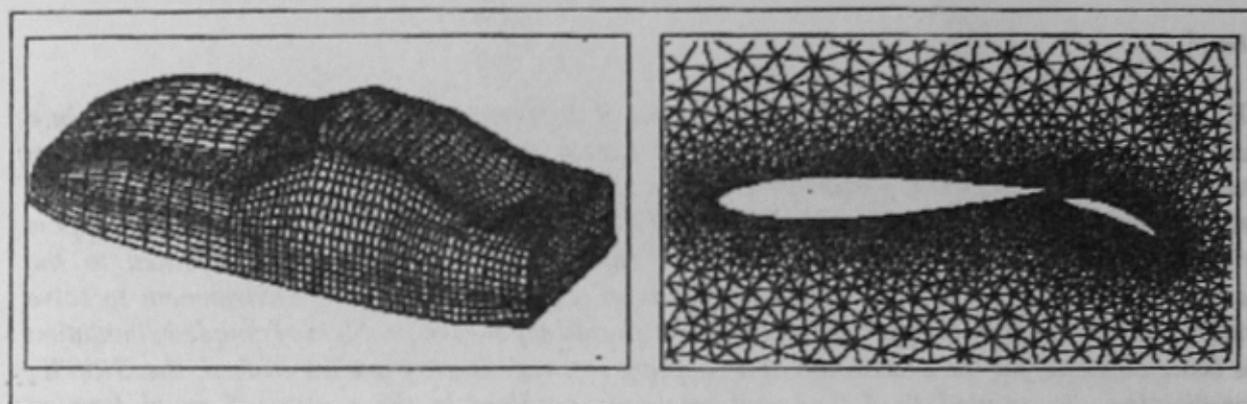


Abbildung 1. Strukturiertes Gitter (links) und unstrukturiertes Gitter (rechts)

Im Projekt GRISLi soll eine Methodenbank entstehen, die die Integration von Anwendungsprogrammen ermöglicht, die einesteils auf strukturierten Gittern und andernteils auf unstrukturierten Gittern arbeiten. Basierend auf den Anforderungen aus konkreten Anwendungen soll eine allgemeine Schnittstelle zwischen der Softwarebasis (zur Parallelisierung und Kopplung) und gitterbasierten Berechnungsverfahren formuliert werden. Die effiziente Funktionalität der Methodenbank soll an einer praxisrelevanten Pilotanwendung demonstriert werden.

Problemstellung

In vielen technologisch und volkswirtschaftlich bedeutenden Anwendungsbereichen wäre eine genaue Vorhersage des Systemverhaltens bei Variation der Prozeßparameter ohne Simulation gar nicht oder nur über langwierige und teure experimentelle Versuche möglich. Die in der Simulation zu modellierenden Vorgänge sind dabei oft sehr komplex; stark vereinfachte Annahmen erlauben jedoch nur eine begrenzte Übertragbarkeit der aus dem Modell gewonnenen Ergebnisse. Einige Beispiele mögen die Zusammenhänge verdeutlichen:

- Bei der Herstellung von Massengütern spielt die umformtechnische Fertigung eine große Rolle. Blechbauteile, wie sie beispielsweise im Karosseriebau von Fahrzeugen benötigt werden, Profilbauteile wie Fahrradfelgen oder Massivbauteile wie Radnaben können kostengünstig und in hoher Qualität durch Umformung duktiler Werkstoffe produziert werden. Die Bereitstellung entsprechender Fertigungsanlagen hingegen ist aufwendig, da die genauen Prozeßgrößen zur Auslegung des Vorgangs und der Werkzeuge zunächst nicht bekannt sind und ggf. durch prototypische Versuchsanlagen ermittelt werden müssen. Durch eine hinreichend genaue Simulation des Fertigungsprozesses ist es möglich, die Kosten und die Bereitstellungsdauer für umformtechnische Produktionsanlagen erheblich zu reduzieren. Die Wechselwirkung zwischen Werkzeug und umgeformtem Werkstück kann aber oftmals nur in einer gekoppelten Betrachtung von Werkstück- und Werkzeugverhalten erfaßt werden. Neue Fertigungsverfahren, z.B. in der Flachbandstahlherstellung, zielen darauf ab, die bisher getrennten Fertigungsvorgänge Gießen und Walzen

zusammenzuführen. Der Vorgang des Bandstahlgießens kann nur durch eine gekoppelte Simulation von Gießen und Walzen berechnet werden.

