

Random transition layers construction method and its application in heterogeneous structures multiscale modelling by OpenCL technology

(Summary)

The transition layer modelling is an actual problem that often occurs in the analysis or design of physical environments, which consist of two or more components. Examples of such environments are composites. In the heterogeneous environments models construction, depending on the selected level of detail, transition layers can be described as: separated units; simplified elements of regular structural units; and as random distribution of some different materials concentration of microlevel model elements. Models included in the last class are the most promising in terms of research, automation, and further practical usage, since give ability to most adequately describe the real physical and spatial structure of heterogeneous environments.

Random microlevel models can be divided into cellular and random scalar fields models, to which is devoted this work. Compared to the cellular, the latter give considerable flexibility of real physical microstructures formalization that can be modeled by them.

On the other hand, the usage of more primitive in comparison with microlevel, structural models of heterogeneous environments, greatly simplifies the calculations and reduces their number, especially in tasks of design. The main disadvantage of models which are included in this class is the usage of averaging techniques, which are based on a number of axiomatic assumptions that cannot always be kept in practice, so their usage is very limited.

This paper provides a version of the described models classes main advantages combination. For this, the method of microlevel random transition layers construction at different modeling scales is proposed. This allows one to construct the heterogeneous environments structures models, as a combination of deterministic elements with given stochastic transition layers between them. In addition, the method can be used recurrently for direct multiscale modelling of random scalar fields.

Taking into account that simulation of random scalar fields requires a large number of identical calculations, it can be effectively done on SIMD (Single Instruction Multiple Data) architectures of computing devices, such as graphics cards (GPU). This paper describes such software implementation based on OpenCL (Open Computing Language) technology. Thus, one can significantly increase the speed, due to the simultaneous code execution on a large number of computing cores.

The problem of random scalar fields construction consists of following stages:

1. build random distribution in some representative volume element (RVE) of heterogeneous environment, that preferably is a three-dimensional matrix, each element of which is a random scalar quantity (intensity) in the range $[0, 1]$;

2. coarsening of basic random distribution, preferably by linear filter, by calculating intensity as the average value of neighboring intensities weighted by some coefficients (well known Gaussian filter is very often used at this stage);
3. application of level-cut on received coarsened field at some level of selected range or simultaneous usage of several level-cuts.

Graduation, i.e. modeling of some functional transitions between phases of heterogeneous environments, is widely used in models of functionally graded materials (FGM). For graduation of random scalar fields models, special function that describes the desired form of random fields is introduced into base intensity distribution coarsening filter. In the simplest case, intensity function describes the linear decline, between environment phases that conditionally equal to 1 and 0. Then should be repeated the previously described steps of random scalar fields modelling, with the difference that under filtering the value intensity should be added to found coarsened field. This approach can be used iteratively. In this case, by reducing the size of the filter at each iteration, it is possible to simulate heterogeneous structures with different scales of grading.

Taking into account relatively large number of elements of the representative volume element matrix, high memory access latency of SIMD architectures for random graded transition layers construction, is proposed the following procedure:

1. Apply to the initial intensity function, saved in the representative volume element matrix, two-level-cut. Accept values that do not get into the cut as masked and assign them opposite in sign value, reduced by some constant. Here, one phase intensity equal to zero, and another, to one. The constant is needed for cases where it is necessary to consider the intensity equal to zero or one. There no necessity to create a separated masking matrix.
2. Create a new matrix of the same size and construct there a random field with required filter by using previously described steps.
3. Multiply the unmasked intensity function values on the desired ratio, and add to them the value of constructed random field.
4. Normalize unmasked values.
5. Remove the mask.

An example of the realization by high-performance parallel and distributed computing technology OpenCL is shown. This allows one to effectively do the modelling on computing devices with SIMD architecture, such as graphics cards or multi-core CPU. In particular, the simulation results are presented, which show that even when using an ordinary PC configuration, implementation under OpenCL technology provides more than ten-fold acceleration in the calculations of such problems.

**Метод побудови випадкових перехідних шарів та його застосування у
мультимасштабному моделюванні структур гетерогенних середовищ за допомогою
технології OpenCL**

(Резюме)

Моделювання перехідних шарів є актуальною задачею, що часто зустрічається при аналізі чи проектуванні фізичних середовищ, які складаються з двох чи більше компонент. Прикладом таких середовищ є композиційні матеріали. При побудові моделей структури гетерогенних середовищ, в залежності від обраного рівня деталізації, перехідні шари можуть описуватися як: окремі одиниці; спрощені елементи регулярних структурних одиниць; та як випадковий розподіл з деякою концентрацією різних матеріалів елементів мікрорівневої моделі. Моделі, що входять до останнього класу є найбільш перспективними у плані досліджень, автоматизації, та подальшого практичного використання, оскільки дають змогу максимально адекватно описувати реальні фізичні та просторові структури гетерогенного середовища.

