

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра математической кибернетики

и компьютерных наук

**РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ВЫЧИСЛЕНИЙ В
КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТОМ МОДЕЛИРОВАНИИ**

АВТОРЕФЕРАТ ДИПЛОМНОЙ РАБОТЫ

студента 6 курса б11 группы заочного отделения

направления подготовки: 010501 Прикладная математика и информатика

факультета компьютерных наук и информационных технологий

Шайманова Александра Александровича

Научный руководитель

профессор каф. МОВКИС, д.ф.-м.н. _____ Андрейченко Д. К.

Зав. кафедрой МКиКН к.ф.-м.н.

_____ Миронов С. В.

Саратов 2016

Введение. В настоящее время наблюдается повышенный интерес к программным комплексам, предназначенных для конечно-элементного моделирования в задачах математической физики, а их современные версии, предназначенные для использования на параллельных высокопроизводительных вычислительных системах, представляют собой весьма дорогостоящее программное обеспечение. Разработка данных программных продуктов невозможна без использования ряда технологий параллельного программирования. Основанная на многопоточности современных операционных систем стандартная технология OpenMP используется на симметричных мультипроцессорных системах с общей памятью, к которым относится наибольшая доля выпускаемых в настоящее время серийным образом ноутбуков, рабочих станций и высокопроизводительных серверов, позволяет распараллелить вычисления в пределах отдельного процесса путем сопоставления его потоков отдельным процессорам (ядрам) рабочей станции. Технология MPI, основанная на передаче сообщений между процессами, используется на высокопроизводительных кластерных системах с распределенной памятью.

Но все-таки распараллелить удастся далеко не все задачи. Например, хорошо распараллеливаются задачи линейной алгебры с плотно заполненными матрицами достаточно большой размерности. Возможность распараллеливания задач линейного программирования достаточно большой размерности исследована в данной работе. Вместе с тем, не изучен полностью вопрос о возможности распараллеливания вычислений при разработке столь сложного, многоуровневого и иерархически организованного программного обеспечения, как современные программные комплексы конечно-элементного моделирования.

Любой современный программный комплекс конечно-элементного моделирования включает в себя следующие компоненты:

1) Препроцессор, который получает на вход трехмерную геометрическую модель в одном из общепринятых форматов (например, IGES), и далее генерирует конечно-элементную сетку.

2) Так называемый «решатель» (Solver). Он получает на вход конечно-элементную сетку от препроцессора и далее наделяет группы конечных элементов нужными свойствами физической среды, задает граничные условия и выполняет численное решение задачи математической физики на основе проекционного либо вариационного метода Галеркина.

3) Постпроцессор, который получает от решателя результаты численного решения математической физики и отвечает за визуализацию полученных результатов.

После некоторого расширения функциональности открытого пакета конечно-элементного моделирования OpenFEM2008a с целью снижения требований к объему оперативной памяти, данный пакет позволяет уже на домашнем компьютере анализировать факторы, влияющие на эффективность распараллеливания типовых операций конечно-элементного моделирования.

В настоящей работе в качестве препроцессора использован свободно распространяемый пакет GMSH-2.4.2 (32-битная версия для Windows), в качестве решателя: для симметричной мультипроцессорной системы с общей памятью - свободно распространяемый пакет OpenFEM2008a совместно с пакетом MATLAB2014b (64-битная версия для Windows).

В качестве тестовой задачи рассматривается задача о нахождении спектра собственных частот упругой оболочки корпуса газового крана (рассматриваемой как трехмерное упруго деформируемое тело), возникающая при его вибрационной диагностике.

