

РЕАЛИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ПРОЧНОСТНОМ ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ ABAQUS

С.А. Рыжов

Параллельные вычисления становятся сегодня основополагающим фактором, как в развитии архитектуры современных компьютеров, так и в создании нового или адаптации существующего программного обеспечения. Бурное развитие вычислительной техники, кластерные технологии, многоядерность, появление суперкомпьютеров, обладающих рекордной производительностью, порождают потребность в параллельном программном обеспечении для решения практических задач на новом уровне. Это важно не только для высокотехнологических отраслей промышленности, но и для научных организаций, ВУЗов, для любого предприятия.

Данная тенденция получила практическую реализацию в прочностном программном комплексе ABAQUS – универсальной конечно-элементной программе общего назначения, предназначенной для проведения прочностного инженерного анализа. При этом ABAQUS может использоваться, как предприятиями различных отраслей, так и в научно-исследовательских и учебных целях.

С помощью ABAQUS можно проводить анализ таких сложных проблем как расчет прочности турбомашин, расчет двигательных установок, шасси и трансмиссий, производство шин, сварка, анализ аварийных столкновений (краш-тесты), тесты на падение, сверхпластичное формование, пробивание материала, расчет композиционных структур, литье металлов, контактное взаимодействие большого числа тел и самоконтакт, сейсмические воздействия, взрывные воздействия, расчет надежности ядерных реакторов, расчет прочности электронных компонент.

ABAQUS изначально ориентировался на решение самых сложных и ответственных задач, с учетом всех видов нелинейностей, а также проведения статического и динамического анализа в рамках единого алгоритма. Такой подход выгодно отличает ABAQUS от других программ подобного уровня, что позволяет с помощью ABAQUS в рамках единого подхода решать многоцелевые задачи, сочетая преимущества явной и неявной схем конечно-элементного анализа и их комбинацию.

Одной из важнейших особенностей программного комплекса ABAQUS является его универсальность. Данный пакет может использоваться на всех этапах проектирования и создания современных изделий и практически всеми расчетными, проектными и технологическими службами предприятия.

Необходимо отметить надежность программного комплекса ABAQUS. Строгий контроль над сходимостью исследуемых процессов, автоматический выбор шага интегрирования, мониторинг задачи на всех этапах расчета, многочисленные функции контроля.

Структура ABAQUS построена по модульному принципу и включает в себя неявный решатель ABAQUS/Standard, явный решатель ABAQUS/Explicit, пре-постпроцессор ABAQUS/CAE и интерфейсы для связи с CAD пакетами и другими программами. Пре-постпроцессор предназначен для импортирования или создания геометрии, для задания свойств материалов, начальных и граничных условий, типа нагружения, шагов анализа, генерации или импорта расчетной сетки и задания критериев сходимости. После выполнения действий в пре-постпроцессоре управление передается одному из решателей, который начинает процесс счета. В процессе счета пользователь имеет возможность визуализировать значение любой переменной в расчетной области инструментами постпроцессора и следить за процессом развития решения. Возможность динамической визуализации в процессе счета значительно облегчает анализ получаемых результатов. При достижении критерия сходимости процесс счета может быть остановлен. После этого результат становится доступен для всех инструментов постпроцессора, в котором производится обработка данных - визуализация результатов с последующим сохранением во внешние форматы данных.

ABAQUS исповедует открытый подход к решению сложных проблем и предоставляет неограниченные возможности по подключению пользовательских программ на всех этапах расчета конкретной задачи.

Все перечисленные возможности ABAQUS в полной мере раскрываются при использовании многопроцессорных вычислительных систем. Параллельные вычисления реализованы с использованием двух схем – нитей (threads) и обмена сообщениями, для которой в качестве коммуникационной библиотеки используется интерфейс MPI. На компьютерах с общей памятью вычисления могут проводиться с использованием этих двух схем, при этом, по умолчанию, MPI используется для всех процедур анализа, где это возможно. На компьютерах с распределенной памятью реализована схема с использованием технологии MPI. Список машин или хостов и число процессоров, используемых на каждом хосте, задаются в файле настройки системы ABAQUS.

