

FEM-Simulationen im GRID – Eine Alternative zur Einzelplatzlösung?

Dr. Simon Schmitz, Dr. Arno Ickler
ERAS GmbH, Hannah-Vogt-Straße 1, 37085 Göttingen, info@eras.de

Kurzfassung

FEM-Simulationen stellen an die Rechenleistung von Computern hohe Ansprüche. Dadurch ist die Berechnung von FE-Modellen – gerade für kleine und mittelständische Unternehmen (KMUs) – mit hohen Kosten allein für die Anschaffung und den Unterhalt der Hardware verbunden. Ebenso sind Lizenzkosten für die Software nötig, die unabhängig von ihrer Auslastung anfallen. Die ERAS GmbH arbeitet im Rahmen des Projekts „OptiNum-Grid“ an der Bereitstellung des Programmpakets UNA, einem Solver für FEM-Simulationen, im GRID. Dadurch können rechenintensive Analysen mechanischer Strukturen in das GRID ausgelagert werden.

1 Grundlagen der FEM-Simulation

Die Finite-Element-Methode (FEM) [1] ist ein Werkzeug, um physikalische Prozesse zu beschreiben. Computerbasierte Simulationen auf Basis von FE-Modellen sind etablierte Verfahren in weiten Bereichen der Technik. Eine besondere Stärke dieser Methode liegt darin, dass verschiedene physikalische Phänomene und deren Wechselwirkungen miteinander gemeinsam berechnet werden können, was auf ein System gekoppelter (meist elliptischer) partieller Differentialgleichungen führt. Bei der ERAS GmbH [2] beispielsweise wird oft die Wechselwirkung von Aktuatoren (elektro-magnetische bzw. piezo-elektrische Wandler mit Regelkreis) innerhalb mechanischer Modelle untersucht.

Mittels einer FEM-Software werden aus dem FE-Modell die zur Lösung notwendigen Matrizen assembliert und durch den eingebauten Matrix-Löser invertiert. Auch letzterer Schritt wird, obwohl er oft große Mengen an CPU-Zeit benötigt, bei KMUs regelmäßig auf der Workstation des Ingenieurs durchgeführt. Aus Software- und Lizenzgründen ist es bei den meisten kommerziellen FEM-Programmen auch nicht möglich, die Lösung des Problems z.B. einem Linux-Cluster zu überlassen. Solche Cluster sind bei KMU auch meist nicht verfügbar, da die Auslastung zu gering wäre. Eine vertrauenswürdige und leistungsfähige GRID-Lösung würde hier ganz neue Möglichkeiten bieten.

2 FEM-Simulationen im GRID

Im Rahmen des Projektes „OptiNum-Grid“ [3] arbeitet die ERAS GmbH an dem Programmpaket UNA zur Assemblierung und Lösung von FEM-Systemmatrizen im GRID. Dieses basiert auf einem freien Fortran Quellcode. Im Gegensatz zu kommerzieller FEM-Software ist der

Funktionsumfang allerdings eingeschränkt. Zum einen stehen nicht alle Analysetypen (z.B. nicht-lineare Analysen) zur Verfügung, die ein kommerzielles Programm wie Nastran [4] bietet. Zum anderen ist die Bibliothek der verwendeten Elementtypen im Vergleich zu Nastran beschränkt. Dessen ungeachtet ist UNA ein Programm, das für die meisten mechanischen Problemstellungen ausreicht und somit eine Alternative für KMUs sein kann.

Im Gegensatz zur Einzelplatzlösung – lokal auf der Workstation des Benutzers – stellt die Verwendung einer FEM-Software im GRID jedoch besondere Anforderungen an die Sicherheit.

Zum einen ist dies, aus der Sicht des Nutzers, die Sicherheit seiner Daten. Dazu gehört vor allem die Sicherheit, dass sie zu keinem Zeitpunkt unverschlüsselt im GRID vorliegen und so durch Dritte eingesehen werden könnten. Dies kann durch eine Verschlüsselung erreicht werden. Das Programm Parrot [5] ist eine Möglichkeit dazu. Ein herausragendes Merkmal von Parrot ist, dass es eine transparente Verschlüsselung der Daten erlaubt. Von der FEM-Software getätigte Lese- bzw. Schreibzugriffe auf diese Daten werden durch Parrot transparent ent- bzw. verschlüsselt. Auf diese Weise ist sichergestellt, dass die Daten zu jeder Zeit auf dem Massenspeicher im GRID verschlüsselt vorliegen. Lediglich im Hauptspeicher des ausführenden GRID-Knotens liegen die Daten unverschlüsselt vor. Das Softwarepaket UNA arbeitet problemlos mit Parrot zusammen.