Численное моделирование различных классов задач математической физики на основе метода конечных элементов приводит к факторизации разреженных матриц достаточно большой размерности. Трудоёмкость данной операции требует ее распараллеливания для ускорения вычислений. Известные пакеты факторизации разреженных матриц (CHOLMOD, MA57)

используют для этого блочные (Supernodal) алгоритмы исключения элементов, однако форматы хранения разреженных матриц отличны от используемого в MATLAB формата. Специальные функции «переходники», разработанные на основе MATLAB External Interfaces API, и обеспечивающие прямой вызов функций пакетов факторизации разреженных матриц непосредственно из скриптов MATLAB, позволяют в несколько раз сократить затраты оперативной памяти при реализации конечно-элементного моделирования.

Целями данной работы являются:

1. Разработка интерфейсов, позволяющих вызывать функции пакетов факторизации разреженных матриц, непосредственно из скриптов системы матричных вычислений MATLAB;

2. Выяснение наиболее затратных по времени выполняемых в конечно-элементном решателе типовых операций и возможности их распараллеливания;

3. Применительно к типовым операциям конечно-элементного моделирования, сравнение эффективности:

- факторизации симметричных (положительно определенных и неопределенных) разреженных матриц и последующего численного решения систем линейных уравнений средствами пакетов CHOLMOD, MA57;

- распараллеливания вычислений на основе многопоточности при использовании стандартных функций пакетов CHOLMOD, MA57.

Основное содержание работы. Эффективность конечно-элементного моделирования напрямую зависит от эффективности выполнения базовых операций линейной алгебры над плотно заполненными матрицами. Это обеспечивается так называемыми блочными алгоритмами (которые хорошо распараллеливаются при достаточных размерах матриц), реализованными в различных версиях библиотек поддержки высокопроизводительных вычислений BLAS и LAPACK.

Значительные размеры разреженных матриц, возникающих при математическом моделировании на основе метода конечных элементов (характерный размер: от нескольких десятков тысяч до нескольких десятков миллионов; при среднем количестве ненулевых элементов в строке/столбце - от нескольких сотен до нескольких тысяч), требуют использования специальных алгоритмов при решении систем линейных уравнений с разреженными матрицами. Предназначенные для этого пакеты при факторизации разреженных матриц используют блочные (Supernodal) алгоритмы исключения элементов. Сначала выполняется перестановка строк и столбцов, а после – исключение поддиагональных элементов сразу в блоках из нескольких столбцов. Тем самым, факторизация разреженных матриц сводится к последовательности факторизации и умножения плотно заполненных матриц (размерность которых сравнима со средним числом ненулевых элементов в столбцах) а, как известно, манипуляции над плотно заполненными матрицами достаточной размерности хорошо распараллеливаются на основе блочных алгоритмов линейной алгебры.

Повышение производительности при распараллеливании также обусловлено заблаговременным выделением памяти под хранение вспомогательных плотно заполненных матриц.

При решении систем линейных уравнений с разреженными симметричными либо Эрмитовыми положительно определенными матрицами использовался свободно распространяемый пакет CHOLMOD, а при решении систем линейных уравнений с симметричными неопределенными матрицами – свободно распространяемый пакет MA57.

Итерационный метод Ланцоша-Арнольди, который на основании ортогонализации Грама-Шмидта элементов последовательности позволяет выполнить решение частичной задачи на собственные значения для конечномерного линейного оператора, реализован в известном пакете ARPACK.

В данной дипломной работе разработана интерфейсы, позволяющих вызывать функции пакетов факторизации разреженных матриц из скриптов системы матричных вычислений MATLAB, производилась на основе модельной задачи о звуковой диагностике газового крана.

Известны методы технической диагностики запорной арматуры магистрального газопровода. На практике выявлено, что после нескольких переключений шарового газового крана возникают утечки газа через затвор. При этом актуальным становится метод вибрационной диагностики наличия набивочной пасты в затворе работающего шарового крана без остановки технологического процесса.

