

Сергій ГОМЕНЮК

Запорізький національний університет

<https://orcid.org/0000-0001-7340-5947>e-mail: gserega71@gmail.com

Владислав КОЗУБ

Луганський національний університет імені Тараса Шевченка

<https://orcid.org/0000-0003-2710-7206>e-mail: v.y.kozub@gmail.com

ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ПАРАЛЕЛЬНИХ ОБЧИСЛЕНЬ В ПАКЕТІ ПРИКЛАДНИХ ПРОГРАМ «MIRELA+»

У статті досліджуються підходи до оптимізації розрахунків конструкцій, що потребують всебічного аналізу процесів деформування під дією експлуатаційних навантажень. Для розв'язання таких задач зазвичай використовується метод скінченних елементів. Моделювання конструкцій з урахуванням концентраторів напружень потребує використання розрахункових сіток великих розмірів. В реальних умовах експлуатації більшість елементів конструкцій знаходяться під дією механічних і теплових навантажень. Пакет прикладних програм «MIRELA+» призначений для розв'язування задач термопружності конструкцій із слабкоствисливих еластомерів та композитів з еластомерною матрицею. Одним з етапів розв'язування задач термопружності є формування матриць жорсткості з урахуванням слабкої стисливості та теплопровідності скінченних елементів. При формуванні матриць жорсткості та теплопровідності виникає необхідність проводити інтегрування по області скінченного елемента. Для елементів одного типу використовуються обчислення за однаковою процедурою і кількість таких обчислень зумовлює час розв'язування задачі. У традиційному підході ці обчислення виконуються послідовно. У випадку великих розмірів сіток кількість та час розрахунків збільшуються, що потребує оптимізації обчислень з використанням алгоритмів паралельних обчислень. За допомогою бібліотеки OpenMP побудовано паралельний алгоритм формування матриці розв'язувальних рівнянь. До паралельної області алгоритму включені обчислення доданків згідно квадратурної схеми. Заповнення матриці жорсткості скінченного елемента відбувається в послідовній області. Час виконання паралельних обчислень визначається найповільнішою підзадачею. Використання моментної схеми скінченних елементів переміщення і деформації апроксимуються однаковими поліномами, що спрощує обчислення інтегралів. Розроблено алгоритми паралельного програмування для побудови розв'язувальних рівнянь пакету програм «MIRELA+». Отримано розв'язки для розрахункових сіток різних розмірів. Досліджено вплив паралелізації на час розрахунку.

Ключові слова: скінченний елемент, паралельні обчислення, OpenMP, матриця жорсткості, матриця теплопровідності.

Serhii HOMENIUK

Zaporizhzhia National University

Vladyslav KOZUB

Luhansk Taras Shevchenko National University

FEATURES OF THE USE OF PARALLEL CALCULATIONS IN THE PACKAGE OF APPLICATION PROGRAMS «MIRELA+»

The article examines approaches to the optimization of structural calculations, which require a comprehensive analysis of deformation processes under the action of operational loads. The finite element method is usually used to solve such problems. Modeling of structures taking into account stress concentrators requires the use of large-sized calculation grids. In real operating conditions, most structural elements are under the influence of mechanical and thermal loads. The package of application programs «MIRELA+» is intended for solving problems of thermoelasticity of structures made of weakly compressible elastomers and composites with an elastomeric matrix. One of the stages of solving problems of thermoelasticity is the formation of stiffness matrices taking into account weak compressibility and thermal conductivity of finite elements. When forming the stiffness and thermal conductivity matrices, it is necessary to perform integration over the area of the finite element. For elements of the same type, calculations are used according to the same procedure, and the number of such calculations determines the time to solve the problem. In the traditional approach, these calculations are performed sequentially. In the case of large grid sizes, the number and time of calculations increase, which requires optimization of calculations using parallel calculation algorithms. Using the OpenMP library, a parallel algorithm for forming the matrix of solving equations was built. The calculation of terms according to the quadrature scheme is included in the parallel area of the algorithm. Filling of the stiffness matrix of the finite element takes place in the sequential region. The execution time of parallel calculations is determined by the slowest subtask. Using the moment scheme of finite elements, displacement and deformation are approximated by the same polynomials, which simplifies the calculation of integrals. Parallel programming algorithms for constructing solving equations of the "MIRELA+" program package have been developed. Solutions for calculation grids of different sizes have been obtained. The effect of parallelization on the calculation time was studied.

Keywords: finite element, parallel computing, OpenMP, stiffness matrix, thermal conductivity matrix.

