

РАЗРАБОТКА ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ АЛГОРИТМА МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕНДРИТНЫХ КРИСТАЛЛОГРАММ

Р.А. Парингер^{1,2}, А.В. Куприянов^{1,2}

¹Самарский государственный аэрокосмический университет им. академика С.П. Королёва
(национально исследовательский университет),
²Институт систем обработки изображений РАН

В работе рассматривается алгоритм моделирования изображения дендритных кристаллограмм и предлагается его параллельная реализация с использованием технологии MPI. За основу был взят алгоритм с использованием уравнения диффузии примеси и вещества. Используемый за основу, алгоритм был модифицирован. Был изменён способ перераспределения примеси и изменён порядок кристаллизации, что позволило сохранять объём примеси в процессе роста кристалла. Был предложен способ разделения этапов алгоритма по вычислительным ядрам. Значение ускорения предложенной MPI реализации оказалось на 20% больше, чем у OpenMP аналога. Полученная реализация может быть использована для моделирования кристаллограмм большого размера в системах с разделяемой памятью.

Анализ изображений медицинских кристаллограмм – это важная часть медицинской диагностики. Медицинские кристаллограммы – это структуры, образованные при кристаллизации солей вследствие высушивания биологической жидкости (слеза, кровь, слюна и т.д.). Автоматизация обработки изображений кристаллограмм позволит повысить качество диагностики и сократит затраты времени на её проведение [1-4].

Необходимо смоделировать изображение всей капли, поэтому для ускорения вычисления предлагается использовать параллельные вычисления. Существуют несколько возможных технологий для реализации параллельного алгоритма. Рассмотрим два: OpenMP и MPI [5]. Технология OpenMP используется для систем с общей памятью и число вычислительных ядер в таких системах редко превышает 16, что накладывает определённые ограничения на масштабирование системы. Необходимость в MPI реализации возникает, если нужно смоделировать кристаллограмму большого размера с мелкой сеткой разбиения.

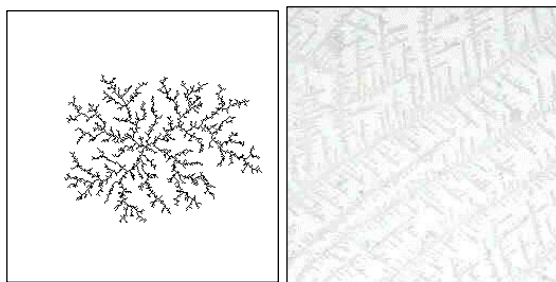


Рисунок 1 – Изображение кристаллограммы. Смоделированное(слева). Натурное (справа)

За основу была принята описанная ранее модель [6]. Описание OpenMP реализация алгоритма моделирования представлена в литературе [7]. Реализация модели состоит в последовательном применении следующих алгоритмов: диффузия, расчёт вероятности кристаллизации, проверка количества вещества, перераспределение вещества, перераспределение примеси, растворение кристаллов.

Одним из недостатков модели является тот факт, что при некоторых параметрах моделирования не выполнялся закон сохранения примеси. Её количество уменьшалось. Поэтому мы использовали волновое перераспределение примеси: вся примесь из ячейки, которая кристаллизовалась перераспределялась на соседние ячейки различных порядков. Для оценки возможности выполнения такого распределения пришлось добавить проверку

количества примеси – она определяет хватит ли оставшегося объёма для хранения вытесненной в процессе кристаллизации примеси.

Вторым недостатком является тот факт, что растворение кристаллов происходит после кристаллизации и, соответственно, проверки количества вещества, доступного для кристаллизации, что приводило к пропуску некоторых этапов кристаллизации и замедлению процесса роста кристаллов. Поэтому мы изменили порядок этих действий. Сначала происходит растворение кристаллов, а потом кристаллизация, таким образом количество вещества, доступного для кристаллизации, возрастает. Изменение не привело к существенным различиям формы кристаллов, но позволило сократить время роста кристаллов на величину до 2% от общего времени. Полученный алгоритм схематично представлен на рисунке 2.