Турбулизация потока газа является естественным источником акустических возмущений внутри конструкции крана. Причем акустические возмущения передаются изнутри крана наружу, через его упругие элементы, полость, заполненную набивочной пастой, и собственно упругую оболочку крана, находящуюся над землей верхнюю часть конструкции, где и фиксируются акустическими датчиками. Если кран хорошо заполнен набивочной пастой, то происходит интенсивное гашение упругих колебаний оболочки корпуса по сравнению с колебаниями собственно крана как абсолютно твердого тела («в упругой подвеске», обусловленной его креплением). В противном случае, характерные амплитуды колебаний упругой оболочки становятся сравнимы с амплитудами колебаний крана как целого.

В качестве конечно-элементного решателя использовался свободно распространяемый пакет OpenFEM2008a совместно с широко распространенным пакетом матричных вычислений MATLAB2014b для ОС Windows x64. Компиляция и сборка последовательных и параллельных версий бинарных модулей пакета OpenFEM2008a выполнялась при помощи компиляторов Microsoft Visual C++ 10.0 и Intel C++/Fortran 13.0 для Windows x64. В качестве библиотек BLAS и LAPACK использовались последовательная и многопоточная версии традиционной для нас платформы

Windows x64 библиотеки поддержки высокопроизводительных вычислений Intel Math Kernel Library (MKL), поставляемой вместе с компиляторами Intel. Далее, при помощи компиляторов Intel C++/Fortran x64 были скомпилированы и собраны последовательные и параллельные версии пакетов CHOLMOD, MA57 и ARPACK, после чего были заменены входящие в состав MATLAB соответствующие динамически загружаемые библиотеки. Пробные версии компиляторов Intel использовались по той причине, что они способны автоматически генерировать код, распараллеленный на несколько потоков OpenMP.

Для ускорения вычислений и снижения требуемых ресурсов оперативной памяти к пакету OpenFEM2008a были добавлены ранее разработанные на языке C++ функции «переходники», позволяющие непосредственно вызывать функции пакетов CHOLMOD и MA57 из скриптов системы MATLAB.

Переключение с последовательной на многопоточную версию осуществлялось разрешением/запретом многопоточности в среде MATLAB, а также указанием нужной папки с соответствующими динамически загружаемыми библиотеками в системной переменной PATH.

В качестве конечно-элементного препроцессора использовался свободно распространяемый генератор конечно-элементных сеток GMSH-2.5.0.

Тестирование производительности при распараллеливании конечно-элементных вычислений на основе многопоточности проводилось на двух компьютерах:

1. Компьютер с двухъядерным процессором Intel Core i3 с тактовой частотой 2200 МГц (общая для двух ядер кэш-память уровня 2 объемом 3 МБ) и 8 ГБ оперативной памяти DDRIII-1333;
2. Компьютер с двухъядерным процессором Intel Core2 Duo с тактовой частотой 1500 МГц (общая для двух ядер кэш-память уровня 2 объемом 2 МБ) и 4 ГБ оперативной памяти DDRII-800;

3. Компьютер с двухъядерным процессором AMD Athlon 64 X2 с тактовой частотой 1800 МГц (общая для двух ядер кэш-память уровня 2 объемом 1 МБ – по 512 Мб на ядро) и 2 Гб оперативной памяти DDRII-800.

При тестировании производительности на компьютере с процессором AMD Athlon 64 X2 использовалась самая крупная (т.е. наименее подробная) из конечно-элементных сеток (12548 «неполных тетраэдров» второго порядка, 64221 степеней свободы). На компьютере с процессором Intel Core2 Duo использовалась как самая подробная из сгенерированных ранее конечно-элементных сеток (50200 «неполных» тетраэдров второго порядка, 249582 степеней свободы), так и самая крупная конечно-элементная сетка. На компьютере с процессором Intel Core i3 использовалась наиболее подробная из конечно-элементных сеток. Также при нахождении низшей части спектра собственных частот и форм колебаний (CHOLMOD) находились 5 упругих форм и частот (плюс шесть нулевых собственных частот и форм движения абсолютно твердого тела), а при уточнении собственных частот и форм (MA57) находилась одна частота.

