

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра математического обеспечения вычислительных комплексов и
информационных систем

**ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПРИ
РЕАЛИЗАЦИИ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА
КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 441 группы
направления 02.03.03 Математическое обеспечение и администрирование
информационных систем
факультета компьютерных наук и информационных технологий
Балабанова Георгия Игоревича

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., доцент

Д.К.Андрейченко

_____ (подпись, дата)

Зав. кафедрой:

к.ф.-м.н.

Д.К.Андрейченко

_____ подпись, дата

Саратов 2017

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. В настоящее время наблюдается повышенный интерес к распараллеливанию вычислений при решении задач математической физики на современных высокопроизводительных вычислительных системах, в частности, при конечно-элементном моделировании задач математической физики. Вместе с тем, не изучен полностью вопрос о возможности распараллеливания типовых вычислительных операций, выполняемых в процессе работы современных программных комплексов конечно-элементного моделирования.

Конечно, не любая задача может быть эффективно перенесена на многоядерный процессор, однако существует класс задач, для которых такой подход дает существенный выигрыш в скорости. Например, хорошо распараллеливаются задачи линейной алгебры с плотно заполненными матрицами достаточно большой размерности.

Хорошо известно, что именно операция факторизации разреженных матриц большой размерности является наиболее трудоемкой типовой операцией конечно-элементного моделирования [1]. В частности, эффективность факторизации разреженных симметричных положительно определенных матриц определяет эффективность компьютерного моделирования при решении задач о концентрации внутренних напряжений и о поиске спектра собственных частот и форм колебаний упругих конструкций, моделируемых на основе аппарата краевых и начально-краевых задач для уравнений в частных производных. Отметим, что именно на кластерных системах с распределенной памятью в наибольшей мере проявляются преимущества современных параллельных версий программных средств конечно-элементного моделирования, как коммерческих (ANSYS [2] и т.д.), так и свободно распространяемых (Elmer и т.д.). В большинстве ситуаций именно выбор соответствующих алгоритмов и реализующих их параллельных библиотек факторизации разреженных

матриц определяют эффективность конечно-элементного моделирования. Следует отметить достаточно ограниченное количество стандартных библиотек факторизации разреженных матриц, использующих технологию параллельных вычислений MPI [3, 4, 5] и предназначенных для эксплуатации на кластерных системах. Наиболее распространенными из них являются PARDISO (коммерческое программное обеспечение) и MUMPS (свободно распространяемый программный продукт).

С учетом данных особенностей разработки программного обеспечения для конечно-элементного моделирования, ранее в ПРЦНИТ СГУ была разработана оптимизированная для кластерных систем с распределенной памятью параллельная редакция конечно-элементного решателя Elmer. В частности, при ее эксплуатации обеспечивались должный уровень производительности и масштабирование вычислительного процесса при решении стационарных задач механики деформируемого твердого тела. Однако в настоящий момент программно-аппаратная конфигурация кластерных систем СГУ претерпела серьезные изменения. Остается вопрос, будет ли достигаться должный уровень масштабирования вычислительного процесса при обновленной конфигурации кластера, а также при реализации других классов задач математической физики.

Цель бакалаврской работы. Целями данной работы являются: разработка параллельной редакции конечно-элементного решателя ELMER, оптимизированной для актуальной программно-аппаратной конфигурации кластера ПРЦНИТ, а также исследование ее возможностей для решения более широкого класса задач математической физики.

Для достижения данных целей требуется решить следующие задачи:

1) Сборка базовой версии конечно-элементного решателя Elmer для ОС Linux x86_64 с использованием компиляторов GNU и неоптимизированных версий пакетов LAPACK и ReferenceBLAS.

2) Сборка базовой параллельной на основе MPICH версии конечно-элементного решателя Elmer для ОС Linux x86_64 с использованием

компиляторов GNU и неоптимизированных версий пакетов LAPACK и ReferenceBLAS.

3) Сборка оптимизированной кластерной редакции конечно-элементного решателя Elmer на основе Intel MPI для ОС Linux x86_64 с использованием компиляторов Intel C++/Fortran и математических функций библиотек поддержки высокопроизводительных вычислений Intel MKL.

4) Подготовка конечно-элементных сеток в генераторе конечно-элементных сеток GMSH.

5) Подготовка проектов и файлов задания для конечно-элементного решателя Elmer для запуска последовательных и параллельных версий на кластере; решение тестовых задач о концентрации напряжений в вилке карданного вала и о нахождении её собственных частот колебаний с целью проверки корректности работы конечно-элементного решателя.