Випадкові мікрорівневі моделі, в свою чергу поділяються на коміркові та моделі випадкових скалярних полів, яким присвячена дана робота. У порівнянні з комірковими, останні дають значну гнучкість у формалізації класів реальних фізичних мікроструктур, що можуть бути ними змодельовані.

З іншої сторони, використання більш примітивних, у порівнянні з мікрорівневими, структурних моделей гетерогенних середовищ, значно спрощує обчислення та зменшує їх кількість, особливо у задачах проектування. Основний недолік моделей, що входять до цього класу – використання методів усереднення, які базуються на ряді аксіоматичних припущень, яких не завжди вдається дотримуватися на практиці, тому їх використання є сильно обмеженим.

У даній роботі наводиться варіант об'єднання основних переваг описаних класів моделей. Для цього, пропонується метод побудови випадкових мікрорівневих перехідних шарів при різних масштабах моделювання. Це дає змогу будувати моделі структур гетерогенних середовищ, як комбінацію детермінованих елементів з заданими стохастичним перехідними шарами між ними. Крім того, метод можна застосовувати рекурентно для безпосереднього мультимасштабного моделювання випадкових скалярних полів.

Враховуючи те, що моделювання випадкових скалярних полів вимагає велику кількість однакових обчислень, його ефективно реалізовувати на SIMD (Single Instruction Multiple Data) архітектурах обчислювальних пристроїв, наприклад, на графічних картах (GPU). У цій роботі описано таку програмну реалізацію на основі технології OpenCL (Open Computing

Language). Таким чином, можна значно збільшити швидкодію, за рахунок одночасного виконання програмного коду на великій кількості обчислювальних ядер.

Задача моделювання випадкових скалярних складається таких основних етапів:

1. побудова базового випадкового розподілу у деякому елементарному об'ємі (RVE) гетерогенного середовища, що переважно представляє собою тривимірну матрицю, кожен елемент якої є випадковою скалярною величиною (інтенсивністю) в діапазоні $[0;1]$;
2. огрублення базового випадкового розподілу деяким, переважно лінійним, фільтром, шляхом обчислення інтенсивності, як середнього значення сусідніх інтенсивностей, зважених деяким коефіцієнтом (дуже часто, на цьому етапі використовується, добре відомий, Гаусовий фільтр);
3. застосування перерізу отриманого огрубленого поля на деякому рівні вибраного діапазону, або застосування одночасно кількох перерізів.

Градування, тобто моделювання деяких функціонально заданих переходів між фазами гетерогенних середовищ, широко застосовується в моделях функціонально-градуваних матеріалів (FGM). Для градування моделей випадкових скалярних полів, у фільтр огрублення базового розподілу інтенсивностей, вводять спеціальну функцію інтенсивностей, що описує бажану форму випадкових полів. У найпростішому випадку, функція інтенсивностей описує лінійний спад, між фазами середовища, що умовно рівні 1 та 0. Після цього, повторюються попередньо описані кроки моделювання випадкових скалярних полів, з тією відмінністю, що при фільтруванні, до знайденого огрубленого значення поля слід додати значення інтенсивності. Цей підхід можна використовувати ітераційно. При цьому, зменшуючи на кожній ітерації розміри фільтра, з'являється можливість моделювати гетерогенні структури з різними масштабами градування.

Враховуючи досить велику кількість елементів матриці елементарного об'єму, високу латентність доступу до пам'яті на SIMD архітектурах для побудови випадкових градуваних перехідних шарів, пропонується наступна процедура:

1. Застосувати до початкової функції інтенсивностей, збереженої у матриці елементарного об'єму, подвійний переріз. Прийняти значення, що не попадають в переріз як замасковані та присвоїти їм протилежні по знаку значення, зменшені на деяку константу. При цьому вважаємо інтенсивність однієї фази середовища рівну нулю, а іншої, рівну одиниці. Константа необхідна для випадків, коли необхідно розглядати інтенсивності, що рівні нулю чи одиниці. Немає необхідності створювати окрему матрицю маскування.

2. Створити нову матрицю такого ж розміру, та побудувати в ній випадкове поле з застосуванням необхідного фільтру, за допомогою попередньо описаних кроків.
3. Помножити не замасковані значення функції інтенсивності, на необхідний коефіцієнт, та додати до них значення побудованого випадкового поля.
4. Нормалізувати не замасковані значення.
5. Зняти маску.

Наводиться приклад реалізації на основі технології високопродуктивних паралельних і розподілених обчислень OpenCL. Це дає змогу ефективно проводити моделювання на обчислювальних пристроях з SIMD архітектурою, наприклад, на графічних картах чи багатоядерних центральних процесорах. Зокрема, наведені результати моделювання, з яких видно, що навіть при використанні персональних комп'ютерів пересічної комплектації, реалізація з допомогою технології OpenCL дає більш ніж десятикратне прискорення в обчислення таких задач.