Постановка проблеми у загальному вигляді та її зв'язок із важливими науковими чи практичними завданнями

Проектування сучасних конструкцій в будівництві, машинобудуванні, авіакосмічній галузі потребують надійних методів розрахунку. Найбільш поширеним методом є метод скінченних елементів, який дозволяє моделювати конструкції складної форми. Для побудови розрахункових моделей конструкцій з отворами, розрізами та іншими концентраторами напружень зазвичай використовуються великорозмірні сітки скінченних елементів, що веде до виконання дуже великого обсягу обчислень. За традиційною схемою

побудова розрахункових рівнянь проводиться послідовно і, в такому випадку, на кожному етапі виконуються процедури за однаковою схемою. Використання обчислювальних станцій з декількома процесорами, процесорів з декількома ядрами або комп'ютерних мереж дозволяє виконувати однотипні обчислення паралельно. Тому актуальною задачею є розробка паралельних алгоритмів для методу скінченних елементів.

Аналіз останніх досліджень і публікацій

Для методу скінченних елементів можна виділити три етапи розв'язування задачі: формування вхідних даних з нанесенням розрахункової сітки; формування матриць системи рівнянь і розв'язування системи рівнянь; процедура виведення результатів. У випадку лінійної задачі процес формування матриць розв'язувальних рівнянь та рішення системи алгебраїчних рівнянь складає основні затрати часу. Прискорення виконання цих етапів дозволить зменшити затрати машинного часу. Більшість існуючих пакетів прикладних програм методу скінченних елементів створені за послідовною схемою. Паралелізація обчислювальних процесів для вже існуючої архітектури коду являється нетривіальною задачею [1].

Одним з напрямів оптимізації обчислювальних процесів являється використання гібридних алгоритмів паралелізації процедур розв'язування систем рівнянь з урахуванням симетричності та розрідженості матриць [2]. Використання ітераційних методів розв'язування систем рівнянь також допускає можливість використання паралельних обчислень [3].

Ефективність методу можна також підвищити використовуючи гібридні паралельні схеми методу скінченних елементів з використанням підходів зі спільною та роздільною пам'яттю декількох комп'ютерів [4, 5]. Використання декомпозиції розрахункової області також допускає можливість розділення на окремі задачі, розв'язання яких можна розділити на незалежні потоки [6, 7]. Однак в цьому випадку необхідно забезпечити передумовленість розбиття на підобласті.

Для прискорення процедур використовуються підходи розпаралелювання обчислень між процесором та графічним прискорювачем [8, 9]. Використання апроксимаційних поліномів спеціального виду дозволяє дещо спростити розв'язувальні співвідношення і разом з тим спростити паралелізацію обчислень [10].

Виділення невирішених раніше частин загальної проблеми, котрим присвячується стаття.

Незважаючи на достатню велику кількість досліджень у напрямку паралелізації скінченно-елементних обчислень можна відмітити, що майже відсутні роботи присвячені процедурі формування матриць розрахункових систем рівнянь. Розробка та використання паралельних алгоритмів при формуванні розв'язувальних рівнянь методу скінченних елементів потребують подальших досліджень.

Формулювання цілей статті

Метою статті є розробка методики паралельних обчислень розрахункових матриць скінченних елементів для задач термомеханіки твердих тіл на основі пакету прикладних програм «МІРЕЛА+».

Виклад основного матеріалу. Пакет прикладних програм «МІРЕЛА+» використовується для розв'язання задач механіки еластомерів, які проявляють гіперпружні властивості [12]. В умовах циклічних навантажень еластомерним конструкціям притаманні термов'язкопружні властивості [13]. Процеси деформування таких конструкцій супроводжуються тепловими ефектами. Тому при побудові математичної моделі таких тіл використовуються співвідношення теорії пружності і рівняння теплопровідності.

Для підвищення точності розв'язків, усунення ефекту «хибного» зсуву, врахування слабкої стисливості матеріалу використовується моментна схема скінченних елементів [13,14]. Апроксимація переміщень, деформацій та функції змінення об'єму здійснюється за допомогою степеневих функцій $\psi^{(pqr)} = (x_1^p x_2^q x_3^r) / (p!q!r!)$, для яких виконується співвідношення $\partial^{(\alpha+\beta+\gamma)} \psi^{(pqr)} = \psi^{(p-\alpha, q-\beta, r-\gamma)}$:

$$u_k = \omega_k^T \psi, \quad \varepsilon_{ij} = \mathbf{e}_{ij}^T \psi, \quad \theta = \xi \psi, \quad (1)$$

