Smoothed Particle Hydrodynamics

SPH Implementierung für das Software-Praktikum im SS 2008

Johannes Willkomm
Martin Bücker
Michael Lülfesmann
Arno Rasch
Andreas Wolf

SPH Überblick

- Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) wird zur Diskretisierung von partiellen Differenzialgleichungen verwendet.
- Die Methode kommt ohne das sonst übliche festes Gitter aus
 - Phasengrenzen daher kein Problem
- Lagrange-Ansatz (statt Euler-Gleichungen)
 - Partikel mit fester Masse: diese bleibt automatisch erhalten
- Kernfunktion ist verschmierte Dirac-Funktion
 - Partikel innerhalb der Einflußlänge h beeinflussen sich
- Nachteile
 - Da die Partikel sich frei bewegen können wenig Kontrolle über die Auflösung an einem bestimmten Ort
 - Physikalische Korrektheit?

Unser Ansatz

- Weitgehend wie in Monaghan "Simulating Free Surface Flows with SPH"
 - *d*-dimensional, *d*=2, *d*=2
 - Mit Spline-Kernfunktion (aus Liu & Liu)

$$W(r) = \begin{cases} \alpha_d \left(\frac{2}{3} - \left(\frac{r}{h}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{r}{h}\right)^3\right) & 0 < r < h \\ \alpha_d \left(2 - \frac{r}{h}\right)^3 & h < r < 2h \\ 0 & sonst \end{cases}$$

- Variablen: Position x, Geschwindigkeit v, Dichte ρ, Wärme u
- Zustandsgleichung für Druck P (andere möglich)

$$P = B\left(\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma} - 1\right)$$

Unser Ansatz

Geschwindigkeit

$$\frac{d\mathbf{v}_{i}}{dt} = -\sum_{j \in Wasser(N(i))} m_{j} \left(\frac{P_{i}}{\rho_{i}} + \frac{P_{j}}{\rho_{j}} + \Pi_{ij} \right) \nabla_{i} W_{ij} + \sum_{j \in LJ(N(i))} LJ_{ij} + \mathbf{F}_{i}$$

- Wasser(N(i)): Wasser-Partikel in Nachbarschaft von i
- LJ(N(i)): Randpartikel in Nachbarschaft von i
- F Kräfte (Schwerkraft)
- $abla_i W_{ij}$ Ableitung der Kernfuktion (Gradient) bzgl. Ort von i
- Π_{ij} Viskosität verhindert Durchdringung der Partikel
- LJ_{ij} Beschleunigung durch Randpartikel j

• Dichte
$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{j \in Wasser(N(i))} m_j(v_i - v_j) \nabla_i W_{ij}$$

• Wärme
$$\frac{du_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j \in Wasser(N(i))} m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i} + \frac{P_j}{\rho_j} + \Pi_{ij} \right) (v_i - v_j) \nabla_i W_{ij}$$

Lennard-Jones Randpartikel

- Verlässt ein Partikel das Simulationsgebiet Ω wird es nicht mehr berücksichtigt
- Randpartikel bilden Wände für die Flüssigkeit (Gefäße)
 - Sie üben nur eine ablenkende Beschleunigung aus
 - Abgeschnittenes Lennard-Jones-Potential:

$$LJ_{ij} = \begin{cases} D\left(\left(\frac{r_0}{r}\right)^{2p_1} - \left(\frac{r_0}{r}\right)^{p_1}\right) \frac{x_i - x_j}{r}, & r < r_0 \\ 0, & r \ge r_0 \end{cases}$$

- D, p₁ und r₀ sind Parameter und $r = ||\mathbf{x}_i \mathbf{x}_j||$
- Wegen der Nachbarsuche verlangen wir, daß der Einfluß der Randpartikel nicht weiter reicht als die der Kernfunktion:

$$r_0 \leq 2h$$

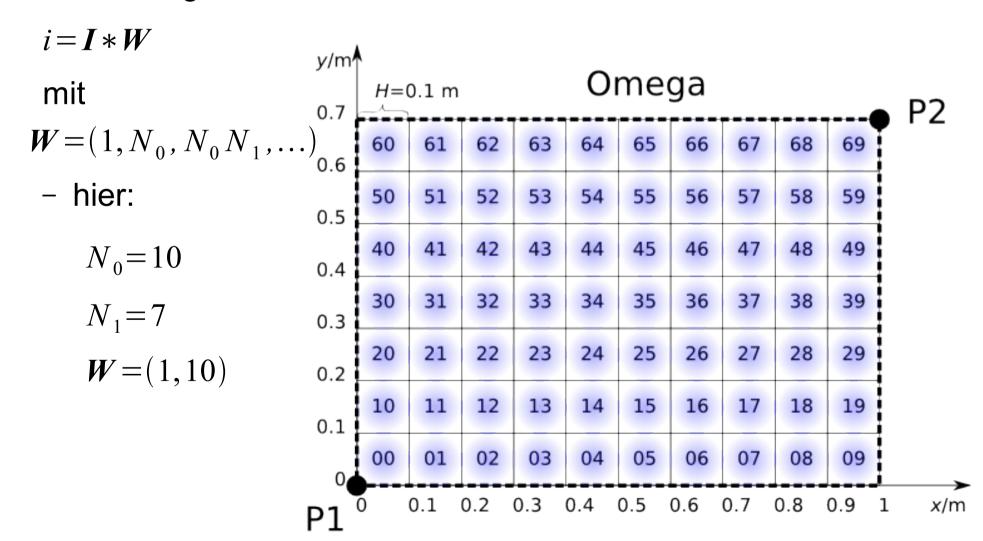
Örtliches Raster

- Das Rechengebiet Ω wird definiert über zwei Punkte P₁, P₂
 - Länge in jeder Dimension: $L=P_2-P_1$
- Da die smoothing length h fest und für alle Partikel gleich ist, verwenden wir ein globales Raster der Länge H=2h
 - Jedes Partikel erhält dadurch einen d-dimens. Integer Index $I = floor(\frac{x P_1}{H})$
 - Die Anzahl Rasterzellen in jeder Dimension ist $N = ceil(\frac{L}{H})$
 - und insgesamt:

$$n_R = \prod N \sim O\left(\left(\frac{1}{h}\right)^d\right)$$

Örtliches Raster

- Die Raster-Zellen werden durchnummeriert "wie üblich"
 - Jede Zelle erhält dadurch einen 1-D Integer-Index i
- Berechnung:

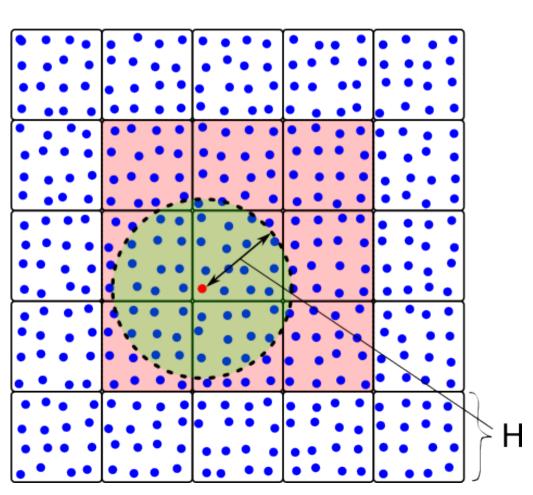


Summation der Einflüsse (einfach)

- Für alle (beweglichen) Partikel:
 - Teste alle Partikel in gleicher und umliegenden Zellen ob Abstand < 2h
 - Alle anderen sind auf jeden Fall weiter entfernt
- Anzahl umliegender Zellen:

$$n_d = 3^d$$
, $n_1 = 3$, $n_2 = 9$, $n_3 = 27$

Bild: Nachbar-Zellen in 2D

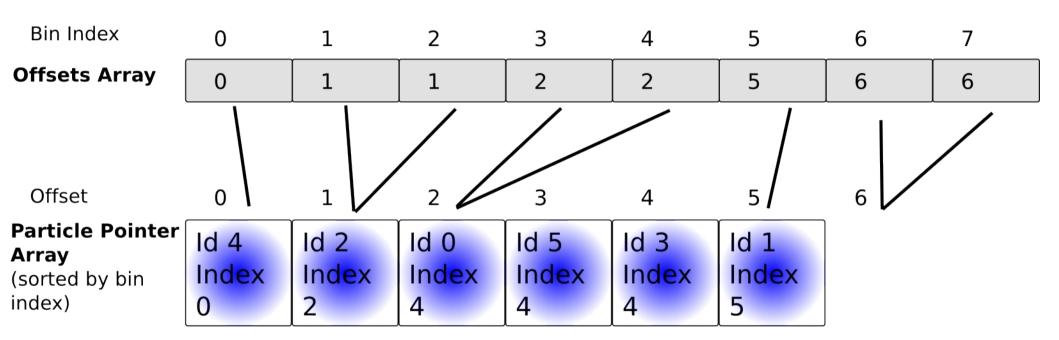


Lookup Zelle->Partikel

- Grundidee: Eine Liste je Rasterzelle
 - Jede Liste enthält Zeiger auf Partikel in der Zelle
- Klasse <u>SortedParticleIndex</u> enthält
 - Vektor <u>pointers</u> mit Zeigern auf alle Partikel, sortiert nach
 1D-Integer-Index (Länge n)
 - Partikel in gleicher Zelle liegen nebeneinander (runs)
 - Vektor <u>offsets</u> (Länge n_R) enthält Begin des *runs* je Zelle
- Liste von Zelle i = run der Partikel mit Index i in pointers
- Anzahl der Partikel in Zelle i = offsets[i+1] offsets[i]

Lookup Zelle->Partikel

- Beispiel: n_R =8 Raster-Zellen, n=6 Partikel
- Beginn der Liste Zelle i: offsets[i], Länge: offsets[i+1] offsets[i]



- 1 Partikel in Zelle 0
- 1 Partikel in Zelle 2
- 3 Partikel in Zelle 4
- 1 Partikel in Zelle 5

Aktualisieren der Datenstruktur

- Sortiere Liste <u>pointers</u> mit parallelem Integer-Sortieralgorithmus
 - Schneller als allgemeines vergleichsbasiertes Sortieren
 - Hier anwendbar: Maximal n_R mögliche Indizes
- Paralleles Counting Sort nach
 - "Practical parallel algorithms for personalized communication and integer sorting" (1996)
 - David A. Bader, David R. Helman and Joseph J'aj'a
 - ACM Journal of Experimental Algorithmics
- Erstellt Histogramm <u>hist</u> (zähle Partikel in jeder Zelle)
- Dann Präfixsummen <u>pref</u> davon: $pref[i] = \sum_{i=0}^{i} hist[j]$
 - offsets = shift(pref, 1)
 - Was vorher in einem Postprocessing-Schritt erstellt werden mußte ist hier Nebenprodukt des Sortieralgorithmus!