6) Исследование эффективности базовой, базовой параллельной и оптимизированной под кластер версий конечно-элементного решателя ELMER.

Методологические основы. Методологической основой бакалаврской работы стали труды отечественных и зарубежных ученых. В их число входят: Андрейченко Д.К., Ирматов П.В., Ирматова М.С., Щербаков М.Г. [1], Гергель, В.П. [3], Флетчер К. [6], Lehouck R.B., Sorensen D.C., Yang C. [7], Седов Л.И. [10], Галлагер Р. [11], Калиткин Н. Н. [14], Davis T.A. [16], George K. [25].

Практическая значимость бакалаврской работы. Была создана оптимизированная для кластерных систем СГУ редакция конечно-элементного решателя Elmer с интегрированными библиотеками поддержки высокопроизводительных вычислений BLAS/LAPACK, ScaLAPACK из состава Intel MKL и пакетом факторизации разреженных матриц MUMPS; выполнено тестирование эффективности распараллеливания вычислений при решении модельных задач о концентрации внутренних напряжений в

упругих конструкциях сложной формы и о поиске спектра их собственных частот и форм колебаний.

Структура и объём работы. Бакалаврская работа состоит из введения, из трех разделов, посвященных: основам математического моделирования в динамике упруго деформируемых тел при помощи метода конечных элементов; основным возможностям, конфигурированию и сборки конечно-элементного решателя Elmer; исследованию эффективности конечно-элементного решателя на кластерных системах. Также в работу включены заключение, список использованных источников и четыре приложения. Общий объем работы – 66 страниц, из них 43 страницы – основное содержание, включая 6 рисунков, 5 таблиц, список использованных источников информации – 25 наименований.

В теоретической части использовались источники с 1 по 16, для реализации практической части использовались источники с 16 по 25.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первый раздел «Основы математического моделирования в динамике упруго деформируемых тел при помощи метода конечных элементов» посвящен основам математического моделирования в динамике упруго деформируемых тел, содержит информацию о библиотеках, влияющих на эффективность конечно-элементного моделирования, описание тестовой задачи о концентрации напряжений в вилке карданного вала и о спектре ее собственных частот колебаний. Раздел состоит из нескольких подразделов.

В подразделе «Уравнения малых колебаний твердого деформируемого тела» содержится вывод связи малых деформаций индивидуальных частиц среды с упругими смещениями, связь внутренних напряжений с компонентами поверхностных сил на произвольно расположенных площадках, вывод уравнений Ламе и задание для них граничных и начальных условий.

Подраздел «Дискретизация модельных начально-краевых задач на основе метода конечных элементов» содержит описание дискретизации уравнений движения сплошной среды при помощи проекционного метода Бубнова-Галёркина [6] в форме метода возможных перемещений Эйлера-Лагранжа.

Подразделы «Матрица инерции» и «Матрица жесткости» состоят из вывода уравнений получения элементов матриц инерции и жесткости конечно-элементными решателями.

Подраздел «Моделирование концентрации внутренних напряжений в равновесном состоянии упругих конструкций сложного очертания» содержит описание задачи о концентрации внутренних напряжений. Так же, в подразделе представлена формула для расчета эквивалентных напряжений.

Подраздел «Собственные частоты и формы колебаний упруго деформируемых тел» содержит описание задачи о нахождении собственных частот колебаний, представлен вывод векторного уравнения Гельмгольца, и показан дальнейший переход дискретного аналога краевой задачи Гельмгольца к обыкновенным дифференциальным уравнениям.

В подразделе «Итерационные методы решения частичной проблемы на собственные значения» приводится итерационный метод, как метод решения частичной задачи на собственные значения. В качестве модификации итерационного метода приведен метод метод Ланцоша-Арнольди [7], который на основании ортогонализации Грама-Шмидта элементов последовательности позволяет найти несколько наибольших собственных частот.

В подразделе «Библиотеки поддержки высокопроизводительных вычислений, влияющие на эффективность конечно-элементного моделирования» приведены наиболее времязатратные операции конечно-элементного моделирования и библиотеки влияющие на эффективность этих операций.

Подраздел «Ресурсы параллелизма при конечно-элементном моделировании» содержит описание возможностей распараллеливания

вычислений при конечно-элементном моделировании.