- Bei bestimmten Lackapplikationsverfahren, z.B. in der Automobilindustrie, werden die aus rotierenden Düsen mit einem Luftstrom versprühten Lackpartikel im Düsenkopf elektrostatisch aufgeladen. Das Werkstück wird geerdet. Die Lackpartikel werden von der unlackierten Oberfläche angezogen. Die Lackausbeute kann bei optimierter Prozeßsteuerung erheblich verbessert werden, was einerseits die Kosten deutlich reduziert und andererseits die ökologischen Belastungen mindert. Die im ABB-Forschungszentrum in Heidelberg betriebene Simulation einer PKW-Lackierstraße erfordert die Lösung der das Strömungsfeld bestimmenden Navier-Stokes-Gleichungen unter Berücksichtigung des durch die bewegten Lackpartikel veränderlichen elektrischen Feldes. Sowohl für die Berechnung des turbulenten Strömungsfeldes, als auch für die Bestimmung des elektischen Feldes existieren erprobte Berechnungsprogramme; eine für diesen Anwendungsfall erforderliche integrierte Verfahrenskopplung konnte bisher aufgrund des Mangels an effizienten Kopplungsmechanismen nicht durchgeführt werden.
- In der Raumfahrttechnik gewinnen Transportsysteme mit Wiedereintrittsfähigkeit in die Erdatmosphäre zunehmend an Bedeutung. Die thermische Belastung der Wiedereintrittssysteme ist so hoch, daß allein aus Kostengründen für viele Auslegungsfragen entsprechender Hitzeschutzeinrichtungen nur Simulationsrechnungen herangezogen werden können. Soll dabei neben den vielfältigen Einflußgrößen der reaktiven Nichtgleichgewichtsströmung auch der Wärmefluß innerhalb der Tragstruktur berücksichtigt werden, dann müssen mehrere mathematische Modelle simultan gelöst und gegeneinander ausiteriert werden.
- Fragestellungen der Meteorologie unterliegen einer Vielzahl von Einflußgrößen, deren Zusammenwirken nur durch Simulation bestimmbar ist. Zunehmend gewinnt die Analyse von regionaler und globaler Schadstoffausbreitung in der Atmosphäre, im Boden und in Gewässern an Bedeutung. Rückwirkungen auf die Schadstoffkonzentrationen können auch hier nur durch Kopplung mehrerer, bereits im einzelnen sehr komplexer Modellrechnungen ermittelt werden.

Diese Liste ließe sich rasch um eine Vielzahl von Einträgen erweitern. Allen Beispielen gemein ist, daß die beobachteten Phänomene durch Differentialgleichungen beschrieben werden können. Die Vorgänge insgesamt können durch Systeme von Differentialgleichungen modelliert werden. Für die Betrachtung isolierter Phänomene gibt es hinreichend viel Erfahrung, welche Vereinfachungen einzuführen sind, um ein ausreichend genau formuliertes Modell zu erhalten, das rechentechnisch noch lösbar ist. Das entsprechende Differentialgleichungssystem wird durch ein für seinen Typ geeignetes Diskretisierungsverfahren in ein numerisches Rechenmodell transformiert, das auf einem Computersystem abgearbeitet werden kann.

Unabhängig vom gewählten Diskretisierungsverfahren basieren alle Rechenmodelle auf einem Raumgitter, an dem prinzipielle Datenstrukturen und Algorithmen festgemacht sind. Es lassen sich zwei große Verfahrensklassen unterscheiden: Die erste Klasse umfaßt Verfahren, die auf strukturierten Gittern arbeiten, z.B. nach der Finite-Differenzen-Methode und daraus hervorgegangenen Weiterentwicklungen. Bei der Diskretisierung wird von Differentialen auf ein Differenzenschema übergegangen. Der betrachtete Raum wird quasi mit einem Raster überzogen. Die zweite Klasse wird von Verfahren gebildet, die z.B. entsprechend der Finite-Element-Methode unstrukturierte Gitter verwenden, die nur einem lokalen, aber keinem globalen Ordnungsschema unterliegen. Bei den Finite-Element-Verfahren werden in kleinen Raumausschnitten (Finiten Elementen) Lösungsansätze vorgegeben, die über Freiwerte (Koeffizienten) parametrisiert sind und an den Übergängen zu Nachbarelementen gewissen Stetigkeitsbedingungen genügen.

Eine Reihe von Programmen, die ursprünglich für ein eng begrenztes Anwendungsfeld entwickelt wurden, haben sich mittlerweile im Einsatz bewährt und konnten in ihrer Funktionalität sukzessive ausgebaut werden. Die zwischenzeitlich hochkomplexen Systeme umfassen bis zu 2 Mio. Zeilen Quelltext und sind optimiert auf bestimmte Zielsysteme wie z.B. Vektorrechner; ihre Anwendbarkeit

ist i.a. auf ausgewählte Problemklassen abgestimmt, innerhalb derer ein großer Erfahrungsschatz an Modellierungstechniken erworben werden konnte. Das Potential, das in der evaluierten Anwendungssoftware liegt, ist also für zukünftige Anwendungen offenzuhalten.

