

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра математического обеспечения вычислительных
комплексов и информационных систем

**РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ
КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ**

студента 4 курса 441 группы
направления 02.03.03 Математическое обеспечение и администрирование
информационных систем
факультета компьютерных наук и информационных технологий
Агапова Сергея Леонидовича

Научный руководитель:

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

подпись, дата

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н. _____ Андрейченко Д.К.

подпись, дата

Саратов 2019

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы.

Программные комплексы, предназначенные для конечно-элементного моделирования в задачах математической физики (ANSYS, NASTRAN и т.д.), составляют неотъемлемую часть компьютерной индустрии, 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. Стандартная технология MPI [1] наиболее эффективна на кластерных системах с распределенной памятью. Используемая в данной работе стандартная технология OpenMP [2,3] основана на многопоточности современных операционных систем и наиболее эффективна при использовании на современных симметричных мультипроцессорных системах с общей памятью, к которым относится наибольшая доля серийным образом выпускаемых в настоящее время ноутбуков, рабочих станций и высокопроизводительных серверов.

Современный программный комплекс конечно-элементного моделирования включает в свой состав следующие компоненты: 1) препроцессор, генерирующий конечно-элементную сетку по трёхмерной геометрической модели; 2) «решатель» (Solver), выполняющий численное решение задачи математической физики на основе проекционного метода Галёркина; 3) постпроцессор, выполняющий визуализацию полученных результатов. Наиболее требователен к ресурсам вычислительной системы именно конечно-элементный «решатель» (Solver), а наибольшие затраты времени связаны с выполняющимися в нем типовыми операциями. В качестве конечно-элементного «решателя» в данной работе используется свободно распространяемый пакет OpenFEM совместно с пакетом MATLAB2019a для Windows x64, а в качестве препроцессора – свободно распространяемый пакет GMSH версии 4.3.0 для ОС Windows.

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 (UMFPACK, CHOLMOD, IMKL DSS) используют для этого блочные (Supernodal) алгоритмы исключения элементов [4,5], однако форматы хранения разреженных матриц отличны от используемого в MATLAB формата. Для того чтобы сократить затраты оперативной памяти при реализации конечно-элементного моделирования, используются специальные функции – «переходники», разработанные на основе MATLAB External Interfaces API, которые обеспечивают прямой вызов функций пакетов факторизации разреженных матриц непосредственно из скриптов MATLAB.

Цель бакалаврской работы – Выяснение наиболее затратных по времени выполняемых в конечно-элементном «решателе» типовых операций и возможности их распараллеливания.

Поставленная цель определила **следующие задачи**:

1. Изучение основ метода конечных элементов (МКЭ).
2. Разработка интерфейсов, позволяющих вызывать функции пакетов факторизации разреженных матриц CHOLMOD и IMKL DSS непосредственно из скриптов системы матричных вычислений MATLAB;
3. Применительно к операциям МКЭ, сравнение эффективности:
 - факторизации симметричных положительно определенных разреженных матриц средствами CHOLMOD и IMKL DSS;
 - распараллеливания вычислений на основе многопоточности;
 - влияния алгоритма Кариписа-Кумара разделения графов (METIS) на эффективность факторизации разреженных матриц.

Методологические основы распараллеливания вычислений при реализации конечно-элементного моделирования представлены в работах Davis, Timothy A., Флетчер К., Галлагер Р., Зенкевич О.

Теоретическая и/или практическая значимость бакалаврской работы. В настоящий момент отсутствуют исчерпывающие сведения о возможности распараллеливания типовых операций конечно-элементного моделирования и их оптимизации на основе тех или иных библиотек поддержки высокопроизводительных вычислений, как коммерческих, так и свободно распространяемых. В данной работе выясняются наиболее затратные по времени выполняемые в конечно-элементном «решателе» типовые операции и возможности их распараллеливания. А также сравнение эффективности факторизации симметричных положительно определенных конечно-элементных матриц свободно распространяемым пакетом CHOLMOD и коммерческим пакетом IMKL DSS.