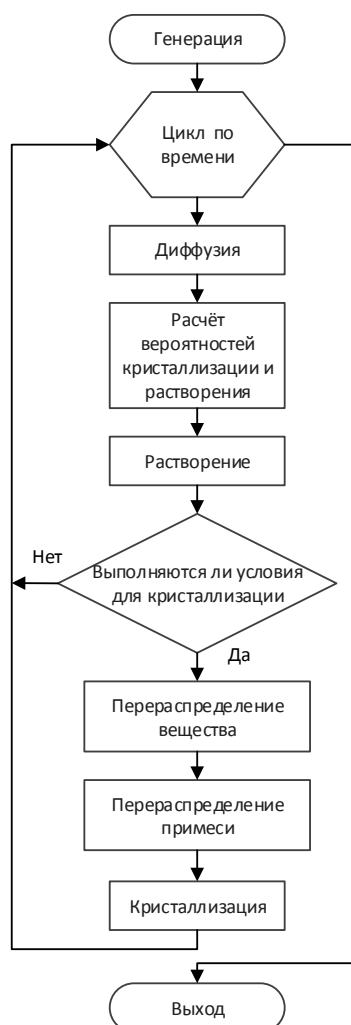


Рисунок 2 – Алгоритм моделирования кристаллограммы

Таблица 1. Зависимость относительного времени работы этапов алгоритма от размера изображения

Этап алгоритма	Размер изображения			
	512×512	1024×1024	2048×2048	4096×4096
Диффузия	0,27	0,32	0,30	0,33
Расчёт вероятностей	0,16	0,18	0,17	0,19
Растворение	0,04	0,04	0,04	0,04
Проверка условий кристаллизации	0,09	0,08	0,08	0,08
Перераспределение примеси	0,23	0,18	0,18	0,17
Перераспределение вещества	0,15	0,14	0,15	0,14
Кристаллизация	0,06	0,06	0,06	0,06

В таблице 1 представлена зависимость относительного времени работы этапов последовательного алгоритма от размера изображения. Стоит отметить что наибольшее время занимает диффузия вещества, но так как используется явная схема, то алгоритм диффузии на каждом этапе может разделён.

Параллельная реализация в MPI осуществляется путём обмена сообщениями между вычислительными ядрами. Ускорение происходит за счёт того, что независимые операции выполняются параллельно, но часть времени тратиться на пересылку данных между вычислителями. Поэтому чем меньше операций обмена сообщениями, тем выше эффективность параллельной программы.

В параллельной реализации алгоритма на каждой итерации цикла по времени (кроме первой) рассылка данных происходит после перераспределения примеси, а сбор результатов вычисления перед операцией перераспределения вещества, но только в том случае, если выполняются условия для кристаллизации. Методы «Перераспределение вещества» и «Перераспределение примеси» в связи с особенностями реализации (использование волнового распределения) не могут быть распараллелены эффективным образом с использованием MPI, так как для этого потребуется большое число пересылок. Поэтому методы «Перераспределение вещества» и «Перераспределение примеси» выполняются последовательно, но так как данные независимы, то разными потоками.

Результаты ускорения полученной реализации программы представлены в таблице 2. Полученные значение ускорения оказались на 20% выше, чем в аналогичной работе с использованием технологии OpenMP [6].

Таблица 2. Зависимость ускорения от количества ядер и размера изображения

Размер изображения	Количество вычислительных ядер						
	2	3	4	5	6	7	8
512×512	1,67	2,06	2,34	2,54	2,70	2,82	2,93
1024×1024	1,74	2,22	2,57	2,85	3,07	3,25	3,40
2048×2048	1,75	2,23	2,59	2,86	3,08	3,26	3,40
4096×4096	1,76	2,26	2,65	2,94	3,18	3,38	3,54

Литература

1. Денисов А.Б. Кристаллические структуры ротовой жидкости. Сообщение 1. Метод оценки кристаллических фигур, полученных при высушивании смешанной слюны / Dental forum, 2011, Т. 37, № 1, С. 50-54.
2. Шабалин В. Н., Шатохина С.Н. Морфология биологических жидкостей человека // Хризостом – М., 2001, 304 с.
3. Волчецкий А. Л., Рувинова Л.Г., Спасенников Б.А., Зеновский В.П. Кристаллизация и кристаллография: Медико-биологические аспекты // Изд-во Помор. гос. ун-та – Архангельск, 1999, 190 с.
4. Мартусевич А.К. Кристаллографический анализ: общая характеристика // Вятский медицинский вестник, 2002, N. 3. с. 59-61.
5. Антонов А.С. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP // Издательство МГУ – М., 2012, 344 с.
6. Баранов В.Г., Храмов А.Г. Моделирование процесса роста дендритных кристаллических структур // Компьютерная оптика – Самара, 2001, № 21, с. 193-197.
7. Халирахманов Д.И., Маякова С.А. Параллельный алгоритм моделирования роста дендритных кристаллических структур // Сборник научных трудов Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии 2012», 2012, с. 704–710.