де між компонентами розкладання переміщень, деформацій і функції змінення об'єму встановлюється достатньо простий зв'язок [13] у вигляді матриць відповідності **A**. Варіація енергії пружної деформації має вигляд:

$$\delta W = \delta \mathbf{u}^T \mathbf{A}_{ij}^T \mathbf{E}^{ijkl} \mathbf{A}_{kl} \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}^T \mathbf{A}_{\theta}^T \mathbf{E}^{\theta} \mathbf{A}_{kl} \mathbf{u}, \quad (2)$$

$$\mathbf{E}^{ijkl} = \iiint_V \psi_{(ij)} 2\mu g^{ik} g^{jl} \psi_{kl}^T \sqrt{g} dv, \quad (3)$$

$$\mathbf{E}^{\theta} = \iiint_V \psi_{(\theta)} \lambda g^{ij} \psi_{(\theta)}^T \sqrt{g} dv, \quad (4)$$

де **u** – вектор вузлових переміщень; μ, λ – коефіцієнти Ляме; g – метричний тензор.

Аналогічно температура тіла представляється у вигляді розкладання за степеневими функціями:

$$T = \gamma^T \psi. \quad (5)$$

З варіаційного рівняння теплопровідності визначається матриця теплопровідності:

$$\mathbf{H} = \iiint_V \mathbf{B} \boldsymbol{\Psi}_i \lambda_{ij} \boldsymbol{\Psi}_j^T \mathbf{B}^T \sqrt{g} dv, \quad (6)$$

де \mathbf{B} – матриця перетворення розкладення температури по об'єму тіла за вузловими значеннями.

Процедура побудови матриць (3), (4), (6) пов'язана з чисельним інтегруванням по області скінченного елемента за квадратурою Гауса-Лежандра. Для обчислення компонентів матриці теплопровідності необхідно виконати наступні кроки:

- обчислення компонентів тензора переходу від глобальної системи координат до локальної;
- обчислення якобіана перетворень;
- обчислення похідних степеневих функцій у вузлах інтегрування;
- обчислення суми доданків за квадратурною схемою.

Для прискорення обчислень три перших пункти можна виконати паралельно. Останній пункт необхідно виконувати в послідовній області.

За аналогічною схемою розпаралелюються обчислення для матриці жорсткості та матриці змінення об'єму.

Оскільки при побудові матриць спільно використовуються масиви даних, то для паралельного обчислення використано бібліотеку OpenMP. Вона доступна для широкого спектру архітектури процесорів, підтримує мультиплатформне програмування спільної пам'яті на мовах програмування C, C++ і Fortran. Бібліотека OpenMP складається з набору директив компілятора, підпрограм бібліотеки та змінних середовища, які впливають на поведінку під час виконання.

Програмування в OpenMP полягає у використанні так званих паралельних конструкцій (директив компілятора), які вставляються у вихідний код, інструктуючи компілятор генерувати певний код. OpenMP визначає різні конструкції, що дозволяють розпаралелювати послідовний код і синхронізувати окремі потоки.

Запропоновані підходи до застосування паралельних обчислень використано при розв'язуванні задачі термопружності композитного параболічного обтічника під дією стаціонарного нерівномірного теплового потоку.

Досліджено залежність часу формування матриць системи рівнянь від кількості розрахункових вузлів.

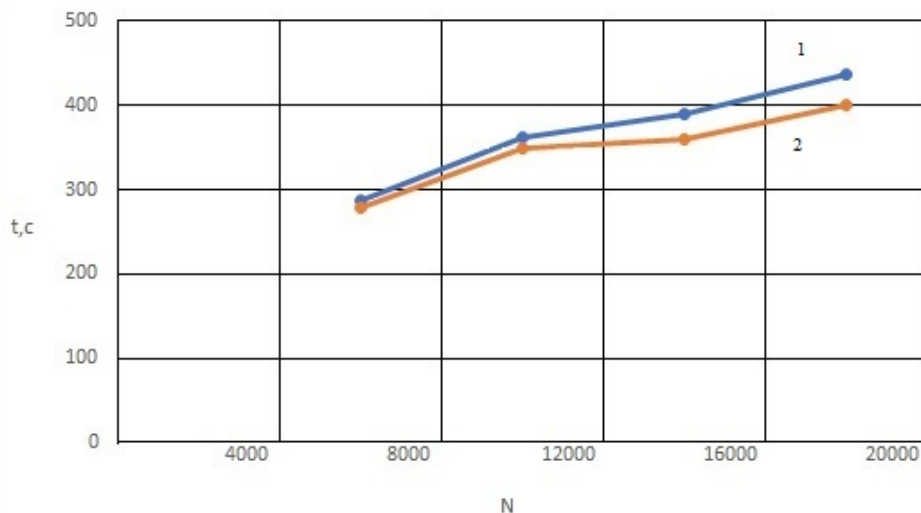


Рис. 2. Час розв'язку для різної кількості вузлів: 1 – традиційна схема; 2 – схема з паралельними обчисленнями.