Durch Parallelisierung der Simulationsprogramme kann das Spektrum der insgesamt berechenbaren Anwendungsprobleme um komplexe Anwendungen erweitert werden, die derzeit aufgrund der zu hohen Rechenzeiten nicht in ausreichendem Maße simuliert werden können. Entsprechende Parallelisierungsbemühungen haben gezeigt, daß bei Einsatz von in der Größenordnung 10 Prozessoren (z.B. in einem Workstationcluster oder auf einem Parallelrechner) die Rechenzeit eines Supercomputers wie der Cray-YMP deutlich unterschritten werden kann. Die Bewältigung der eingangs erwähnten Beispiele fordert zudem die gekoppelte Berechnung verschiedener Modelle, die gemeinsam einen betrachteten Prozeß simulieren. Eine erhöhte Anforderung an die Rechenleistung ergibt sich. Wenn die an einer Simulation beteiligten Rechenmodelle mit verschiedenen Verfahren in unterschiedlichen Berechnungsprogrammen abgearbeitet werden, bedeutet dies, daß zwischen diesen Programmen eine Kommunikationsschnittstelle geschaffen werden muß, die ebenfalls auf dem Gitter aufsetzt.

Grundzüge der Realisierung

Die angestrebte Methodenbank soll als Basissoftware für die Entwicklung parallel arbeitender Berechnungsprogramme dienen. Die Kommunikation auf Gitterstrukturen soll gezielt unterstützt werden, so daß auf Ebene der Berechnungsverfahren charakteristische Datenobjekte einfach ausgetauscht werden können, ohne daß sich der Anwendungsprogrammierer um die Implementierung spezieller Kommunikationsprotokolle kümmern muß. Neben Neuimplementierungen von parallelen Berechnungsprogrammen wird auch die Parallelisierung bestehender Programmsysteme erleichtert. Es ist davon auszugehen, daß verfahrensbedingt ein Teil der Berechnungen grundsätzlich sequentiell abgearbeitet werden. Der mögliche Parallelisierungsgrad liegt nach Erfahrungen aus dem Europort-Projekt sicher deutlich unter 100. Für die Parallelisierung wird ein Ansatz verfolgt, der eine Aufspaltung in eigenständige Teilprozesse nach dem SPMD-Modell (Single Programme Multiple Data) vorsieht. Die Kommunikation der Teilprozesse erfolgt durch explizites Message-Passing nach dem MPI-Standard (Message Passing Interface).

