"一亿"是"一千万"的十倍吗?

原创 邓子平 多物理场仿真技术



笔者在 一篇文章入门多物理场有限元(全篇)一文中提出过该问题。以下是原文内容:

-----1亿是1千万的10倍? -----

早期笔者使用矩量法求解线性方程组,在不使用快速多级方法,自由度达到3万时,台式机上已经无法求解出,8G的机器内存不够用。对于满秩矩阵的线性方程组,常规求解方法时间复杂度为n^3(n的3次方)。

对于自由度1千万以下稀疏矩阵的求解,好的台式机基本能应付,而当自由度达到1亿的时候,简单的将硬件乘以10倍完全不能满足要求。因为计算的空间复杂度,时间复杂度并不是线性,通常是NlogN,N²或者更高。当自由度达到1亿时,不仅需要对硬件核心部件CPU,内存扩容,而且在磁盘阵列,I/O,并发计算,GPU,网络,带宽等方面都提出了更苛刻的要求。

在算法方面看,减少网格密度,在物理量梯度大的地方加密,无变化的地方将网格变稀疏,可以有效减少计算量;另外优化求解算法本身,使其更加易于并行化计算。

从目前来看, 计算机硬件计算能力的更新速度, 跟不上指数级求解规模的增加速度。这也是量子力学发展的最大推动力!

针对该问题,本文稍微展开一下。

这里的1亿,主要指仿真中最终求解线性方程组的自由度个数,就是刚度矩阵的规模,即在方程 Kx=b中, K的规模为1亿*1亿的方阵。

从硬件角度看,性能瓶颈首先在内存。目前台式机的内存普遍在64G以下。对于1千万的稀疏矩阵,存储勉强够用,加上计算,一般都不够用,在windows系统上如果内存不够用,会启用虚拟内存,也就是用页面交换把硬盘当内存使用,频繁读写磁盘,这时候性能会大大降低。而对于1亿自由度的矩阵,可能刚度矩阵组装都不够用。对于一亿自由度的矩阵,首先要保证内存能够存储,一般的方法是使用具有超大内存的工作站服务器。

内存问题解决后,再就是CPU性能。前面讲过,通常矩阵计算的空间复杂度,时间复杂度并不是线性,而是NlogN,N²或者更高。使用单核单线程,耗费的时间是条曲线上升趋势。虽然稀疏矩阵采用了CSR等方法压缩数据,但自由度的平方数据仍然还是海量数据。现在的CPU普遍多核多个逻辑线程。这也要求在进行迭代法求解方程组时,合理的进行矩阵分解,参考一篇文章入门仿真软件性能优化,采用分治的方法适应硬件的需求。

这里需要注意的是单核CPU的性能以及CPU的数量。根据实际情况进行分治!

在满足了单机CPU运行之后,再就是集群分布式计算。采用多台计算设备,比如刀片等专业服务器,超算等等,这里需要考量的是负载均衡和网络带宽,即保证单台设备的利用率和整体进度保持一致。对于超大量的计算,最好能软件实现动态规划,对于频繁交换数据的计算,要注意网络带宽的瓶颈。

再从软件方面来看,根据笔者的研发经验,相当一部分仿真的性能问题可以通过软件以及改进算法解决。在前处理中,尽量避免软件中高频操作,大数据拷贝,大量细小数据操作等。如果必须有,对操作进行采样性能评估,保证在可接受范围内。在求解线性方程组前,提取矩阵特征,尽可能在最细度上根据矩阵特征,同时结合模型和业务的特点,选取最合适的求解方法。

其实目前对于数值计算方法而言,其算法都是公开透明的,商业软件之间真正较量的是业务模型的 准确性,算法的稳定性以及效率。而这也恰恰是每个软件可以改进和提升的地方

2004年, ANSYS解出了1亿自由度的模型, 2008年, ANSYS解出了10亿自由度的模型。即使现在来看, 我们认为自由度超过1千万的模型是个大模型, 所以1亿自由度的模型仍然可以认为是超大模型, 且只能在超大的服务器上运行, 可以想象, 随着硬件的提升和算法的改进, 实际应用中会有越来越多的超1亿自由度的模型求解。

回到开始的问题, "一亿"是"一千万"的十倍吗?显然不是。

最后还是以业内的一句话作为结束语:

"如果你的仿真还没有受到硬件的限制,那说明你的仿真还没有入门"。

阅读: null 在看: null