Структура и объём работы. Бакалаврская работа состоит из введения, 3 разделов, заключения, списка использованных источников и 1 приложения. Общий объем работы – 51 страница, из них 42 страницы – основное содержание, включая 11 рисунков и 7 таблиц, список использованных источников информации – 21 наименование.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первый раздел «Математическое моделирование в динамике упруго деформируемых сред и метод конечных элементов» посвящен модельным начально-краевым задачам динамики упругих сред и рассмотрен метод конечных элементов для их решения, на основе которого задача поиска собственных частот колебаний упругих конструкций сводится к решению обобщенной задачи на собственные значения для пары симметричных разреженных матриц достаточно большой размерности. Рассмотрен итерационный алгоритм нахождения собственных значений, метод вложенных сечений для факторизации разреженных матриц, и

показана возможность его распараллеливания. Приведены сведения об основных библиотеках поддержки высокопроизводительных вычислений, влияющих на эффективность конечно-элементного моделирования.

В первом разделе «Математическое моделирование в динамике упруго деформируемых сред и метод конечных элементов» приведены модельные начально-краевые задачи динамики упругих сред и рассмотрен метод конечных элементов для их решения, на основе которого задача поиска собственных частот колебаний упругих конструкций сводится к решению обобщенной задачи на собственные значения для пары симметричных разреженных матриц достаточно большой размерности. Рассмотрен итерационный алгоритм нахождения собственных значений, метод вложенных сечений для факторизации разреженных матриц, и показана возможность его распараллеливания. Приведены сведения об основных библиотеках поддержки высокопроизводительных вычислений, влияющих на эффективность конечно-элементного моделирования.

Второй раздел «Сборка и проверка корректности работы последовательных и параллельных версий конечно-элементного решателя» посвящен сборке последовательных и параллельных версий конечно-элементного решателя OpenFEM, Нахождению собственных частот упругой конструкции и генерации конечно-элементных сеток.

В качестве собственно конечно-элементного решателя использовался свободно распространяемый пакет OpenFEM совместно с широко распространенным пакетом матричных вычислений MATLAB2019a для ОС Windows x64. Компиляция и сборка последовательных и параллельных версий бинарных модулей пакета OpenFEM выполнялась при помощи компиляторов Microsoft Visual C++ 2017 и Intel C++2019 для Windows x64. В качестве библиотек BLAS и LAPACK использовались последовательная и многопоточная версии традиционной для на платформы Windows x64 библиотеки поддержки высокопроизводительных вычислений Intel Math

Kernel Library (IMKL), поставляемой вместе с компиляторами Intel. Далее, при помощи компилятора Intel C++ x64 были скомпилированы и собраны последовательные и параллельные версии пакета CHOLMOD, после чего были заменены входящие в состав MATLAB соответствующие динамически загружаемые библиотеки.

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

При выполнении данной работы были разработаны MEX-функции на языке C++ и соответствующие скрипты MATLAB, позволяющие вызывать функции IMKL DSS непосредственно из интерпретатора MATLAB.

В качестве упругой конструкции была выбрана вилка карданного вала.

В качестве конечно-элементного препроцессора использовался свободно распространяемый генератор конечно-элементных сеток GMSH-4.3.0. Генерировались 6 конечно-элементные сетки, состоящие из т.н. «неполных» тетраэдров второго порядка, характерный размер элементов которых уменьшался с каждой последующей сеткой.

Были выбраны две наиболее подробные из используемых конечно-элементных сеток: менее подробная с примерно 253000 степеней свободы и с первой собственной частота: 1109.7 Гц, и более подробная с 686000 степеней свободы и с первой собственной частотой: 1108.7 Гц для данной упругой конструкции. Стабильную работу конечно-элементного решателя подтверждает то, что различия в собственных частотах в четвертом знаке.

Третий раздел «Исследование эффективности распараллеливания вычислений на основе многопоточности» посвящен описанию тестов эффективности распараллеливания конечно-элементных вычислений на основе многопоточности, времени выполнения типовых операций и оптимизации факторизации разреженных матриц.