Paralleles Histogram

N = Anzahl Daten, m_valueRange = Anzahl mögl. Werte

```
- omp parallel:
      myLocalCount = localCounts + myid;
      myLocalCount->resize(m_valueRange);
#ifdef OPENMP
#pragma omp for
#endif
      for(long i = 0; i < N; ++i) {
        value_type v = m_valueGetter(*(beg + i));
        ++(*myLocalCount)[v];
      for(size_t j = 0; j < nthreads; ++j) {</pre>
#ifdef OPENMP
#pragma omp for
#endif
        for(long i = 0; i < long(m_valueRange); ++i) {</pre>
          m_counts[i] += localCounts[j][i];
```

Parallele Präfixsummen

- myLowN, myHighN: Bereich der Daten von Thread
 - omp parallel:

```
for(size_t i = myLowM + 1; i < myHighM; ++i) {</pre>
        m_histogram[i] += m_histogram[i-1];
     }
     totals[myid] = m_histogram[myHighM - 1];
fifdef OPENMP
pragma omp barrier
tendif.
     if (myid == 0) {
        for(size_t i = 1; i < nthreads; ++i) {</pre>
          totals[i] += totals[i - 1];
     }
fifdef _OPENMP
pragma omp barrier
tendif.
     if (myid > 0) {
        size_t const myTotal = totals[myid-1];
        for(size_t i = myLowM; i < myHighM; ++i) {</pre>
          m_histogram[i] += myTotal;
     }
```

3-Schritt Paralleles Counting Sort

- Es wird anhand der Präfixsummen in drei Schritten umsortiert
 - "An h-balanced personal communication"
 - $h = N/p^2 + p/2$
 - Zwei Schritte in denen sich die Prozessoren gegenseitig Aufgaben zuweisen
 - Dazu können zwei Arrays der Größe p x p x h verwendet werden
 - Im 2. und 3. Schritt maximal p * h Werte für jeden Prozessor zu behandeln (im 3. werden die Werte umsortiert)
- Auf folgender Folie zunächst eine vereinfachte Fassung mit nur einem Zwischenschritt

2-Schritt Paralleles Counting Sort

```
- omp parallel:
      if (myid == 0) {
        tmp.resize(nthreads);
#pragma omp barrier
      tmp[myid].resize(nthreads);
      for(size_t i = myLowN; i < myHighN; ++i) {</pre>
                                                           Nicht bekannt wie viele
        value_type v = m_valueGetter(*(beg + i));
                                                           Werte jedes
        long offset = prefixSums[v] - 1;
                                                           tmp[myid][targetProc]
        long const targetProc = offset / myRangeN;
                                                           erhalten wird
        tmp[myid][targetProc].push_back(*(beg + i));
#pragma omp barrier
      ; // "this pragma must immediately precede a statement"
      long offset:
      for(size t i = 0: i < nthreads: ++i) {</pre>
        std::vector<it_value_type> const &bin = tmp[i][myid];
        for(size_t j = 0; j < bin.size(); ++ j) {</pre>
                                                             Hier nicht balancierte
          it_value_type vind = bin[j];
                                                             Last wenn Werte nicht
          value_type v = m_valueGetter(vind);
                                                             gleichmäßig über
          offset = --prefixSums[v];
                                                             Wertebereich verteilt
          *(beg + offset) = vind;
        }
      }
```

3-Schritt Paralleles Counting Sort

- omp parallel:

```
std::valarray(unsigned) sendToProc(nthreads);
      for(size_t i = myLowN; i < myHighN; ++i) {</pre>
        value_tupe v = m_valueGetter(*(beg + i));
        long offset = prefixSums[v] - 1;
        long const targetProc = offset / myRangeN;
        tmp[myid][(myid + targetProc + sendToProc[targetProc]) % nthreads].push_back(*(beg + i));
        ++sendToProc[targetProc];
#pragma omp barrier
      for(size_t i = 0; i < nthreads; ++i) {</pre>
        FixedSizedArray(it_value_type) const &bin = tmp[i][myid];
        for(size_t j = 0; j < bin.size(); ++ j) {</pre>
          it_value_type vind = bin[j];
          value_type v = m_valueGetter(vind);
          long offset = prefixSums[v] - 1;
          long const targetProc = offset / myRangeN;
          tmp2[myid][targetProc].push_back(vind);
        }
      }
#pragma omp barrier
      long offset:
      for(size_t i = 0; i < nthreads; ++i) {</pre>
        FixedSizedArray<it_value_type> const &bin = tmp2[i][myid];
        for(size_t j = 0; j < bin.size(); ++j) {</pre>
          it_value_type vind = bin[j];
          value_type v = m_valueGetter(vind);
          offset = --prefixSums[v];
          *(beg + offset) = vind;
```

Lookup Zelle->Partikel

- Vorteile
 - Lookup sehr schnell O(1)
 - Paralleles sortieren theoretisch nur O(n) statt n*log(n)
 - Kein Faktor log(n) wie bei Baumstruktur
 - Speicherbedarf für $n_{\rm R}$ "Listen" ist minimiert: $n_{\rm R}^{*}$ 4 Byte
 - doppelt verkettete Liste: n_R * 2 * 8 Byte
 - nicht mehr als 2³² Partikel
 - Sortieren verschiebt außerdem Partikel die das Gebiet verlassen haben ans Ende der Liste
- Nachteile
 - Neuerstellen der gesamten Datenstruktur in jedem Schritt
 - Denkbar wäre bei anderer Datenstruktur umsortieren nur von den Partikeln die ihre Zelle gewechselt haben