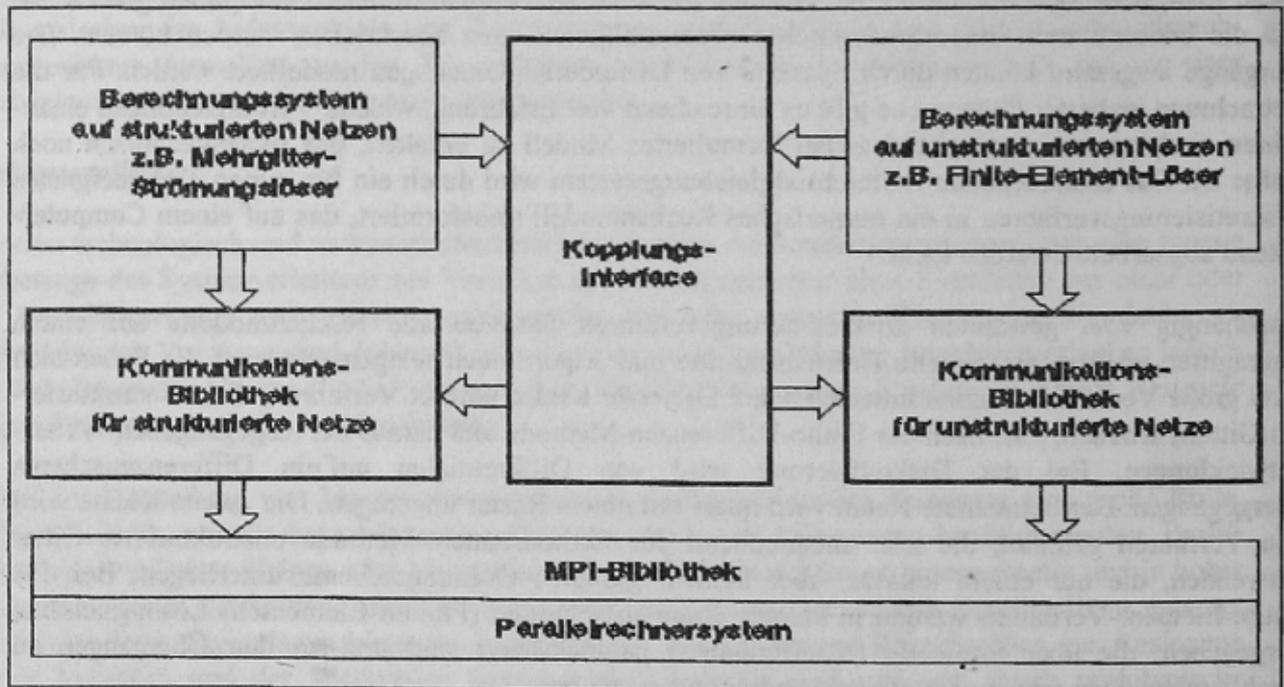


Abbildung 2. Systemarchitektur

Um die Kopplung unabhängig entwickelter Berechnungsprogramme zu vereinfachen, werden Konzepte für den an Gitterstrukturen orientierten Datenaustausch und die Synchronisation der

Berechnungsabläufe erarbeitet. Ziel ist es, eine allgemeingültige Kopplungsschnittstelle für gitterbasierte Simulationsprogramme zu formulieren, an die verschiedene Programmsysteme angedockt werden können. Ausgewählte Simulationsprogramme sollen zusammen mit der implementierten Methodenbank in einem Gesamtpaket integriert werden.

Als Basis für Analyse und Entwurf der parallelen Programmierumgebung wird eine praxisrelevante Pilotanwendung aus dem Bereich der Fertigungstechnik herangezogen (siehe Abschnitt „Pilotanwendung“). An dieser Anwendung wird die Parallelisierung eines sequentiell entwickelten Berechnungsprogramms exemplarisch durchgeführt und bewertet. Die für den Simulationsbetrieb erforderliche Kopplung eines auf strukturierten Gittern arbeitenden Verfahrens mit einem Paket, das unstrukturierte Gitter verwendet, wird zur Lösung des Pilotproblems ausgeführt.

Die Architektur des im Rahmen der Pilotanwendung zu realisierenden Simulationssystems ist in Abb. 2 skizziert. Die Methodenbank umfaßt je eine Kommunikationsbibliothek für strukturierte und unstrukturierte Gitter, auf denen die Parallelisierung der Anwendungspakete basiert, und die Kopplungsschnittstelle, über die der Datenaustausch zwischen den Anwendungspaketen realisiert wird. Die Funktionalität dieser drei Bausteine ist so konzipiert, daß die für die Systemintegration erforderlichen Eingriffe in die Anwendungspakete minimiert sind. Schnittstelle zum Parallelrechnersystem ist die MPI-Bibliothek, die für verschiedenste Parallelrechnerplattformen verfügbar ist. Für die Impementierung der Methodenbank soll der Wechsel auf eine zu MPI alternative Softwarebasis konzeptionell möglich sein. Zur Steuerung der Anwendungspakete und der gekoppelten Berechnung in einer parallelen Ausführungsumgebung ist eine integrierte Benutzerschnittstelle erforderlich.

Pilotanwendung

Die Produktion von Warmbandstahl erfolgt herkömmlicherweise in mehreren Produktionsschritten. Zunächst wird ein (z.B. 250 mm breiter) Strang gegossen. Dieser Strang wird zur Entfernung der Zunderschicht geflammt und in einem Stoßofen für den Walzprozeß temperiert. Anschließend läuft der Stahl durch eine Walzenstraße mit vielen Walzenpaaren, in der die Querschnittshöhe des Stahlbandes schrittweise auf ca. 1-3 mm verringert wird. Flachbandstahl ist ein Massenprodukt; geringfügige Verbesserungen im Produktionsablauf führen zu spürbaren Kostensenkungen.

Um den Produktionsablauf zu vereinfachen wird versucht, die Anzahl der Fertigungsschritte zu reduzieren. Dies erfolgt durch Gießen eines dünneren Vorbandes (z.B. ca. 50 mm Breite) mit einer entsprechenden Verkürzung der Walzenstraße (Vorbandgießen). Beim sogenannten Bandgießen werden die beiden Produktionsprozesse Gießen und Walzen zu einem Prozeß vereinigt. Der Durchlauf durch eine Walzenstraße kann beim sogenannten Zweirollenverfahren ganz entfallen. Dabei wird der flüssige Stahl direkt zwischen zwei gegeneinander rotierende Kühlrollen gegossen. Beim Durchlaufen des Spalts zwischen den Rollen wird das erstarrte Material plastisch auf einen Endquerschnitt von ca. 1-3 mm Breite umgeformt.