Zum anderen ist dies, aus der Sicht des Softwareanbieters, die Sicherheit seines Programms/Quellcodes. Der Nutzer (der i.A. nicht mit dem Anbieter der Software identisch ist) benötigt natürlich Zugriff auf die FEM-Software im GRID. In keinem Fall aber darf es passieren, dass der Quellcode des Programms in die Hände des Nutzers fällt. Zu diesem Zweck wurde in enger Zusammenarbeit von der Gesellschaft für wissenschaftliche Daten-

verarbeitung mbH (GWDG) ein sicherer Installer für geschützte Software im GRID entwickelt.

2.1 Workflow einer Einzelplatzlösung

Der Arbeitsablauf einer FEM-Simulation lässt sich in drei Schritte unterteilen:

- Aufbau/Import des Modells.
- Berechnung mittels FEM-Software.
- Analyse der Simulationsergebnisse.

Diese drei Schritte werden gewöhnlich mit kommerziellen Programmen durchgeführt. Der Aufbau des Modells wird im Preprozessor erledigt. Dazu gehört sowohl die Definition der Geometrie des FE-Modells als auch die Festlegung von Eigenschaften und Materialien. Zusätzlich müssen noch die Randbedingungen und Lasten definiert werden. Diese sind geometrischer Art, können aber auch zeitlich variabel sein. Aus dem Preprozessor wird der Solver aufgerufen, der je nach gewünschter Analyse-methode das Modell berechnet. Dieser Solver ist zwar (meist) ein eigenständiges Programm, dessen Aufruf aber so in den Preprozessor integriert ist, dass die Schnittstelle den Workflow des Benutzers nicht unterbricht. Der Postprozessor (dies ist im Allgemeinen das gleiche Programm wie der Preprozessor) nimmt die Simulationsergebnisse vom Solver entgegen und stellt sie dar. Der Benutzer kann dann die für ihn relevanten Ergebnisse (z.B. Verschiebungen oder Spannungen) auswerten und darstellen lassen.

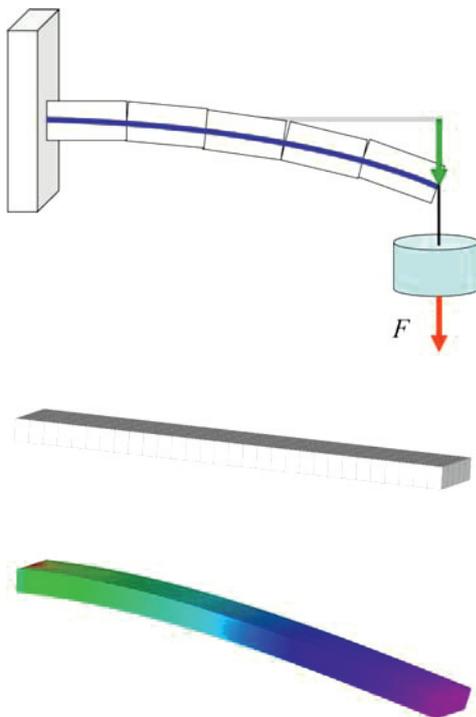


Abbildung 1: Beispiel eines Biegebalkens: Skizze der Struktur (oben), FE-Modell (mittig) und Ergebnisse der FEM-Simulation (unten).

Im Beispiel in Abbildung 1 ist dieser Workflow zu sehen. Das gezeigte Modell ist eine einfache mechanische Struktur, nämlich ein einseitig (hier: links) eingespannter Biegebalken [6]. Im Bild oben ist die Auslenkung eines solchen Balkens skizziert, hervorgerufen durch eine angreifende Last am rechten Ende. In der Bildmitte ist das fertige, mit dem Preprozessor erstellte Modell gezeigt. Im Bild unten schließlich ist das Ergebnis der statischen Analyse dargestellt. Zu sehen ist die berechnete Auslenkung des Balkens in Verbindung mit einem Konturplot der im Material wirkenden Spannungen.