Hashing

- Bilde elementweise Rest 2^m des Integer-Index
 - $-I_H=I \mod 2^m$
 - Anzahl Hash-Zellen: $n_H = (2^m)^d = 2^{md}$
 - Berechung effizient durch **bitand** mit $(2^m 1)$
 - 1D-Hash Integer

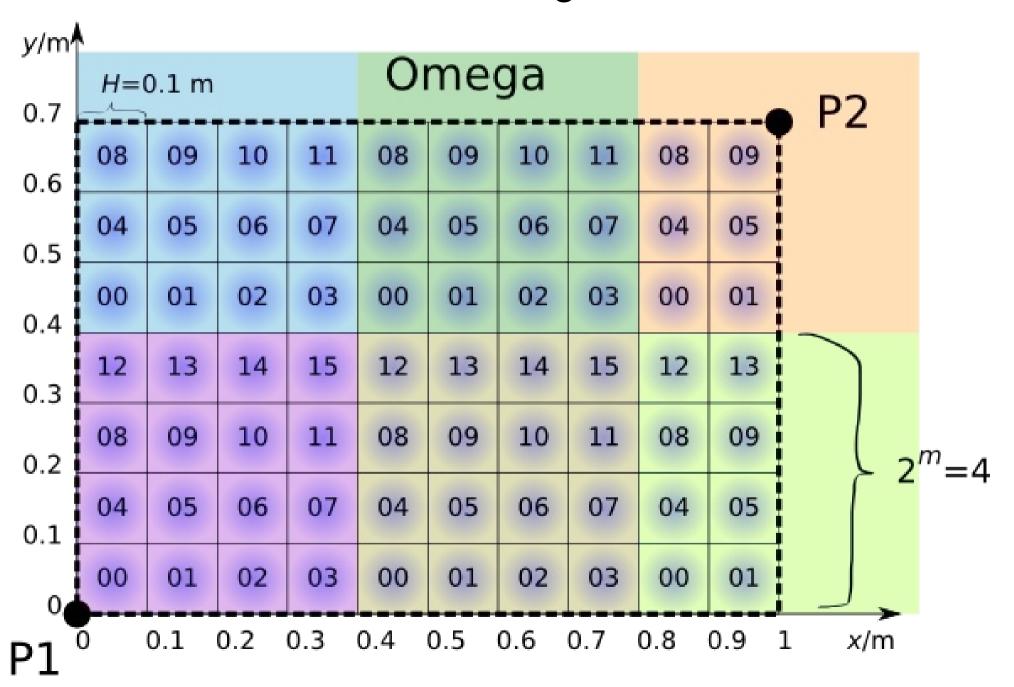
$$i_H = I_H * W_H, W_H = (1, 2^m, 2^{2m}, ...)$$

 Berechung effizent durch elementweises Linksschieben und Kombination mit bitor:

$$i_{H} = bitor(I_{H} \ll S_{H}), S_{H} = (0, m, 2m, ...)$$

- Begrenzt Speicherbedarf: Array offsets von SortedParticleIndex hat nun nur Länge n_{\perp}
- Auch andere Hashfunktionen möglich
 - Bessere Lastbalancierung mit randomisierendem Hashing?

Hashing



Zeit-Integration

- Separates Projekt "integrate", verschiedene Verfahren als C++-Templates implementiert
 - Verwendbar mit Skalaren und Vektoren
 - Typparameter "ForceFunctor" berechnet Einflüsse
 - Klasse mit Funktionen <u>operator()</u> und <u>update</u>
- Einzelschrittverfahren verwenden zusätzliche Stützstellen zwischen t und t + dt
 - Explizites Euler-Verfahren (Sonderfall, keine Stützstellen)
 - Runge-Kutta-, Trapez-, Heun-Regeln
 - Verfahren bestimmt durch Ordnung p, Koeffizienten-Vektoren a, c und Koeffizientenmatrix b
 - p Funktionsauswertungen je Schritt
 - Quelle: Bronstein

Zeit-Integration

- Mehrschrittverfahren verwenden gewichtete Zustände aus der Vergangenheit
 - Adams-Bashforth-Methode (ABM)
 - Bis 7. Ordnung, weitere möglich
 - Eine Funktionsauswertung je Schritt
 - Adams-Moulton-Methode (AMM)
 - Implizites Verfahren, erfordert Schätzwert in der Zukunft, durch impliziten Schritt (nicht implementiert)
 - Verwenden Einzelschritt-Methode für die ersten Schritte
- <u>Prädiktor-Korrektor</u>-Verfahren (PK)
 - AMM mit ABM als Schätzer
 - Zwei Funktionsauswertungen je Schritt
- Quelle: Artikel Mehrschrittverfahren in der Wikipedia