Для розрахунку використано обчислювальний комплекс «МІРЕЛА+» із застосуванням паралельних обчислень матриць скінченного елемента. Тестування виконувалось на пристрої з Intel i7-9750H (6 ядер та 12 потоків) та 16 ГБ RAM.

Висновки з даного дослідження і перспективи подальших розвідок у даному напрямі

Розроблена методика формування матриць жорсткості та теплопровідності на основі використання паралельних обчислень інтегральних квадратурних складників дозволяє оптимізувати обчислення і більш ефективно використовувати можливості процесора, прискорити процес розв'язування задач механіки конструкцій. Використання паралельних обчислень в пакеті прикладних програм «МІРЕЛА+» дозволяє скоротити час рішення на 6-7% в залежності від розмірів розрахункової сітки. При збільшенні розрахункової сітки відносне скорочення часу розв'язання збільшується. Паралельні алгоритми зі спільною пам'яттю мають перспективу подальшого впровадження в методі суперелементів.

Література

1. Jarzebski P. On parallelization of the loop over elements in FEAP / P. Jarzebski, K. Wisniewski, R. L. Taylor // *Computijnal Mechanics*, – 2015. – 56. – P. 77–86.
2. Ju S.H. An Out-of-Core Eigen-Solver with OpenMP Parallel Scheme for Large Spare Damped System [Електронний ресурс] / S.H. Ju, H.H. Hsu // *Int. J.Computational Methods* – 2019. – Vol. 16. No 7. – Режим доступу : <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0219876219500385>.
3. Жданов А.И. Об одной вычислительной реализации блочного метода Гаусса-Зейделя / А.И. Жданов, Е.Ю. Богданова // *Вестн. Сам.гос. тех.ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*. – 2016. – Т.20, №4. – С. 730 – 738.
4. Leonardo Nunes da Silva. Performance of hybrid openMP/MPI parallel programming application of finite element method [Електронний ресурс] / Leonardo Nunes da Silva, Flávia Romano Villa Verde, Gerson Henrique Pfitscher // *Proc. COBEM 2007 19th International Congress of Mechanical Engineering*, – November 5-9, 2007. – Режим доступу : <https://www.abcm.org.br/anais/cobem/2007/pdf/COBEM2007-1463.pdf>
5. Yamaguchi T. Performance Evaluation of 3-D Hybrid Parallel Finite Element Method by MPI/OpenMP / T. Yamaguchi, Y. Kawase, A. Nagase, S. Ishimura // *J. Japan Society of Applied Electromagnetics and Mechanics*. – 2019. – Vol.27. No.1. – P.85-90.
6. Wozniak M. Comparison of multi-frontal and alternating direction parallel hybrid memory iGRM direct solver for non-stationary simulations / M. Wozniak, A. Bukowska // *Computer Science*. – 2020. – 21(4). – P. 419-439.
7. Bošanský M. Parallelization of assembly operation in finite element method / M. Bošanský, B. Patzák // *Acta Polytechnica*. – 2020. – 60(1). – P.25–37.
8. Amorim L. GPU Finite Element Method Computation Strategy Without Mesh Coloring / L. Amorim, T. Goveia, R. Mesquita, I. Baratta // *J. Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications*. – 2020. – Vol. 19. No.2. – P. 252-264.
9. Atallah A.M., Younes A.B. Parallel Evaluation of Chebyshev Approximations :Applications in Astrodynamics / A.M. Atallah, A.B. Younes // *J. Astro-nautical Science*. – 2022. – Vol. 69. – P. 692–717.
10. Utpal Kiran. GPU-warp based finite element matrices generation and assembly using coloring method / Utpal Kiran, Deepak Sharma, Sachin Singh Gautam // *Journal of Computation Design and Engineering*, – 2019. – No 6. – P. 705-718.
11. Atallah A.M. Parallel Evaluation of Chebyshev Approximations / A.M. Atallah., A.B. Younes // *Applications in Astrodynamics J. Astro-nautical Science*. – 2022. – Vol. 69. – Pp. 692–717.
12. Suchocki C. On Finite Element Implementation of Polyconvex Incompressible Hyperelasticity / C. Suchocki, S. Jemioło // *Theory, Coding and Applications, International Journal of Computational Methods*. – vol. 17, no 8. – 2020. – P. 1-10.
13. Метод конечных элементов в вычислительном комплексе «МИРЕЛА+» / В.В. Киричевский, Б.М. Дохняк, Ю.Г. Козуб и др. ; под общ. ред. В.В. Киричевского. – К.: Наук. думка. – 2005. – 403 с.
14. Bazhenov V.A. Thermoelasticity of elastomeric constructions with initial stresses / V.A. Bazhenov, Yu.G. Kozub, I.I. Solodei // *Strength of Materials and Theory of Structures*. – 2020. – Issue 104. – P. 299 – 308.