Das Institut für Bildsame Formgebung (IBF) an der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen (RWTH) betreibt in Kooperation mit der Thyssen Stahl AG eine Versuchsanlage zum Zweirollenverfahren beim Dünnbandgießen. Durch die im Umfeld dieser Versuchsanlage durchgeführten Forschungsarbeiten soll neben einer Weiterentwicklung der Anlagen- und Prozeßtechnologie auch die mit diesem Produktionsverfahren ermöglichte Einflußnahme auf die Werkstoffeigenschaften untersucht werden.

In Abb. 3 ist das Funktionsprinzip der Bandstahlgießanlage schematisch dargestellt. Zwischen die beiden gegeneinander rotierenden Kühlrollen wird der flüssige Stahl eingegossen. über den Rollenmantel fließt ein Wärmestrom ab. Bei Unterschreitung der Solidustemperatur erstarrt der Stahl. Nach einer vereinfachten Vorstellung bilden sich Bandschalen aus, deren Dicke zum Schmelzgrund hin zunimmt.

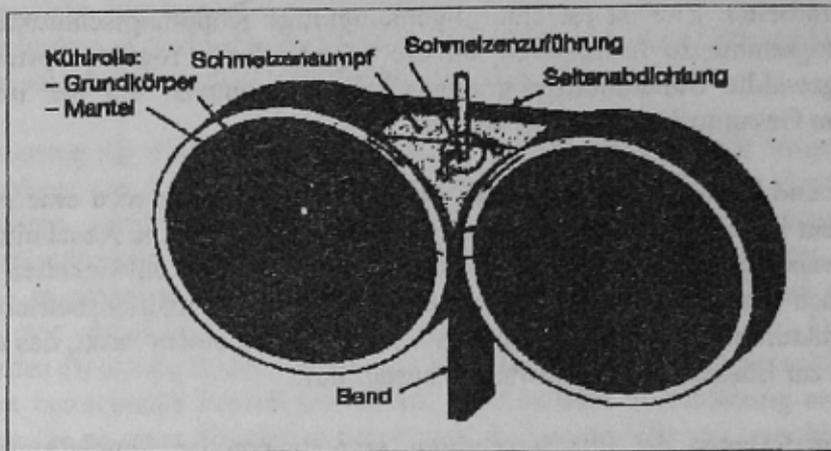


Abbildung 3: Schema der Bandgießanlage

Durch die Reibung zwischen Kühlrolle und Bandschale wird das feste Material durch den Spalt zwischen den Kühlrollen befördert. Dabei wird der Werkstoff plastisch umgeformt.

Die Kraft, mit der die Kühlrollen gegeneinander gehalten werden, kann meßtechnisch erfaßt werden. Die Drehzahl der Kühlrollen ist eine Steuergröße, mit der der Fertigungsprozeß (abhängig von der Haltekraft der Rollen) kontrolliert werden kann.

Die mit der Versuchsanlage durchgeführte Bandstahlfertigung wird von den Arbeitsgruppe Ur-/Umformen in Kooperation mit der Arbeitsgruppe Rechneranwendung in Computermodellen am IBF simuliert. Dabei wird bisher unterschieden zwischen der Simulation der Schmelzenströmung, der Simulation des Rollenverhaltens und der Simulation der Werkstoffumformung.

Um den Fertigungsprozeß realitätsnah simulieren zu können, muß die Berechnung des Umformprozesses mit der Berechnung des Strömungsfeldes gekoppelt werden. Derzeit kann ein stationärer Prozeßzustand (konstante Walzendrehzahl) simulationstechnisch in drei getrennten Einzelschritten nachgerechnet werden.

Zunächst wird die Temperaturverteilung durch Berechnung der Schmelzensumpfströmung bestimmt (1. Schritt). Aus der Temperaturverteilung wird die Ausgangsgeometrie für den Umformprozeß bestimmt.

Die so an den Gitterpunkten ermittelten Temperaturwerte werden über eine Interpolation auf die Knoten des Finite-Element-Modells übertragen (2. Schritt).

In der Finite-Element-Rechnung (3. Schritt) wird der Umformvorgang (als Walzprozeß) simuliert. Primäre Zielgröße ist dabei das Feld der Verschiebungsgeschwindigkeit. Im Nachlauf kann die Kraft auf die Rollen als integrale Größe ermittelt werden.