2.2 Workflow im GRID

Bei der Verwendung einer FEM-Software im GRID ergeben sich zwischen den drei gerade erläuterten Hauptschritten noch zusätzliche Zwischenschritte. In diesen wird sowohl der Transfer zum/vom GRID abgewickelt, als auch den speziellen Erfordernissen des Softwarepakets UNA Rechnung getragen. Dies ist in Abbildung 2 zu sehen.

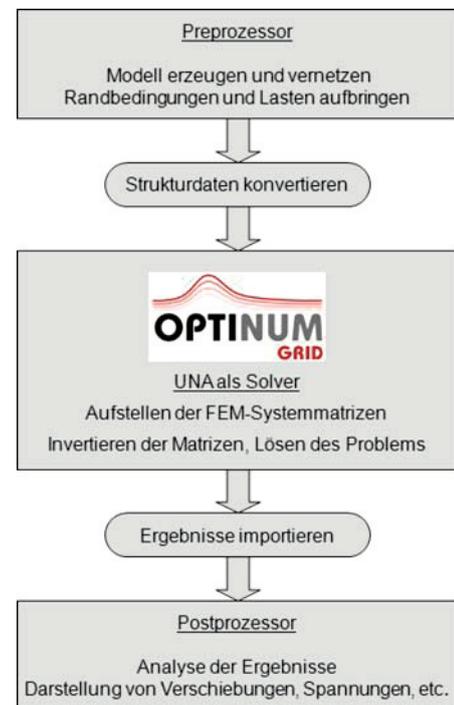


Abbildung 2: Workflow für FEM-Simulationen im GRID.

Unter „Strukturdaten konvertieren“ fallen alle Aufgaben, die zwischen dem Preprozessor auf der einen und UNA im GRID auf der anderen Seite anfallen. Dies sind:

- Konvertieren der Datendecks vom Nastran-Format in das UNA-Format.
- Verschlüsseln der Daten mit Parrot und Transport der Daten in das GRID.
- Starten des GRID-Jobs.

Nach einer erfolgreich beendeten Simulation müssen die gewonnenen Ergebnisse wieder aus dem GRID zurück transferiert werden („Ergebnisse importieren“):

- Auswahl der Ergebnisdateien (je nach Analyse-methode).
- Rücktransfer der Ergebnisse aus dem GRID.
- Entschlüsselung der Ergebnisse mit Parrot und Import in den Postprozessor.

Dieser Workflow ist, wie eben beschrieben, umgesetzt und einsatzbereit.

Die Auslagerung von FEM-Berechnungen in das GRID sollte aber für den Benutzer mit möglichst wenig Mehraufwand im Vergleich zur Einzelplatzlösung verbunden sein. Die Akzeptanz einer GRID-basierten FEM-Software hängt nicht nur von den technischen Randbedingungen (Sicherheit der Daten, Leistungsumfang, höhere Rechenleistung im Vergleich zur Einzelplatzlösung) ab, sondern auch vom „gefühlten“ Komfort. Das Lösen der FE-Modelle im GRID darf den gewohnten Workflow nicht zu stark verkomplizieren.

Es ist dem Endanwender, der im GRID rechnen möchte, nicht zuzumuten, dass er sich mit den einzelnen Schritten der Jobsubmitting und -überwachung auseinandersetzen muss. Dies gilt umso mehr, wenn dies über Befehls-eingaben in einer Kommandozeile erfolgen muss. An dieser Stelle ist die Idee eines Portals sinnvoll, das für das OptiNum-Grid Projekt existiert [7]. Allerdings ist dieses Portal auch mit einigen Hürden verbunden:

- Es ist nötig, vor der Benutzung das eigene, aktive Proxy-Credential hochzuladen. Dieses muss vorher zuerst lokal erstellt worden sein.
- Ein weiteres Credential für das Portal muss erzeugt werden.
- Die Eingabedateien müssen auf die Cluster-Frontends (im Moment optinum-srv und fau-i3cluster) hochgeladen und die Ergebnisse am Ende wieder abgeholt werden.
- Der Job muss von Hand in einer Eingabemaske definiert werden, unter Verwendung der zuvor hochgeladenen Eingabedateien.
- Vor bzw. nach der Berechnung müssen die Ein-/Ausgaben lokal durch den Benutzer ver- bzw. entschlüsselt werden.

Der Aufwand für diese Punkte steigt natürlich mit der Anzahl der Jobs, die man submittingen möchte.