Подраздел «Тестовые задачи о концентрации напряжений в вилке карданного вала и о спектре ее собственных частот колебаний» содержит описание модели вилки карданного вала для решения тестовых задач о концентрации внутренних напряжений и о спектре ее собственных частот колебаний, так же приведен рисунок модели.

Второй раздел «Основные возможности, конфигурирование и сборка конечно-элементного решателя Elmer» посвящен основным возможностям конечно-элементного решателя Elmer, описанию трех версий решателя, генерации конечно-элементных сеток, подготовки сеток для работы с ElmerGUI и генерации файлов задания.

Пакет Elmer обеспечивает конечно-элементное моделирование задач математической физики для широкого круга предметных областей. Высокое качество численного моделирования обеспечивается поддержкой обширного набора стандартных конечных элементов.

Были собраны три версии конечно-элементного решателя Elmer:

1) Базовая с использованием стандартных библиотек BLAS/LAPACK и компиляторов GNU C++/Fortran для ОС Linux x86_64.

2) Параллельная базовая на основе MPICH с использованием стандартных библиотек BLAS/LAPACK и компиляторов GNU C++/Fortran для ОС Linux x86_64.

3) Оптимизированная на основе Intel MPI с использованием компиляторов Intel C++/Fortran и математических функций библиотек поддержки высокопроизводительных вычислений Intel MKL. В качестве решателя была собрана оптимизированная под кластер редакция пакета MUMPS 5.1.1 с поддержкой PARMETIS 4.0.3, и пакетов BLACS и ScaLAPACK из состава Intel MKL. Отметим, что, из-за особенностей новой версии Elmer, скрипты сборки и компиляции которого теперь используют CMake [8], потребовалось модифицировать модуль поиска библиотеки MUMPS и модуль отвечающий за поддержку MPI.

Третий раздел «Исследование эффективности конечно-элементного решателя на кластерных системах» посвящен описанию оптимизированной кластерной редакции конечно-элементного решателя, проверке ее корректности, и исследованию эффективности распараллеливания вычислений на кластере СГУ.

В подразделе «Проверка корректности конечно-элементного решателя» в таблице были приведены первые 5 частот собственных колебаний упругой конструкции, данные подтверждают сходимость численного алгоритма и стабильную работу конечно-элементного решателя Elmer.

Была представлена визуализация в ElmerGUI результатов численного моделирования о концентрации внутренних напряжений в вилке карданного вала. Характер распределения внутренних напряжений и характерная величина напряжений в зоне концентрации хорошо согласуются с опытными и теоретическими данными.

В подразделе «Исследование эффективности распараллеливания вычислений на кластере СГУ» приводились типовые характеристики узлов кластера СГУ, после чего были представлены результаты времени выполнения вычислений (в секундах) для менее и более подробных сеток при расчете внутренних напряжений и нахождении собственных частот. На основании представленных результатов была показана высокая эффективность оптимизированной редакции конечно-элементного решателя и должный уровень масштабирования вычислительного процесса по используемым процессам.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Была создана оптимизированная для кластерных систем СГУ редакция конечно-элементного решателя Elmer с интегрированными библиотеками поддержки высокопроизводительных вычислений BLAS/LAPACK, ScaLAPACK из состава Intel MKL и пакетом факторизации разреженных матриц MUMPS, для чего потребовалось существенно переработать и изменить скрипты компиляции и сборки пакета в кросс-платформенной системе CMake [8].

Выполнено тестирование эффективности распараллеливания вычислений при решении модельных задач о концентрации внутренних напряжений в упругих конструкциях сложной формы и о поиске спектра их собственных частот и форм колебаний.

По результатам решения тестовых задач показана стабильность разработанной редакции конечно-элементного решателя при его эксплуатации на кластерных системах ПРЦНИТ. Также установлено, что наиболее трудоемкой операцией конечно-элементного моделирования является факторизация разреженных матриц.