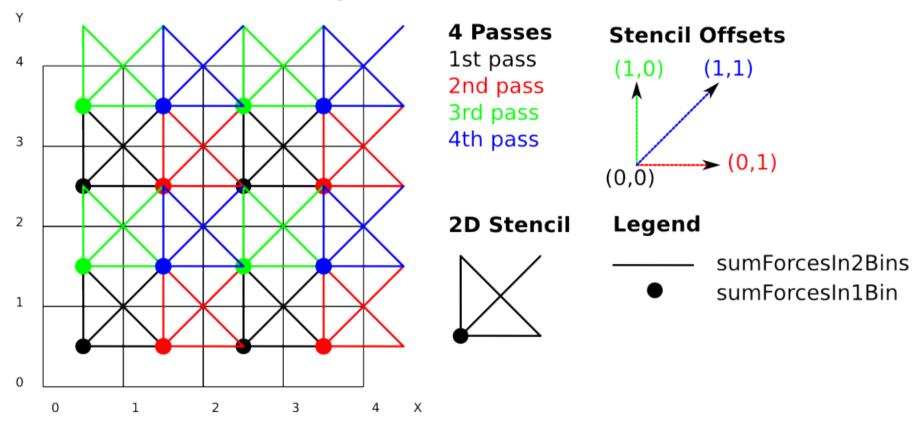
- Idee: Einflüsse sind (fast) symmetrisch
 - Einfluss jedes Partikelpaars nur einmal berechnen
- Parallelisierung erfordert Aufteilung des Gebiets um race conditions zu verweiden
 - Paare von Partikel müssen einem Thread zugeteilt werden
- Ansatz: Teile Paare von Rasterzellen Threads zu
 - Hilfsfunktionen <u>sumForcesIn1Bin</u>, <u>sumForcesIn2Bins</u>

Χ

2

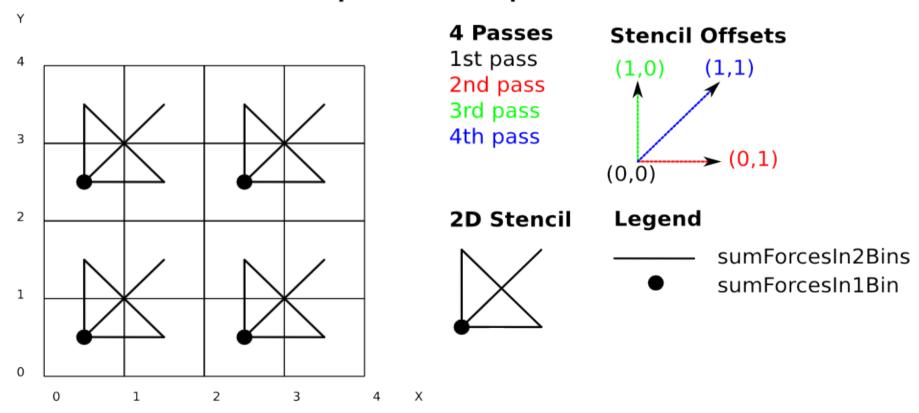
- Verallgemeinerung auf 2D, 3D?
- Graphische Lösung 2D:

2D Parallel force computation

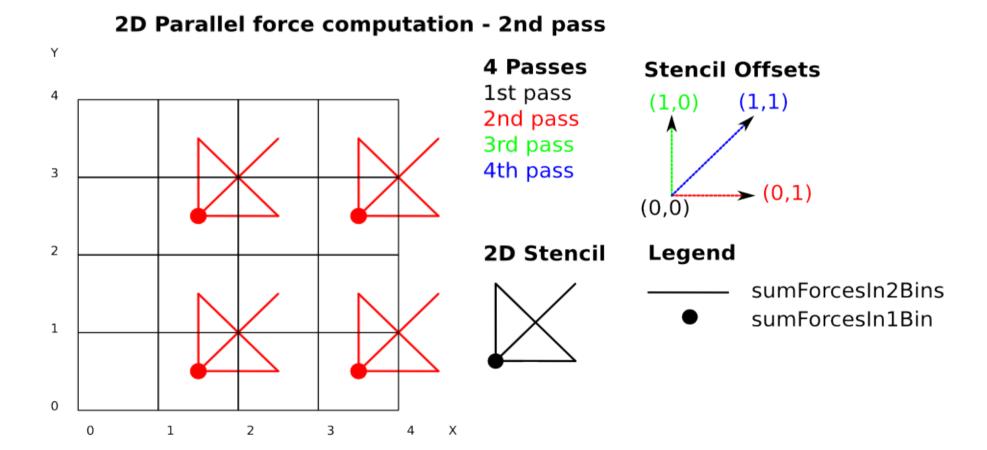


• Graphische Lösung 2D:

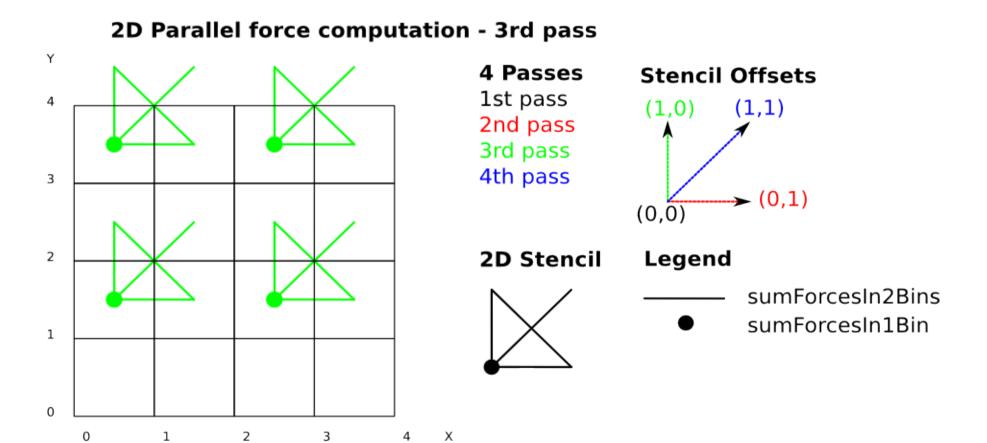
2D Parallel force computation - 1st pass