References

1. Jarzebski P. On parallelization of the loop over elements in FEAP / P. Jarzebski, K. Wisniewski, R. L. Taylor // *Computijnal Mechanics*, – 2015. – 56. – P. 77–86.
2. Ju S.H. An Out-of-Core Eigen-Solver with OpenMP Parallel Scheme for Large Spare Damped System [Elektronnij resurs] / S.H. Ju, H.H. Hsu // *Int. J.Computational Methods* – 2019. – Vol. 16. No. 7. – Rezhim dostupu : <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0219876219500385>.
3. Zhdanov A.I. Ob odnoj vychislitelnoj realizacii blochnogo metoda Gaussa-Zejdelya / A.I. Zhdanov, E.Yu. Bogdanova // *Vestn. Sam.gos. teh.un-ta. Ser. Fiz.-mat. nauki*. – 2016. – Т.20, №4. – С. 730 – 738.
4. Leonardo Nunes da Silva. Performance of hybrid openMP/MPI parallel programming application of finite element method [Elektronnij resurs] / Leonardo Nunes da Silva, Flavia Romano Villa Verde, Gerson Henrique Pfitscher // *Proc. COBEM 2007 19th International Congress of Mechanical Engineering*, – November 5-9, 2007. – Rezhim dostupu : <https://www.abcm.org.br/anais/cobem/2007/pdf/COBEM2007-1463.pdf>.
5. Yamaguchi T. Performance Evaluation of 3-D Hybrid Parallel Finite Element Method by MPI/OpenMP / T. Yamaguchi, Y. Kawase, A. Nagase, S. Ishimura // *J. Japan Society of Applied Electromagnetics and Mechanics*. – 2019. – Vol.27. No 1. – P.85-90.
6. Wozniak M. Comparison of multi-frontal and alternating direction parallel hybrid memory iGRM direct solver for non-stationary simulations / M. Wozniak, A. Bukowska // *Computer Science*. – 2020. – 21(4). – P. 419-439.
7. Bosansky M. Parallelization of assembly operation in finite element method / M. Bosansky, B. Patzak // *Acta Polytechnica*. – 2020. – 60(1). – P.25–37.
8. Amorim L. GPU Finite Element Method Computation Strategy Without Mesh Coloring / L. Amorim, T. Goveia, R. Mesquita, I. Baratta // *J. Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications*. – 2020. – Vol. 19. No 2. – P. 252-264.
9. Atallah A.M., Younes A.B. Parallel Evaluation of Chebyshev Approximations :Applications in Astrodynamics / A.M. Atallah, A.B. Younes // *J. Astro-nautical Science*. – 2022. – Vol. 69. – P. 692–717.
10. Utpal Kiran. GPU-warp based finite element matrices generation and assembly using coloring method / Utpal Kiran, Deepak Sharma, Sachin Singh Gautam // *Journal of Computation Design and Engineering*, – 2019. – No 6.– P. 705-718.
11. Atallah A.M. Parallel Evaluation of Chebyshev Approximations / A.M. Atallah., A.B. Younes // *Applications in Astrodynamics J. Astro-nautical Science*. – 2022. – Vol. 69. – P. 692–717.

-
12. Suchocki C. On Finite Element Implementation of Polyconvex Incompressible Hyperelasticity / C. Suchocki, S. Jemioło // *Theory, Coding and Applications, International Journal of Computational Methods*. – Vol. 17, no 8. – 2020. – P. 1-10.
 13. Metod konechnykh elementov v vychislitel'nom komplekse «MIRELA+» / V.V. Kirichevskij, B.M. Dohnyak, Yu.G. Kozub i dr. ; pod obsh. red. V.V. Kirichevskogo. – K.: Nauk. dumka. – 2005. – 403s.
 14. Bazhenov V.A. Thermoelasticity of elastomeric constructions with initial stresses / V.A. Bazhenov, Yu.G. Kozub, I.I. Solodei // *Strength of Materials and Theory of Structures*. – 2020. – Issue 104. – P. 299 – 308.