Testweise wurde von der ERAS GmbH ein eigenes, auf die Verwendung des GRID für FEM-Simulationen abgestimmtes Portal entwickelt, um diese Hürden für den Benutzer abzumildern. Als Technik kommt eine virtuelle Maschine (VM) zum Einsatz. Diese kann dem Benutzer vorkonfiguriert zur Verfügung gestellt werden und läuft auf dessen lokaler Workstation. Im Moment sind darin folgende Vorgänge implementiert:

- Management des eigenen lokalen Proxy-Credentials.
- Submitting von Jobs: Nur ein Name für den Job und eine Eingabedatei ist dazu nötig.
- Überwachung von Jobs: Alle submittingten Jobs werden tabellarisch aufgelistet mit dem derzeitigen Status.

- Konfiguration: Das eigene Zertifikat (user-cert.pem) mit dem zugehörigen Schlüssel (user-key.pem) können in die VM hochgeladen werden.

Die Submitting der Jobs beinhaltet die automatische Erzeugung eines Jobskripts, welches für die gängigsten Berechnungen ausreicht. Ebenfalls werden die Eingabedaten vorher in das für UNA verständliche Format umgewandelt und mit Parrot verschlüsselt, welches ebenfalls in der VM integriert ist. Das erzeugte Jobskript beinhaltet die Abarbeitung der Berechnung unter Zuhilfenahme von Parrot.

Die Überwachung der Jobs zeigt den derzeitigen Status der Jobs an. Sollten Jobs schon beendet sein, dann kann das Ergebnis über einen Button abgerufen werden. Dabei wird dieses Ergebnis (das durchaus aus mehreren Dateien bestehen kann) aus dem GRID heruntergeladen, mithilfe von Parrot in der lokalen VM entschlüsselt und dem Benutzer als Download zur Verfügung gestellt. Die Dateien im GRID werden nicht automatisch gelöscht, dies ist über einen separaten Button möglich.

Die Verwendung eines FEM-spezifischen Portals steigert den Komfort für den Benutzer erheblich und kann so die Akzeptanz des GRID erhöhen.

2.3 Anwendungsfälle von FEM-Simulationen im GRID

Das GRID bietet für numerische Simulationen immer dann Vorteile, wenn das zu lösende Problem sich gut in mehrere unabhängige Teilprobleme aufsplitten lässt. Dies ist bei FEM-Simulationen nicht für alle Analysemethoden gegeben

Bei einer statischen Analyse einer mechanischen Struktur, wie sie oben beispielhaft gezeigt wurde, ist die Berechnung z.B. auf nur einen Gridknoten beschränkt. Insofern ergibt sich kein (GRID-relevanter) Vorteil gegenüber einer Bearbeitung auf der Workstation des Ingenieurs. Bei einer Modalanalyse trifft selbiges zu. Bei vielen gleichzeitig zu bearbeitenden FEM-Modellen entlastet die parallele Ausführung der Simulationen im GRID die lokalen Ressourcen natürlich sehr.

Ein anderes Beispiel ist die Analyse des Frequenzgangs einer mechanischen Struktur. In diesem Fall greift an der rechten Seite des Biegebalkens aus Abbildung 1 keine statische, sondern eine zeitlich sinusförmige Kraft aus einem definierten Frequenzbereich an. Hierbei lassen sich die Möglichkeiten des GRID gut nutzen. Bei der Vermessung für einen großen Frequenzbereich kann diese Aufgabe in viele kleine, voneinander unabhängige Teilprobleme mit jeweils kleinen Frequenzintervallen zerlegt werden. Es ist allerdings darauf zu achten, dass ein guter Kompromiss aus der Gesamtgröße des Modells und der Anzahl der Teilprobleme gefunden wird. Für jedes Teilproblem müssen aus dem Gesamtmodell zuerst die FEM-Systemmatrizen erstellt werden, bevor das Ergebnis berechnet werden kann. Dieser (konstante) Overhead darf also in Relation zu dem Zeitaufwand für die Lösung des

Teilproblems nicht überwiegen. Sonst sinkt die Effektivität der Berechnung im GRID.

2.4 Rechenleistung im GRID im Vergleich zur Einzelplatzlösung

Die gemachten Aussagen werden nun anhand eines konkreten Beispiels überprüft. Dazu wird ein Biegebalken modelliert mit folgenden Eigenschaften:

- Länge: 300 mm,
- Breite: 50 mm,
- Höhe: 5 mm,
- Material: Stahl ($E=194.4 \text{ GPa}$, $\rho=8055 \text{ kg/m}^3$).

