О параллельном решении СЛАУ задач моделирования трехмерных гармонических электромагнитных полей в частотной области*

Д.С. Бутюгин
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Рассматривается задача моделирования гармонических электромагнитных полей с использованием метода конечных элементов (МКЭ). Построена параллельная версия итерационного алгоритма COCG, а также FGMRES и спектрально-эквивалентного алгебраического мультисеточного предобуславливателя (AMG). В качестве предобуславливателя для COCG и оператора сглаживания для предобуславливателя AMG используется разработанный параллельный SSOR. Представлены результаты экспериментов для набора модельных и практических задач, демонстрирующие эффективность и масштабируемость представленных алгоритмов.

Постановка задачи

Система уравнений Максвелла для электромагнитного поля $\vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}})e^{i\omega t}$, $\vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}})e^{i\omega t}$ с гармонической зависимостью от времени может быть преобразована к уравнению Гельмгольца [1, 2]:

$$\nabla \times \mu_r^{-1} \nabla \times \vec{\mathbf{E}} - k_0^2 \dot{\varepsilon}_r \vec{\mathbf{E}} = -ik_0 Z_0 \vec{J}, \qquad (1)$$

при $\rho = 0$, где $\dot{\varepsilon} = \varepsilon_r \varepsilon_0 - i\sigma^e/\omega$, $k_0 = \omega\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$. Решение ищется в трехмерной области Ω с границей $\Gamma = S_0 \bigcup S_1$. Задаются граничные условия волнового входа либо металлической стенки на $S_0 : \vec{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}}_0$ и условия идеального магнитного проводника на $S_1 : \vec{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{H}} = 0$. Здесь и далее под $\vec{\mathbf{n}}$ понимается вектор внешней нормали относительно грани. Условия согласования на внутренних границах описываются следующими уравнениями:

$$\vec{\mathbf{n}} \cdot \left(\dot{\varepsilon}_1 \vec{\mathbf{E}}_1 - \dot{\varepsilon}_2 \vec{\mathbf{E}}_2 \right) = 0, \quad \vec{\mathbf{n}} \times \left(\vec{\mathbf{E}}_1 - \vec{\mathbf{E}}_2 \right) = 0,$$
$$\vec{\mathbf{n}} \cdot \left(\dot{\mu}_1 \vec{\mathbf{H}}_1 - \dot{\mu}_2 \vec{\mathbf{H}}_2 \right) = 0, \quad \vec{\mathbf{n}} \times \left(\vec{\mathbf{H}}_1 - \vec{\mathbf{H}}_2 \right) = 0.$$

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 08-01-00526).

Аппроксимация

В случае аппроксимации МКЭ комплексное уравнение Гельмгольца (1) может быть переписано в вариационной постановке [3]: найти $\vec{E} \in H_{\Gamma}^{rot}$, для которого выполнено

$$\int_{\Omega}\left[\mu_r^{-1}\left(\nabla\times\vec{\mathbf{E}}\right)\cdot\left(\nabla\times\vec{\psi}\right)-k_0^2\dot{\varepsilon}_r\left(\vec{\mathbf{E}}\cdot\vec{\psi}\right)\right]d\Omega=-ik_0Z_0\int_{\Omega}\vec{J}\cdot\vec{\psi},\quad\forall\vec{\psi}\in H_0^{rot},$$

дискретный аналог которой после введения матрицы жесткости и масс

$$S_{i,j}=\int_{\Omega}\mu_r^{-1}\left(\nabla\times\vec{\psi}_j\right)\cdot\left(\nabla\times\vec{\psi}_i\right)d\Omega,\qquad M_{i,j}=\int_{\Omega}\dot{\varepsilon}_r\vec{\psi}_j\cdot\vec{\psi}_i d\Omega$$

выглядит следующим образом:

$$\left[S-k_0^2M\right]u=f,$$

где ψ_j – реберные базисные функции 3-го порядка, предложенные в [4]. Данные уравнения записываются для функций ψ_j, равных 0 на S_0, для остальных коэффициенты вычисляются из условия минимизации отклонения поля на границе S_0. При этом матрица системы уравнений может быть собрана на основе поэлементной технологии [5, 6].

Численные методы

Полученная система уравнений решалась при помощи итерационных методов в подпространствах Крылова COCG с предобуславливателем SSOR и FGMRES с алгебраическим мультисеточным предобуславливателем (AMG) [7].

Алгебраический мультисеточный предобуславливатель основан на использовании иерархических базисных функций [4]. В этом случае матрица системы для порядка функций *k* имеет вид

$$A_k=\begin{bmatrix}A_{k-1} & \cdots\\ \vdots & \ddots\end{bmatrix}.$$

Тогда переход к системе пониженного порядка осуществляется тривиальным образом. В качестве оператора сглаживания [7] для AMG выбрана также итерация SSOR (с учетом $A=L+D+L^T$):

$$u\leftarrow(D+\omega L)^{-1}\left[(2-\omega)D-(D+\omega L^T)\right]u+\omega f,$$

$$u\leftarrow(D+\omega L^T)^{-1}\left[(2-\omega)D-(D+\omega L)\right]u+\omega f.$$

Можно отметить, что данный предобуславливатель оказывается спектрально-эквивалентным [8].