Результаты тестирования на самых подробных сетках (Intel Core2 Duo) полностью последовательной версии с Intel MKL показывают, что наиболее затратной типовой операцией при конечно-элементном моделировании является именно операция факторизации разреженных матриц. Так, факторизация симметричных положительно определенных разреженных матриц занимает примерно 188,5 с, а факторизация неопределенных разреженных матриц – 273 с.

Из сравнения тестирования последовательных и многопоточных версий выяснилось, что распараллеливание на основе технологии OpenMP значительно снижает затраты времени именно на факторизацию разреженных матриц (в среднем со 188 с до 105 с для факторизации симметричных положительно определенных разреженных матриц и с 271,5 с до 187 с для факторизации симметричных неопределенных разреженных матриц при использовании Intel MKL библиотек BLAS/LAPACK).

Распараллеливание ряда других функций не приводит к столь очевидному успеху. В частности, практически не ускоряется решение систем линейных уравнений после факторизации разреженных матриц, что объясняется значительно меньшим количеством затрачиваемых операций, чем при факторизации. Далее, при сборке матриц инерции и жесткости диспетчер задач показывает, что периодически оказываются практически полностью загружены все ядра мультиядерного процессора, однако ощутимого уменьшения временных затрат не происходит.

Далее возник вопрос: какова степень влияния в вычислительном процессе распараллеленных версий пакетов CHOLMOD/MA57 и распараллеленных версий пакетов BLAS/LAPACK.

Как показывает тестирование время выполнения распараллеленных версий пакетов CHOLMOD/MA57 совместно с последовательной версией IMKL несколько меньше времени выполнения последовательных версий указанных пакетов совместно с последовательной версией пакета IMKL. Это означает, что распараллеливающий компилятор без каких-либо дополнительных предположений способен распараллелить выполнение весьма небольшого количества циклов. С другой стороны, это объясняется тем, что пакеты CHOLMOD/MA57 изначально создавались так, чтобы в наибольшей степени использовать оптимизированные функции BLAS/LAPACK.

Следовательно, для распараллеливания на основе многопоточности решающее значение имеет использование оптимальных версий базовых библиотек линейной алгебры BLAS/LAPACK.

Пакет Intel MKL достаточно стабильно работает на процессорах AMD, однако может не обеспечить требуемый уровень производительности. При тестировании в качестве BLAS/LAPACK также использовались последовательные либо параллельные версии библиотек AMD Core Math Library (ACML) 4.4.0, рекомендованные для использования на процессорах

AMD Athlon 64 X2 с поддержкой набора машинных команд SSE3 (совместно с последовательными либо параллельными версиями CHOLMOD/MA57).

Как показывает тестирование, использование библиотек ACML также позволяет не менее эффективно сокращать затраты машинного времени на факторизацию разреженных матриц за счет использования многопоточности, а также обеспечивает более высокую производительность на процессорах AMD. Некоторое ускорение решения систем линейных уравнений после факторизации разреженных симметричных положительно определенных матриц означает, что критичным является качество распараллеливания отдельных функций BLAS/LAPACK.

Результаты тестирования производительности факторизации разреженных матриц на самой крупной (наименее подробной) сетке, выполненные на компьютере с процессором AMD Athlon 64 X2, с использованием в качестве BLAS/LAPACK Intel MKL, не вызывают столь очевидного ускорения вычислительного процесса, как в ранее рассмотренном случае с самой подробной сеткой на процессоре Intel Core2 Duo. Переход к многопоточным версиям программ на меньших сетках приводит к менее очевидному ускорению вычислительного процесса.