Der Balken ist auf der linken Seite fest eingespannt. Es gibt dort also keine translatorischen oder rotatorischen Freiheitsgrade. An der rechten Seite greift eine harmonische Kraft aus dem Frequenzbereich zwischen 1 und 1000 Hz an. Als Ergebnis erhält man z.B. die Frequenzabhängigkeit der Auslenkung des Balkens. Diese ist für die z-Richtung in Abbildung 3 dargestellt. An Stellen, an denen die Eigenmoden des Balkens zu finden sind (44.5, 278.4 und 779.2 Hz), ist die Antwort des Balkens auf die Anregung sehr stark.

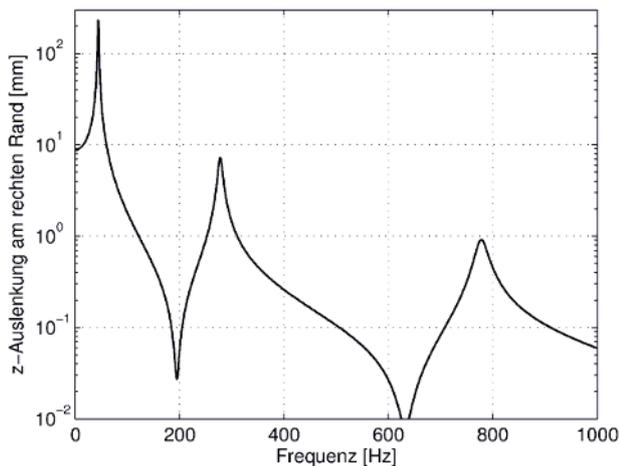


Abbildung 3: Frequenzabhängigkeit der Auslenkung eines Biegebalkens.

Um die Performance im GRID mit der auf der lokalen Workstation zu vergleichen, wurde dieses Modell in unterschiedlichen Verfeinerungsstufen untersucht. Die Modellgröße ist in der folgenden Tabelle aufgelistet:

Modell	Anzahl Knoten	Anzahl Elemente
1	186	150
2	671	600
3	3926	3750

Diese Modelle wurden sowohl lokal (d.h. auf der Workstation des Benutzers) als auch im GRID gerechnet. Gleichzeitig wurde das Modell bei der Berechnung im GRID in unterschiedlich viele Teilprobleme aufgespalten, um das zeitliche Verhältnisses aus Assemblierung und Lösung der Matrizen zu untersuchen. Die Ergebnisse sind

in Matrixform in nachstehender Tabelle zusammengefasst. Die Zeiten sind in Sekunden (gerundet) angegeben.

Modell	Lokal	GRID		
	Anzahl Teilprobleme			
	1	10	100	1000
1	9	15	4	4
2	37	34	6	4
3	336	189	15	10

Bei der Berechnung im GRID wurde der jeweils günstigste Fall angenommen. Das bedeutet, es wurde ein Teilproblem gerechnet und die dafür benötigte Zeit als Gesamtzeit für die Berechnung angegeben. Dieser Fall tritt natürlich nur ein, wenn alle Teilprobleme gleichzeitig auf ebenso viele Clusterknoten verteilt werden können. Wenn dies nicht der Fall ist, dann ergibt sich durch Wartezeiten eine längere Gesamtdauer der Simulation. In den Zeiten für das GRID ist der Transfer als konstanter Overhead nicht mit berücksichtigt.

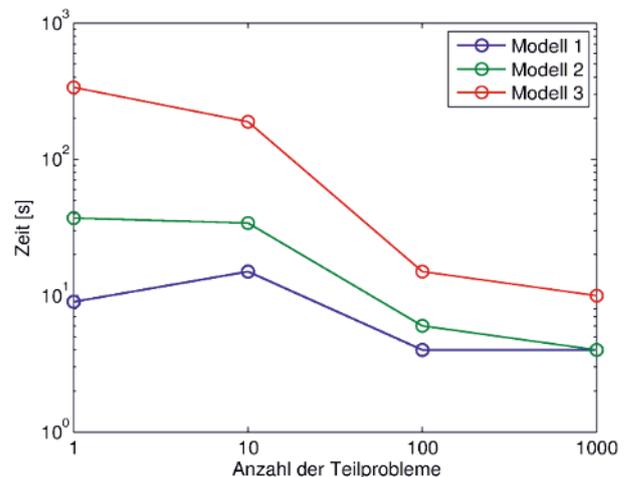


Abbildung 4: Performance der Berechnung im GRID (10, 100, 1000 Teilprobleme) gegenüber der lokalen Berechnung (1 Teilproblem).