На первом уровне используется прямой решатель PARDISO из библиотеки Intel® MKL [9]. Данный решатель является параллельным, включая этап решения СЛАУ. Параллелизация итерационных решателей для машин с общей памятью выполнена следующим образом. Решатели COCG и FGMRES используют векторно-векторные операции BLAS уровня 1 – dot, axpy и scale. Данные операции параллелизуются путем распределения элементов $1,\ldots,N$ между потоками, где N – порядок системы. Аналогично распараллеливается операция умножения матрицы на вектор, однако между потоками распределяются строки матрицы. Стоит отметить, что распределение переменных и строк матрицы лучше осуществлять статически для повышения эффективности работы решателя на NUMA-архитектурах.

Наибольшую сложность представляет распараллеливание итерации SSOR, поскольку SSOR требует решения треугольных систем вида. В этом случае имеются зависимости по данным. Для снятия этой проблемы для каждого неизвестного $i \in [1,\ldots,N]$ при решении верхнетреугольной системы вычисляется уровень

$$l_i = 1 + \max_{j>i:\ U_{i,j}\neq 0} l_j.$$

После этого вычисление всех неизвестных, принадлежащих одному уровню, можно производить независимо и распределить эти неизвестные между потоками. Распараллеливание решения нижнетреугольных систем выполняется аналогично.

Тестовые задачи

В качестве одного из тестов рассматривалась модельная задача с расчетной областью в виде волновода с линейными размерами a = 72, b = 34, c = 200 мм. На грани z = 200 задавалось условие $S_0 : \vec{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}}_0$, на остальной части границы расчетной области задавалось условие $S_1 : \vec{\mathbf{n}} \times \vec{\mathbf{E}} = 0$. Были заданы следующие параметры:

$\mu_r = 1$, $\varepsilon_r = 2 - 0.1$, $\omega = 2\pi \cdot 3 \cdot 10^9$, $\vec{\mathbf{E}}_0 = \vec{\mathbf{e}}_y \sin(\pi x/a)$.

Аналитическое решение: $\vec{\mathbf{E}}_0 = \vec{\mathbf{e}}_y \sin(\pi x/a) \dfrac{\sin(\gamma z)}{\sin(\gamma c)}$.

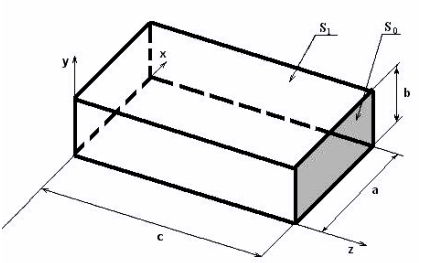

Рис. 1. Расчетная область для тестовых задач

Расчетная область делилась на параллелепипеды, каждый из которых, в свою очередь, разбивался на 6 тетраэдров. Использовались следующие разбиения: 4x2x10, 8x4x20, 15x7x40, 29x14x80, 48x23x134 по осям x, y и z соответственно. Аппроксимация проводилась базисными функциями 3-го порядка.

Таблица 1. Сравнение решателей на модельной задаче, 1 поток

Сетка	*N*	δE	COCG		FGMRES+AMG			PARDISO
			n	*t*, с	n_3	n_2	*t*, с	*t*, с
1	7500	2.1E-3	114	1.35e+0	12	37	7.89e–1	3.45e–1
2	65424	2.8E-4	174	3.66E+1	11	26	1.04e+1	1.09e+1
3	445701	4.3E-5	291	4.68E+2	11	23	9.02e+1	3.38e+2
4	3524883	5.6E-6	604	8.52E+3	11	23	8.54e+2	---
5	16198533	1.2E-6	---	---	11	23	7.21e+3	---

Таблица 2. Масштабируемость решателей на модельной задаче, сетка 15x7x40

Решатель	Количество потоков					
	1	2	4	8	16	32
COCG	1.00	1.50	2.71	4.37	6.71	8.48
FGMRES	1.00	1.37	2.22	3.46	4.70	5.34
PARDISO	1.00	1.86	3.57	6.26	10.2	13.5

Критерием останова итерационного процесса служило условие $\left\|\vec{\mathbf{f}} - \mathbf{A}\vec{\mathbf{u}}_n\right\| < \varepsilon \left\|\vec{\mathbf{f}}\right\|$, $\varepsilon = 10^{-7}$. Алгебраический мультисеточный предобуславливатель обращался приближенно с $\varepsilon = 0.2$. В табл. 1 приведена относительная ошибка δE полученных численных решений с аналитическими решениями, количество итераций *n* и время работы *t* в секундах для соответствующих методов. Также приведены количество

внешних n_3 и суммарное количество внутренних итераций в предобуславливателе n_2 для метода FGMRES. В табл. 2 показана масштабируемость решателей с ростом числа потоков. Тестирование производилось в системе Intel Xeon X7560, 2.27 ГГц, 4 сокета по 8 ядер, объем оперативной памяти – 64 Гб.