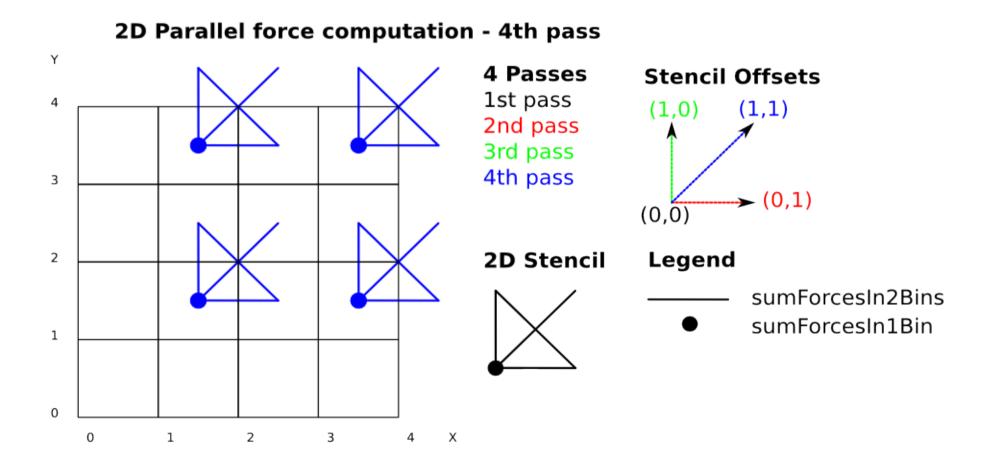
Graphische Lösung 2D:



• Graphische Lösung 2D:



Graphische Lösung 2D:



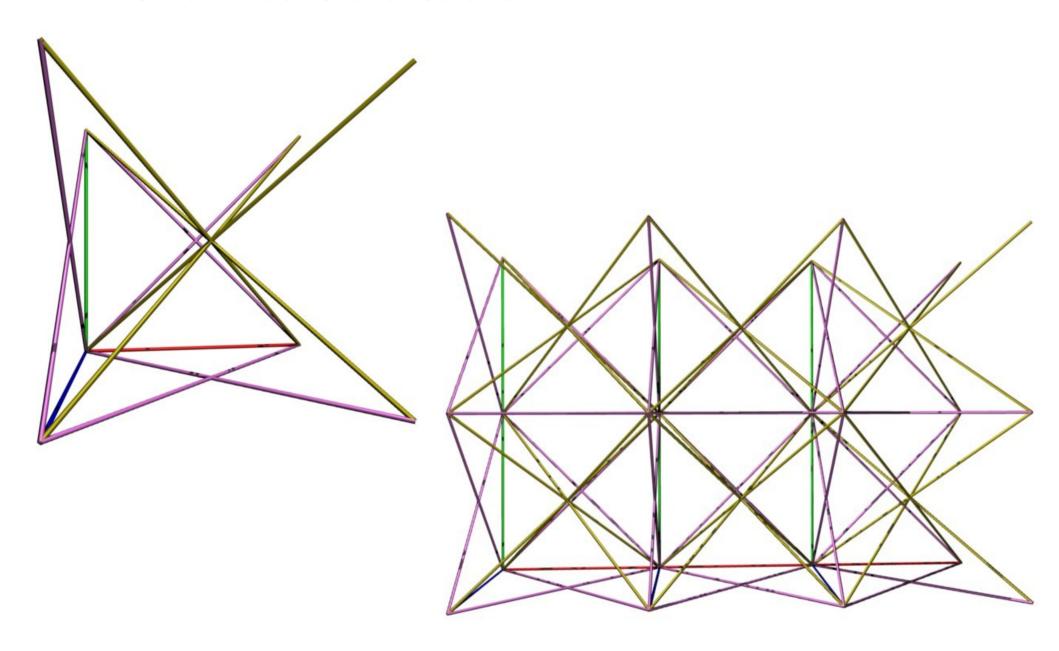
P bei d=2:

- Grund-Raster: Alle Zellen mit nur geradem Integer-Index
- Verschiebung (Offset):

```
    1D: gerade und ungerade Zellen 2
    (0, 0)
    (0, 1)
```

- 2D und 3D: 2^d Möglichkeiten (1, 0) • (1, 1)
- Definiere Feld P mit allen möglichen Offsets:
 - Aufzählung von {0,1}^d
- Das Muster (Stencil) muß so aussehen, daß
 - Alle Relationen zwischen Zellen berücksichtigt werden
 - Die Stencils eines Durchlaufs sich nicht überlappen (race conditions)
 - SumForcesIn1Bin: Anwenden auf Zelle (0,0,...) des Stencils
 - SumForcesIn2Bins: Anwenden auf alle Kombinationen (P[i] P[j]) für die P[i] * P[j] = 0

• In 3D sieht der Stencil so aus:



Algorithmus

```
    for oddity in P: // 2<sup>d</sup> Durchläufe
```

- Parallel for pos in even^d (hashed) raster positions:
 - sumForcesInOneBin(hash(pos + oddity))
 - **for** i in [1, $2^d 1$]
 - **for** *j* in [0, *i* 1] // alle Kombinationen (*i*,*j*)
 - If (i bitand j) == 0
 - sumForcesIn2Bins(hash(pos + oddity + P[i]), hash(pos + oddity + P[j]))
- Annahme: $(i \text{ bitand } j) = 0 \le P[i] * P[j] = 0$
 - P[i] enthält i in Binärdarstellung als {0,1}-Vektor
- Parallele Schleife mit <u>schedule(dynamic)</u> oder <u>schedule(static,10)</u> um Last gleichmäßig zu verteilen

Wie viele Relationen zwischen Zellen gibt es in dem Stencil?

$$I_1 = 1$$
, $I_2 = 4$, $I_3 = 13$

$$-I_{d}=(3^{d}-1)/2$$

- Sequence A003462 aus der AT&T Integer Sequence Encyclopedia
- Warum gerade die i,j mit P[i] * P[j] == 0?
 - Wenn P[i] * P[j]!= 0 dann haben beide (mindestens) eine
 1 in einer/mehreren Koordinate(n)
 - Diese Zellen-Kombination wird in anderem Durchlauf berücksichtigt: in dieser/n Dimension(en) 1 abziehen
 - Wird in dem Durchlauf berücksichtigt in dem oddity gerade diesen Wert hat.

- Verbesserung von <u>sumForcesIn1Bin</u>, <u>sumForcesIn2Bins</u>:
 - Sortiere in <u>SortedParticleIndex</u> mit anderem Prädikat:
 - Sortiere nach Raster-Index
 - Dann nach beweglich/unbeweglich
 - Nun Partikel mit gleichem Index nebeneinander, erst bewegliche, dann unbewegliche
 - Lexikographische Ordnung nach (<u>isOut</u>, <u>index</u>, <u>isBoundary</u>)
 - Speichere Offsets bewegliche/unbewegliche Partikel separat
 - Verdoppelt Länge von <u>offsets</u>
 - Dann z.B. in <u>sumForcesIn2Bins(a,b)</u>:
 - Kombiniere bewegliche aus a mit allen aus b
 - Kombiniere unbewegliche aus a mit beweglichen aus b
 - Tests p.isBoundary(), o.isBoundary() in Schleife entfallen

- Probleme
 - Berechnung der Indizes ist nicht umsonst
 - Verwende 2er-Potenzen und bitweise Operationen
 - Effizienteste Aufzählung?
 - Immer Durchlaufen aller Rasterzellen auch wenn viele leer
 - Parameter m darf nicht zu klein und nicht zu groß sein für gute Laufzeiten
 - Vergleich naive Summation: Parameter m so groß wie es von Speicher her vertretbar ist

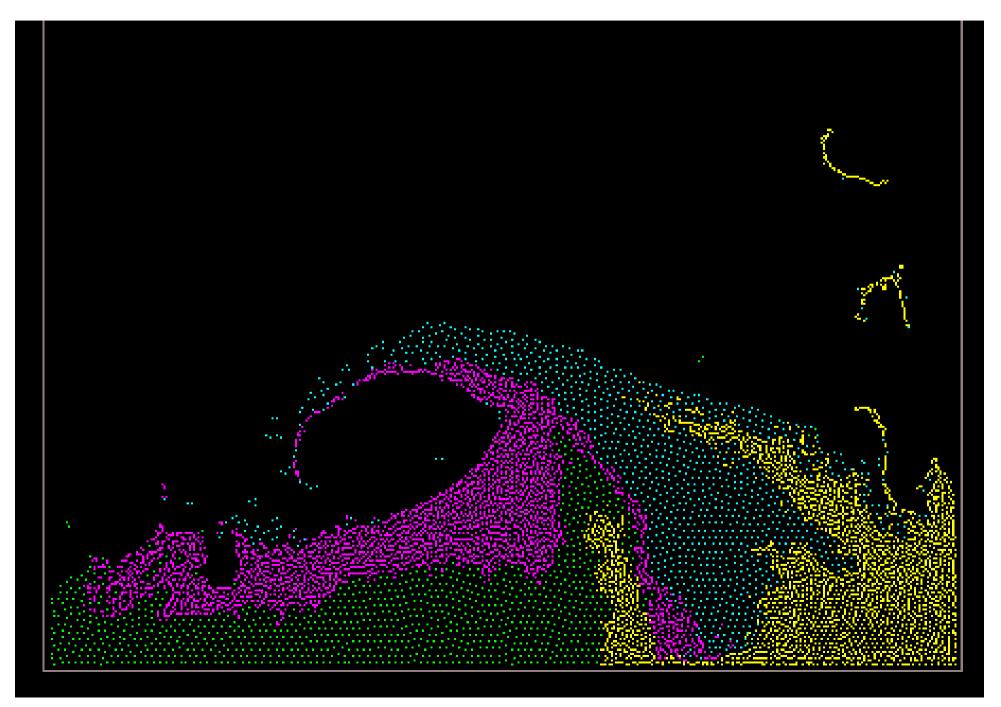
Vergleich mit naivem Ansatz

- Parallelisierung über Partikel
 - Symmetrie nicht ausgenutzt (2r Relationen berechnet)
 - Nur wo Partikel sind wird auch gerechnet
 - n * 3^d Lookups in Zelle->Partikel Mapping
- Parallelisierung über Gebiet
 - Symmetrie genutzt (r Relationen berechnet)
 - Alle Einflüsse zwischen zwei Rasterzellen auf einen Schwung berechnet
 - gut für Cache
 - In jedem Durchlauf Lookup jeder Raster-Zelle und aller Partikel
 - schlecht f
 ür Cache
 - $2^{d*} 2^{md} = 2^{d(m+1)}$ Lookups insgesamt