Тестирование производительности при распараллеливании конечно-элементных вычислений проводилось на компьютере с четырехъядерным процессором Intel i7 3610 QM X4 с тактовой частотой 2300 МГц (работающая на частоте процессора кэш-память уровня 4 по 512 КБ на ядро) и 16 ГБ оперативной памяти DDRIII-1600.

При дальнейшем тестировании производительности использовалась самая подробная из сгенерированных ранее конечно-элементных сеток (686004 степеней свободы). В качестве теста рассматривалась задача о нахождении 10 наименьших собственных частот.

Также были перечислены функции переходники из стандартной функция MATLAB, для которых замерялось время выполнения.

Результаты тестирования полностью последовательной версии с библиотекой CHOLMOD показывают, что наиболее затратной типовой операцией при конечно-элементном моделировании является операция факторизации разреженных матриц. Так, для сетки с 252684 степенями свободы, факторизация симметричных положительно определенных разреженных матриц занимает примерно 37 с, а для сетки с 686004 степенями свободы факторизация симметричных положительно определенных разреженных матриц занимает примерно 383 с. Из чего следует, что с ростом числа степеней свободы конечно-элементной модели наиболее трудоемкой операцией становится факторизация разреженных матриц. Именно ее требуется оптимизировать, в частности, на основе распараллеливания вычислений.

Из сравнения тестирования последовательных и многопоточных версий отчетливо видно, что распараллеливание на основе технологии

OpenMP значительно снижает затраты времени именно на факторизацию разреженных матриц (в среднем со 37 с до 14 с для факторизации симметричных положительно определенных разреженных матриц сетки с 252684 степенями свободы и с 383 с до 124 с для факторизации симметричных положительно определенных разреженных матриц сетки с 686004 степенями свободы).

Также при переходе к многопоточным версиям слегка ускоряется решение систем линейных уравнений после факторизации. Не ускоряются итерационный алгоритм нахождения собственных значений и операция вставки элементов в разреженные матрицы из-за внутренних ограничений MATLAB. Немного замедляется вычисление фрагментов матриц инерции и жесткости в пределах отдельных конечных элементов из-за малой трудоемкости.

Во всех рассмотренных случаях операция факторизации разреженных матриц успешно распараллеливается. При этом с ростом числа степеней свободы свободно распространяемый пакет CHOLMOD, сконфигурированный совместно со свободно распространяемым пакетом METIS, превосходит по производительности коммерческий пакет Intel MKL.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы:

1. При конечно-элементном моделировании наиболее затратной с точки зрения машинного времени является типовая операция факторизации конечно-элементных матриц.
2. Наиболее существенный эффект от распараллеливания на основе много-поточности связан с операцией факторизации разреженных матриц совместно с многопоточными версиями математических библиотек BLAS/LAPACK.
3. При факторизации Холецкого симметричных положительно определенных конечно-элементных матриц свободно распространяемый пакет CHOLMOD, сконфигурированный совместно со свободно распространяемым пакетом METIS, оказывается не менее эффективен, чем «разреженный» решатель СЛАУ из состава коммерческих библиотек Intel MKL.

Основные источники информации:

1. Эстербю О., Златев З. Прямые методы для разреженных матриц. – М.: Мир, 1987. – 120 с.
2. Davis, Timothy A. Direct methods for sparse linear systems. – SIAM, 2006. – 217 p.
3. Лурье А.И. Теория упругости. – М.: Наука, 1987. – 368с.
4. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.1. – М.: Наука, 1976. – 536с.
5. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. – М.: Мир, 1988. – 352с.
6. Галлагер Р. Метод конечных элементов. Основы. – М.: Мир, 1984. – 428с.
7. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975. – 541с.
8. OpenFEM. A finite Element Toolbox for MATLAB and Scilab. www.openfem.net. – 2008. – 207 p.
9. Калиткин Н. Н. Численные методы. – М.: Наука, 2005. – 224 с.