

Diss. ETH No. 20712

A Highly Scalable Memory Efficient Multigrid Solver for μ -Finite Element Analyses

A dissertation submitted to
ETH ZURICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by
Cyril Flaig

Master of Science ETH in Computer Science
born September 17th, 1980
citizen of Bassersdorf ZH

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Peter Arbenz (ETH Zurich), examiner
Prof. Dr. Ralph Müller (ETH Zurich), co-examiner
Prof. Dr. Harry van Lenthe (KU Leuven), co-examiner
Prof. Dr. George Biros (U.T. Austin), co-examiner

2012

Abstract

Osteoporosis is a bone disease affecting millions of people around the world. It leads to low bone quality and also increases the risk of fracture. To better understand structures and to improve the prediction of fractures, a precise estimation of bone stiffness and strength is required. This can be achieved by micro finite element analysis (micro-FE) based on high-resolution 3D images obtained by CT scans.

Because of the high resolution of these scans the number of voxels in micro-FE analyses is huge. As a consequence, the resulting linear system has an enormous number of degrees of freedom. Earlier, we have developed a fully parallel state-of-the-art solver (ParFE) based on conjugate gradient algorithm preconditioned by algebraic multigrid. This code exploits the geometric properties of voxel images by avoiding the assembly of the system matrix. The largest realistic bone model solved so far by ParFE had a size of about 1.5 billion degrees of freedom.

For potential clinical usage a solver must be much more memory efficient than ParFE. A first approach presented in this thesis is based on a geometric multigrid approach. This new approach enables us to better exploit the voxel geometry inherited by the CT scans by embedding the bone in a regular grid. The geometric multigrid approach makes it possible to use an element-by-element matrix-vector multiplication on all levels of the grid hierarchy and thus the matrix assembly can be avoided throughout. Multigrid preconditioning together with parallel polynomial smoothing lead to a perfect scalable algorithm. The memory efficiency increases by more than a factor ten in comparison with the algebraic multigrid code.

The second approach presented here implements the geometric multigrid preconditioner with a pointer-less octree like data structure to avoid the unneeded degrees of freedom in the bone free region. Instead of using 8 pointers to represent the tree, the elements and the nodes are identified with a key according to a space-filling curve that is equivalent to an octree. With the help of this data structure the algorithm can exploit the sparse structure of the bone and enables us to run the simulation with 1 to 6 times smaller memory footprint compared to the geometric multigrid. This factor depends on the sparsity of the bone.

Compared to ParFE, the second approach saves memory by a factor bigger than 15. This enabled us to analyze even larger problems with hundreds of billions of degrees of freedom on modern clusters or reasonable sized samples on machinery that are feasible for clinical institutes.

Zusammenfassung

Osteoporose ist eine Knochenkrankheit, die zu geringer Knochendichte führt. Millionen Menschen weltweit erkranken daran und haben dadurch ein erhöhtes Risiko für einen Knochenbruch. Um das Risiko eines Bruches besser voraussagen zu können, wird eine genaue Berechnung der Knochenfestigkeit benötigt. Dafür wurde eine mikro-Finite-Element-Methode entwickelt, welche auf hochauflösenden dreidimensionalen CT-Bildern basiert.

Durch die sehr feine Auflösung der CT-Scans ist die Anzahl Voxel, welche in die mikro-Finite-Element-Methode einfließen, enorm. Entsprechend hat das resultierende lineare Gleichungssystem eine riesige Anzahl Unbekannten. ParFE, die modernste Simulationssoftware basierend auf einem Verfahren der konjugierten Gradienten mit einem algebraischen Multigridvorkonditionierer, nützt die Struktur der Voxel aus, indem es die Steifigkeitsmatrix nicht aufbaut. Mit dieser Software wurde das bis dahin grösste echte Knochenmodell mit 1.5 Milliarden Unbekannten simuliert.

Um den Einsatz der Simulationssoftware in klinischen Instituten zu ermöglichen, muss sie deutlich speichereffizienter werden. Das erste entwickelte Verfahren in dieser Dissertation benützt einen geometrischen Multigridvorkonditionierer. Dieses erlaubt es die geometrische Struktur des regulären Gitters auszunutzen, in welchem das Knochenmodell eingebettet ist und schafft somit die Voraussetzung um auf allen Stufen matrixfreie Matrix-Vektor-Multiplikationen benützen zu können. Die Skalierung auf Clustern wird durch ein paralleles Glättungsverfahren ermöglicht. Mit diesem ersten Schritt konnte bis zu 90% des Hauptspeichers gespart werden.

Das zweite entwickelte Verfahren in dieser Arbeit erweitert das erste Verfahren, indem das Gitter in einem zeigerlosen Octree gespeichert wird. So müssen die nicht benötigten Unbekannten im knochenfreien Bereich der Struktur nicht gespeichert werden. Statt wie gewöhnlich durch 8 Zeiger wird der Octree mit Hilfe einer raumfüllende Kurve gespeichert. Dank dieser Datenstruktur kann nochmals der Hauptspeicherbedarf um Faktor 1 bis 6 je nach Porösität des Knochens reduziert werden.

Mit dem zweiten Verfahren konnte der verbrauchte Arbeitsspeicher gegenüber ParFE um über einen Faktor 15 reduziert werden. Durch den minimalen Speicherbedarf konnten noch grössere Knochenmodelle mit mehreren 100 Milliarden Unbekannten auf einem Cluster analysiert werden. Nun können auch realistische Modelle an klinischen Instituten berechnet werden.