Эффективность использования параллельных вычислений в ABAQUS зависит от типа решаемой задачи и решателя, который при этом применяется.

Так использование ABAQUS/Standard для нелинейного анализа характеризуется двумя факторами – размером задачи и числом итераций необходимых для решения. При возрастании размера задачи возрастают затраты как по памяти, так и по времени расчета на одну итерацию, что требует значительных вычислительных ресурсов. Затраты на одну итерацию распределяются между затратами на вычисления с элементами и временем решения системы линейных уравнений. При увеличении размера задачи время, затрачиваемое на решение систем линейных уравнений, становится определяющим.

При использовании прямого решателя линейных уравнений в ABAQUS/Standard используется большое число операций типа «BLAS3», поэтому его эффективное применение возможно на машинах с хорошей реализацией операции умножения матрицы на матрицу.

При решении задачи на собственные значения (решатель Ланцоша) в ABAQUS/Standard для задач большой размерности время счета существенно зависит от управления временными данными, которые пишутся на жесткий диск. По этой причине производительность дисков является в данном случае важной составляющей в общей производительности.

Эффективное распараллеливание в ABAQUS/Standard возрастает с увеличением размерности задачи. Так задачи до 100 000 неизвестных будут иметь незначительную масштабируемость, а для задач с 2 000 000 неизвестных масштабируемость эффективна с использованием машин до 16 ядер.

Распараллеливание в ABAQUS/Explicit представлено в виде двух уровней – уровень областей и уровень циклов. Уровень областей разбивает модель на топологические области, которые равномерно распределяются среди имеющихся процессоров. На этом уровне поддерживается две схемы распараллеливания (нити и MPI). Этот подход принят в ABAQUS/Explicit по умолчанию. Уровень циклов это распараллеливание циклов низкого уровня, которые требуют значительных вычислительных затрат, такие, например, как операции с элементами, узлами, контактная пара и т.п.

Задачи, решаемые в ABAQUS/Explicit, характеризуются большим числом очень быстрых приращений. Производительность ABAQUS/Explicit определяется комбинацией производительности операций с плавающей запятой и скоростью доступа к памяти.

Масштабируемость ABAQUS/Explicit, как правило, очень хорошая, но, как и в ABAQUS/Standard, для этого требуется некоторое минимальное число неизвестных, приходящихся на одно ядро. Рекомендуется использовать не менее 5000 неизвестных на ядро. Свыше этого числа неизвестных масштабирование определяется требованиями балансировки между узлами вычислительной системы.

Следует также отметить требование в ABAQUS/Explicit к оперативной памяти на один узел для проведения эффективных параллельных вычислений больших задач:

1. Задача с 5 миллионами неизвестных требуется более одного расчетного узла с 8 Гб оперативной памяти на узле;
2. Задача с 10 миллионами неизвестных требуется либо 8 расчетных узлов с 8 Гб оперативной памяти на узле, либо 4 расчетных узлов с 16 Гб оперативной памяти на узле;
3. Задача свыше 10 миллионов неизвестных требуется 16 Гб оперативной памяти на узле;
4. Задача свыше 25 миллионов неизвестных требуется 32 Гб оперативной памяти на узле.

ABAQUS является масштабируемым программным обеспечением, работоспособным на однопроцессорных и многопроцессорных вычислительных системах, используя один и тот же код. Это обеспечивается минимизацией влияния всех узких мест: времени стартовой инициализации, несбалансированности загрузки процессоров, последовательных частей кода, коммуникационных затрат. Примеры расчетов подтверждают эффективность ABAQUS при моделировании сложных инженерных практических задач на многопроцессорных вычислительных системах.

ЛИТЕРАТУРА:

1. ABAQUS User manual, 2007