Eine grafische Auftragung der Ergebnisse ist in Abbildung 4 gezeigt. Es ist zu erkennen, dass eine verteilte Berechnung besonders dann Vorteile bringt, wenn sich die Problemstellung gut in viele kleine Teilprobleme aufspalten lässt. Vor allem für Modell 3 sinkt die benötigte Zeit drastisch. Bei Modellen mit noch mehr Knoten bzw. Freiheitsgraden ist dieser Effekt noch ausgeprägter.

Daneben ist aber auch zu sehen, dass eine zu feine Aufteilung (1000 Teilprobleme) keine nennenswerte Verbesserung mehr bringt. Im Gegenteil ist mit einer Verschlechterung der Performance zu rechnen, da für zu viele Teilprobleme nicht genügend viele freie GRID-Knoten gleichzeitig zur Verfügung stehen. Es kommt also zu Wartezeiten und damit zu einer teilweise seriellen Abarbeitung.

Eine Berechnung kleiner FE-Modelle im GRID ist auch eher mit Nachteilen verbunden. Die Aufteilung von Mo-

dell 1 in 10 Teilprobleme ist langsamer als die lokale Berechnung. Dies ist zum einen damit zu erklären, dass der lokal verwendete Solver (Nastran) wahrscheinlich leistungsfähiger ist als UNA. Zum anderen ist natürlich die verwendete Hardwarekonfiguration eine andere. Insofern lassen sich die Zeiten zwischen lokaler und GRID-Berechnung nicht 1:1 vergleichen. Der von der Anzahl der Teilprobleme abhängige Trend bei der Berechnung im GRID jedoch schon.

Für die vorgestellte Analyseverfahren, nämlich der Untersuchung des Frequenzgangs einer mechanischen Struktur, wird noch die Verwendung des GridWorker [8] evaluiert. Dabei haben sich vor allem zwei Probleme ergeben:

- UNA erwartet ein festes Zeilenformat. Dies ist mit GridWorker im Moment nicht zu realisieren.
- GridWorker teilt den Frequenzbereich zur Analyse des FE-Modells in einzelne Frequenzen auf, was zu dem oben beschriebenen Phänomen zu vieler Teilprobleme führt.

An beiden Punkten wird noch gearbeitet, so dass in Zukunft auch GridWorker für das Management verteilter Jobs im GRID verwendet werden kann.

3 Fazit

FEM-Simulationen im GRID sind eine attraktive Alternative zu einer Einzelplatzlösung am Arbeitsplatz des Ingenieurs. Mit dem Programmpaket UNA steht eine Lösung zur Verfügung, die die Berechnung und Analyse mechanischer Systeme erlaubt. Anhand einer einfachen mechanischen Struktur wurde gezeigt, dass die Möglichkeiten im GRID für FEM-Simulationen gut nutzbar sind.

Die Akzeptanz eines GRID basierten FEM-Solvers hängt jedoch stark von einer möglichst komfortablen Integration in den Arbeitsablauf des Ingenieurs ab. Dazu ist die Entwicklung von einfach zu bedienenden Oberflächen wichtig, um dem Nutzer die Routineaufgaben im GRID (Submittieren, Überwachen, Transfer von Jobs) abzunehmen.

Literatur

- [1] Schwarz, Hans R.: Methode der finiten Elemente Teubner Verlag, 3. Auflage (1991)
- [2] ERAS GmbH: <http://www.eras.de/>
- [3] OptiNum-Grid: <http://www.d-grid-ggmbh.de/index.php?id=99>
- [4] Nastran: <http://www.mscsoftware.com/>
- [5] Parrot: <http://www.cse.nd.edu/~ccl/software/parrot/>
- [6] Szabó, István: Einführung in die Technische Mechanik. Springer Verlag Berlin (2001)
- [7] OptiNum-Grid-Portal: <http://optinum-srv.gwdg.de:8080/gridsphere/>
- [8] Schneider, A.: Variantensimulation mit GridWorker. ASIM-Workshop „Simulation technischer Systeme – Grundlagen und Methoden in Modellbildung und Simulation“, Krefeld, 24.-25. Februar 2011