Заключение. Итак, можно сделать следующие выводы:

1. При конечно-элементном моделировании наиболее затратной с точки зрения машинного времени является типовая операция факторизации конечно-элементных матриц.
2. Современные компиляторы, поддерживающие стандарт OpenMP, позволяют автоматически распараллелить вычисления с использованием многопоточности, однако это может слабо влиять на производительность.
3. Наиболее существенный эффект от распараллеливания на основе многопоточности связан с использованием пакетов факторизации разреженных матриц CHOLMOD/MA57 совместно с многопоточными версиями математических библиотек BLAS/LAPACK.

4. Наибольший эффект распараллеливания на основе многопоточности наблюдается на процессорах с разделенной кэш-памятью.

Список использованных источников.

1. Чапман Б., Джост Б., Ван де Пас Р. OpenMP: Портативная общая память для параллельного программирования. – Лондон: Гамбридж, 2008. – 353 с.

2. Шпаковский Г. И., Серикова Н. В. Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI. – Минск: БГУ, 2002. – 323 с.

3. Воеводин В. В., Воеводин В. В. Параллельные вычисления – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 599 с.

4. Гаранжа В. А., Голиков А. И., Евтушенко Ю. Г, Нгуен М. Х. Параллельная реализация метода Ньютона для решения больших задач линейного программирования. // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2009. №8. Стр. 1369-1384.

5. Дэвис, Тимоти А. Прямые методы для разреженных линейных систем. – SIAM, 2006. – 217 с.

6. Лурье А. И. Теория упругости. – М.: Наука, 1987. – 368с.

7. Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т.1. – М.: Наука, 1976. – 536с.

8. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. – М.: Мир, 1988. – 352с.

9. Галлагер Р. Метод конечных элементов. Основы. – М.: Мир, 1984. – 428с.

10. Зенкевич О. К. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 541с.

11. Зенкевич О. К., Тейлор Р. Л. Метод конечных элементов для твердого тела и структурной механики. – Лондон: Эльзевир, 2005. – 631с.

12. OpenFEM. A finite Element Toolbox for MATLAB and Scilab [Электронный ресурс]. URL: www.openfem.net (дата обращения 11.01.2016 г.). Загл. с экр. яз. англ.

13. Столарски Т., Наказоне Е., Ешимото С. Инженерный анализ с помощью программного комплекса ANSYS – Лондон: Эльзевир, 2006. – 456 с.
14. Калиткин Н. Н. Численные методы. – М.: Наука, 2005. – 224 с.
15. Лехоук Л. Б., Соренсен Д. С., Янг К. ARPACK. Руководство для пользователей: решение больших задач на собственные значения методом Арнольди. – Лондон: Эльзевир – 1997. – 140 с.
16. Davis T.A. User Guide for CHOLMOD: a sparse Cholesky factorization and modification package. Ver. 1.7. – Dept. of Computer and Information Science and Engineering Univ. of Florida [Электронный ресурс]. URL: www.cise.ufl.edu/research/sparse (дата обращения 12.01.2016 г.). Загл. с экр. яз. англ.
17. HSL Package Specification. MA57 [Электронный ресурс]. URL: <http://hsl.rl.ac.uk> (дата обращения 18.03.2016 г.). Загл. с экр. яз. англ.
18. Калужских А.Н. К вопросу о технической диагностике запорной арматуры магистрального газопровода// Материалы Научно-технического совета ОАО «ГАЗПРОМ». Москва, 2005. С. 25-45.
19. Мостовой А.В. Состояние запорно-регулирующей арматуры ООО «Пермтрансгаз» при повышении устойчивости магистральных трубопроводов// Материалы Научно-технического совета ОАО «ГАЗПРОМ». Москва, 2005. С. 90-95.
20. Гольденвейзер А.Л., Лидский В.Б., Товстик П.Е. Свободные колебания тонких упругих оболочек. М.: Наука, 1979.
21. Intel Math Kernel Library for the Windows OS User Guide [Электронный ресурс]. URL: <http://developer.intel.com> (дата обращения 18.03.2016 г.). Загл. с экр. яз. англ.