Показана высокая эффективность оптимизированной редакции конечно-элементного решателя с интегрированными библиотеками поддержки высокопроизводительных вычислений при ее эксплуатации на кластере ПРЦНИТ. В частности, при этом обеспечивается должный уровень масштабирования вычислительного процесса по используемым процессорам.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Андрейченко Д.К., Ирматов П.В., Ирматова М.С., Щербаков М.Г. О реализации конечно-элементного моделирования в задачах остеосинтеза на кластерных системах СГУ – Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. 2010. Т. 10. Сер. Математика. Механика. Информатика. Вып. 3. С. 77-85.
2. Stolarsky T., Nakasone Y., Yoshimoto S. Engineering Analysis with ANSYS Software. – Elsevier: London-New-York – 2006. – 456 p.
3. Гергель, В.П. Теория и практика параллельных вычислений/В. П. Гергель. М.: Интернет-Ун-т Информ. Технологий: БИНОМ. Лаб. знаний, 2007, 2010. - 424 с.
4. MPI: A Message-Parsing Interface Standard 3.1. June 4, 2015. [Электронный ресурс]: документ. URL:<http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-3.1/mpi31-report.pdf> (дата обращения: 12.05.2017).
5. Шпаковский, Г.И. Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI/ Г.И. Шпаковский, Н.В. Серикова. Минск: Изд-во БГУ, 2002. 323 с. ISBN 985-445-727-3.
6. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. – М.: Мир, 1988. – 352с.
7. Lehouck R.B., Sorensen D.C., Yang C. ARPACK Users' Guide: Solution of Large Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi methods. [Электронный ресурс]: документ. URL:<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/UG/> (дата обращения: 17.04.2017).
8. About CMake. [Электронный ресурс]: сайт. URL: <https://cmake.org/overview/> (дата обращения: 20.05.2017).
9. Лурье А.И. Теория упругости. – М.: Наука, 1987. – 368с.
10. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.1. – М.: Наука, 1976. – 536с.
11. Галлагер Р. Метод конечных элементов. Основы. – М.: Мир, 1984. – 428с.

12. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 541с.
13. Zienkewicz O.C., Taylor R.L. The Finite Element Method for Solid and Structural Mechanics. – Elsevier, 2005. – 631с.
14. Калиткин Н. Н. Численные методы. – М.: Наука, 2005. – 224 с.
15. Intel Math Kernel Library 11.3 for Linux Developer Guide. [Электронный ресурс]: документ. URL: https://software.intel.com/sites/default/files/managed/df/1e/mkl_11.3_lnx_userguide.pdf (дата обращения: 19.04.2017). - 70с.
16. Davis T.A. UMFPACK User Guide v.5.7.6. – Dept. of Computer and Information Science and Engineering Univ. of Florida, 4 May 2016. – 139 с.
17. MUltifrontal Massively Parallel Solver (MUMPS 5.1.1) User Guide. [Электронный ресурс]: документ. URL:http://mumps.enseeiht.fr/doc/userguide_5.1.1.pdf (дата обращения: 23.04.2017). – 46 с.
18. Elmer Models Manual, Peter Raback, Mika Malinen, Juha Ruokolainen, Antti Pursula, Thomas Zwinger, Eds, CSC – IT Center for Science. [Электронный ресурс]: документ. URL:<http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerModelsManual.pdf> (дата обращения: 26.04.2017).
19. Elmer Solver Manual. – CSC – IT Center for Science. [Электронный ресурс]: документ. URL:<http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerSolverManual.pdf> (дата обращения: 26.04.2017). – 107 с.
20. Gmsh Reference Manual. The documentation for Gmsh 2.12. A finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities 6 March 2016. [Электронный ресурс]: документ. URL:<http://gmsh.info/doc/texinfo/gmsh.pdf> (дата обращения: 28.04.2017).

21. ElmerGrid Manual, Peter Raback, CSC – IT Center for Science, Oct 30, 2015.
[Электронный ресурс]: документ.
URL:<http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerGridManual.pdf>
(дата обращения: 03.05.2017).
22. Elmer GUI Tutorials, CSC – IT Center for Science, March 15, 2016.
[Электронный ресурс]: документ.
URL:<http://www.nic.funet.fi/pub/sci/physics/elmer/doc/ElmerTutorials.pdf>
(дата обращения: 05.05.2017).
23. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. – М.: Мир, 1984. – 334 с.
24. Энергоэффективные кластерные и облачные вычисления и технологии. Практикум. / Андрейченко Д.К., Батраева И.А., Наркайтис Г.Г., Ерофтиев А.А., Портенко М.С., Шахрай Д.А., Мельничук Д.В., Афанасьев Г.М. - Под ред. А.Г. Федоровой и В.С. Харченко. – Харьков: Национальный аэрокосмический университет имени Н.Е. Жуковского «ХАИ». - 2016. - 199с.
25. George K. METIS: A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices v.5.1.0, 30 March, 2013. – 4с.