Второй рассматриваемый тест – задача электромагнитного каротажа, предоставленная Ю.Г. Соловейчиком. Имеется среда с горизонтальным слоем и вертикальная скважина, в которую вставлен измерительный прибор. Прибор представляет собой трубку с 3 петлями – 1 генераторная при z = 0.5 и 2 приемных при z = 0.1 и z=0.0. В скважине имеется цилиндрическая каверна, заполненная веществом. Смещение от центра скважины до центра прибора – 0.064, радиус скважины – 0.108, радиус прибора – 0.043, толщина каверны – 0.01 (радиус 0.108 – 0.118), координаты каверны по z: (– 0.0725,0.0725), координаты слоя по z: (– 0.425, – 0.275). Вся расчетная область представляет собой куб со стороной 10. Все размеры указаны в метрах. Проводимости сред: прибор – 0 См, скважина и каверна – 5 См, среда – 0.1 См, слой – 0.05 См. Во всей области $\mu_r = 1$, $\varepsilon_r = 1$.

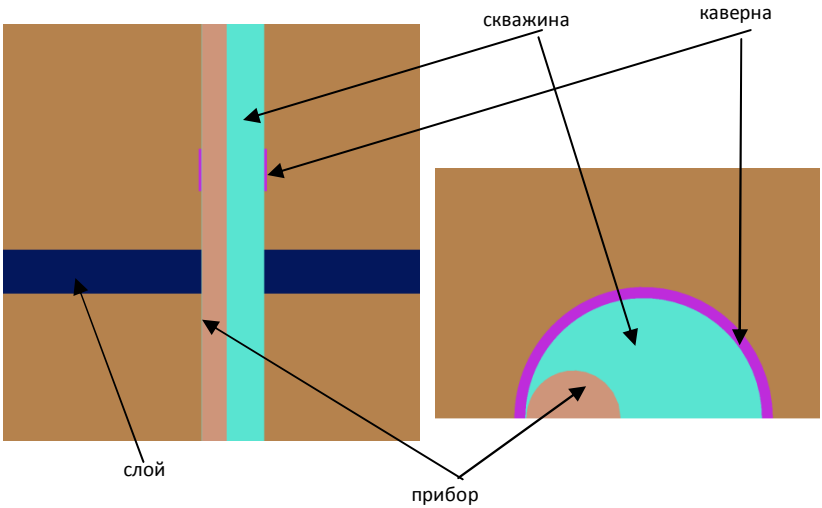

Рис. 2. Расчетная область для второй тестовой задачи

Генерация неравномерной сетки проводилась при помощи утилиты NETGEN [10]. Число тетраэдров в результирующей сетке было равно 388836, порядок системы после аппроксимации – 7058679. Число внешних n_3 и внутренних n_2 итераций в решателе FGMRES было равно

17 и 41 соответственно. Как видно, число итераций увеличилось несущественно по сравнению с модельной задачей. В то же время решатель COCG не показал сходимости в пределах 2000 итераций. Полученная разность фаз ЭДС в петлях приемника совпала с результатом группы НГТУ, полученным методом выделения поля источника, с точностью 1.8%. В табл. 3 представлены результаты тестирования решателя FGMRES на различном числе потоков.

Таблица 3. Время работы и масштабируемость FGMRES для задачи электромагнитного каротажа

Количество потоков	1	2	4	8	16	32
Время работы	5.41e3	2.94e3	1.58e3	9.73e2	6.16e2	4.85e2
Масштабируемость	1.00	1.84	3.42	5.56	8.78	11.2

Выводы

В работе получены следующие результаты. Представлен параллельный SMP решатель FGMRES с алгебраическим мультисеточным предобуславливателем, использующим итерации SSOR в качестве оператора сглаживания. Достигнута масштабируемость 5–10 раз на 32 потоках на методических и практических задачах. С помощью решателя решена задача электромагнитного каротажа.

Литература

1. **Григорьев А.Д., Янкевич В.Б**. Резонаторы и резонаторные замедляющие системы СВЧ. – М.: Радио и связь, 1984.
2. **Bossavit A.** Computational Electromagnetism. – N.Y.: Academ Press, 1987.
3. **Monk P.** Finite element methods for Maxwell's equations. – Oxford: University Press, 2003.
4. **Ingelström P**. A new set of H(curl)-conforming hierarchical basis functions for tetrahedral meshes // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2006. – Vol. 54, № 1. – P. 106–114.
5. **Ильин В.П.** Методы и технологии конечных элементов.– Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2007.
6. **Соловейчик Ю.Г., Рояк М.Э., Персова М.Г.** Метод конечных элементов для решения скалярных и векторных задач. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007.
7. **Saad Y.** Iterative Method for Sparse Linear Systems, Second Edition, SIAM, 2003.
8. **Hu J.J., Tuminaro R.S., Bochev P.B. et al.** Toward an h-independent algebraic multigrid method for Maxwell's equations //

SIAM Journal on Scientific Computing. – 2005. – Vol. 27, № 5. – P. 1669–1688.
9. http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl/ – Math Kernel Library from Intel.
10. **Schöberl J. NETGEN** – An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules // Computing and Visualization in Science. – 1997. – Vol. 1. – P. 41–52.