Initialisierung von Partikeln

- Aufgabe: Erstellen von Szenarien
- Lade Randpartikel aus Datei (3 Koordinaten je Partikel)
 - Generiert mit Skript oder Modeler (Blender via X3D Export)
- Wasser: Angabe von num "Gebieten"
 - Je Gebiet Angabe von Gebiet (zwei Punkte), Anzahl Partikel, Dichte, Geschwindigkeit, Epsilon
 - Kollisionen, Explosionen
 - Flächen- und Linienbelegungen (entlang Achsen)
 - Bilde equidistantes Gitter mit Störung durch Epsilon
 - Masse = Volumen * Dichte / Anzahl
 - Ermöglicht unterschiedlich hoch "aufgelöste" Wasser
 - dadurch Partikel mit verschiedener Masse!
 - Eine "Farbe" je Gebiet

Verschiedene Auflösungen



Initialisierung von Partikeln

- Weiterer Parameter je "Gebiet" i: Free
 - freischwebend ja oder nein
- Ja: Dichte(Partikel) = Dichte(Gebiet)
- Nein: Dichte(Partikel) = Dichte(Tiefe, Gebiet)

- Löse
$$P(\rho) = \rho_{0,i} g h$$

$$B\left(\left(\frac{\rho}{\rho_{0,i}}\right)^{\gamma} - 1\right) = A = \rho_{0,i} g h$$
- Maxima sez:
$$\rho = \left(\frac{\rho_{0,i}^{\gamma} \rho_{0,i} g h}{B} + \rho_{0,i}^{\gamma}\right)^{\frac{1}{\gamma}}$$

- Anders als bei Monaghan
- Tiefe abhängig von Gitterposition und Schwerkraft
 - Todo: relativ zu definiertem "Boden" (Stapeln von Gebieten in Gefäß)

Einfluß des Hashings auf Distanztests

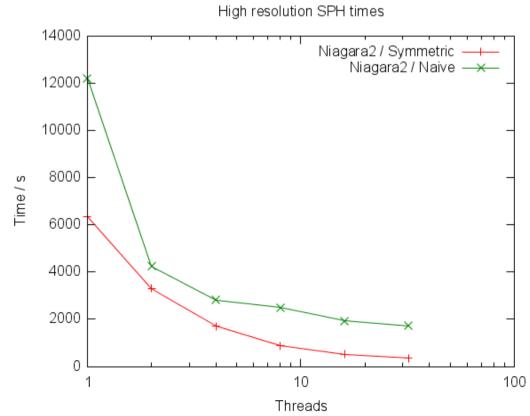
- 2D, 2460 Randpartikel, H=0,01, Omega=1 m²
 - Testfall settings/schwapp-2d.sh
 - 4096 Partikel verteilt auf 0,4 m²:
 - m=4: 2,47 Relationen/Partikel, 73 Distanztests/Partikel
 - m=5: 2,47 Rels/P, 17,6 Dtests/P
 - m=6: 2,47 Rels/P, 5,3 Dtests/P
 - m=7: 2,47 Rels/P, 4,2 Dtests/P
 - 16384 Partikel verteilt auf 0,4 m²:
 - m=4: 15,3 Relationen/Partikel, 289 Distanztests/Partikel
 - m=5: 15,3 Rels/P, 70,2 Dtests/P
 - m=6: 15,3 Rels/P, 24,4 Dtests/P
 - m=7: 15,3 Rels/P, 23 Dtests/P

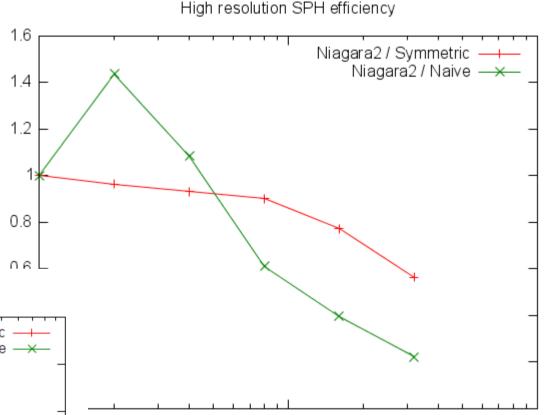
Leistung: Zeiten und Effizienz

Efficiency

• 3D

- PK-Integrator
- Partikel n = 1,3 Mio.
- Davon 185 000 Rand
- 50 Zeitschritte





10

Threads

• H=2,5 mm

m=6

ca. 7 Rels/P, 100 Dtests/P

100

- Zellen n_H= 64 Mio
- Speicher 1,2 GB

Zusammenfassung

- Funktionierender SPH Kode
 - Todo: physikalische Kalibrierung / realistische Tests
 - Todo: Quellen/Injektion von Partikeln
 - Vorbereitet f
 ür weitere Phasen / Partikelarten
- SortedParticleIndex effiziente Indexstruktur
 - Todo: Vergleich mit anderen Indexstrukturen
- Hashing reduziert Speicherplatz
- Gebietsparallelisierung spart Rechenaufwand und skaliert besser als naive Summation