National Conference with International Participation
ENGINEERING MECHANICS 2001
Svratka, Czech Republic, May 14 – 17, 2001

INFLUENCE OF SUBDOMAIN SHAPES ON SOLUTION OF EQUATION SYSTEMS

Jaroslav Kruis*, Zdeněk Bittnar†

Summary: *Domain decomposition methods are very popular for solution of large engineering and scientific problems at this time. They lead to the resulting system of equations which is usually solved by iterative method. The convergence of iterative methods is affected by several factors which are investigated in this paper. Different decompositions are used and condition numbers are calculated.*

Key words: *domain decomposition methods, parallel computers, condition number, iterative solver.*

1 Úvod

Zejména ve vědeckých výpočtech se stále více prosazují paralelní počítače. Důvody, které hovoří pro jejich využití, jsou zřejmé. Jedná se o snahu řešit a modelovat složité jevy a procesy prakticky ve všech oblastech. Ačkoliv lze pozorovat takové snahy i v inženýrské praxi, nejsou v ní zatím paralelní počítače běžné, ale lze očekávat změnu v souvislosti se stále rostoucím výkonem počítačů a s rostoucí podporou paralelního prostředí. Zlom ve využívání nastane pravděpodobně ve chvíli, kdy firmy pochopí snadnost sestrojení vlastního paralelního stroje ze stávajících počítačů. Prakticky každá projekční kancelář v současné době vlastní řadu počítačů pro počítačem podporované projektování a ještě další pro administrativu. Spojením takových počítačů sítí lze sestrojit tzv. cluster, jehož cena bude dána vlastně pouze cenou zmiňované sítě. Počítače tvořící jednotlivé uzly paralelního stroje jsou již k dispozici.

S přechodem od jednoprocesorových počítačů k paralelním je třeba změnit nebo upravit řadu běžně používaných algoritmů. Důvodem je rozložení dat po jednotlivých procesorech což vede k možnostem řešit mnohem větší úlohy. Tím pádem každý uzel paralelního počítače může efektivně pracovat jen na části dat, zbytek musí získat pomocí komunikace. To je na druhou stranu nevýhoda, protože komunikace mezi procesory je nejslabším místem paralelních výpočtů. Nejvíc dat je třeba vyměňovat při řešení soustav rovnic, které zajišťují přenos informací po oblasti. Proto všechny části související s řešením je třeba změnit nebo alespoň upravit. Naopak pro řadu úkonů spojených s metodou konečných prvků lze velkou část sekvenčního kódu použít prakticky beze změny. Jedná se o sestavování charakteristických matic (tuhosti, hmotnosti, vodivosti aj.) a vektorů, výpočet deformací a napětí apod.

Lze tvrdit, že v současné době se k řešení soustav rovnic zejména používají metody doménové dekompozice [1], [4], [5], [9], [10]. Tyto metody se označují také jako metody subkonstrukcí, což je pro inženýry snadno představitelné. Metody rozkladu oblasti na podoblasti umožňují poměrně snadnou paralelizaci. Jednotlivé podoblasti jsou zpracovávány téměř stejným způsobem jako při sekvenčním běhu programu. Navíc se vyskytuje řešení výsledné soustavy rovnic, jejíž fyzikální

*Ing. Jaroslav Kruis, Ph.D., Katedra stavební mechaniky, Stavební fakulta ČVUT, Thákurova 7, 166 29 Praha 6; tel. +420 2 2435 4369, e–mail: jk@cml.fsv.cvut.cz

†Prof. Ing. Zdeněk Bittnar, DrSc., Katedra stavební mechaniky, Stavební fakulta ČVUT, Thákurova 7, 166 29 Praha 6; tel. +420 2 2435 3869, e–mail: bittnar@fsv.cvut.cz

smysl spočívá v zajištění spojitosti neznámých veličin na hranicích podoblastí. Předností těchto metod je využití jak přímých (finitních), tak iteračních metod.

Dělení původní oblasti na podoblasti má jasně vliv na rychlost výpočtu a na maximalní velikost řešené úlohy. Tento příspěvek analyzuje různé možnosti dekompozice a různé požadavky, které jsou na ně kladeny, aby výpočet proběhl co nejefektivněji. Nejprve je v kapitole 2 velice stručně zmíněna jedna verze doménové dekompozice. Pomocí ní lze snadno objasnit některé požadavky na dělení, které jsou obsaženy v kapitole 3. V kapitole 4 jsou pak uvedena čísla podmíněnosti výsledných soustav rovnic problémů s homogenními i heterogenními materiály.

2 Primární doménová dekompozice

Doménové dekompozice lze rozdělit na dvě základní skupiny. V mechanice konstrukcí se prakticky všechny výpočty provádějí metodou konečných prvků a to deformační variantou. To znamená, že neznámé vyskytující se v problému jsou posuny nebo pootočení. První skupina, tvořená primárními doménovými dekompozicemi, pracuje pouze s původními neznámými. Naopak druhá skupina, ve které jsou sdruženy duální doménové dekompozice, pracuje na úrovni podoblastí s primárními neznámými, tj. posuny a pootočeními, na úrovni výsledného problému však pracuje s duálními neznámými, tj. s uzlovými silami a momenty. Druhá skupina metod je považována za lepší a v literatuře se označuje jako metoda FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting). Pro potřeby rozboru vlivu dělení oblasti na podoblasti bude zkoumána primární dekompozice.

Jak již bylo uvedeno, v primární doménové dekompozici se pracuje stále s původními neznámými. Metoda je založena na výpočtu tzv. Schurových doplňků [9], [10], což se v inženýrské mluvě označuje jako kondenzace vnitřních stupňů volnosti. Vhodným očíslováním neznámých v problému má soustava rovnic tvar

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{K}_1^{[ii]} & & \boldsymbol{O} & & & \boldsymbol{K}_1^{[ib]} \\ & \boldsymbol{K}_2^{[ii]} & & & & \boldsymbol{K}_2^{[ib]} \\ \boldsymbol{O} & & \boldsymbol{K}_3^{[ii]} & & & \boldsymbol{K}_3^{[ib]} \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & \boldsymbol{K}_m^{[ii]} & \boldsymbol{K}_m^{[ib]} \\ \boldsymbol{K}_1^{[bi]} & \boldsymbol{K}_2^{[bi]} & \boldsymbol{K}_3^{[bi]} & \dots & \boldsymbol{K}_m^{[bi]} & \boldsymbol{K}^{[bb]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{r}_{[i]}^{(1)} \\ \boldsymbol{r}_{[i]}^{(2)} \\ \boldsymbol{r}_{[i]}^{(3)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{r}_{[i]}^{(m)} \\ \boldsymbol{r}_{[b]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_{[i]}^{(1)} \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(2)} \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(3)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{f}_{[i]}^{(m)} \\ \boldsymbol{f}_{[b]} \end{pmatrix}, \tag{1}$$

kde je použito označení

- $\boldsymbol{r}_{[i]}^{(j)}$, kde $j \in \{1, 2, \dots, m\}$ vektory neznámých uvnitř j-té podoblasti,
- $\boldsymbol{r}_{[b]}$ vektor neznámých na hranicích podoblastí,
- $\boldsymbol{f}_{[i]}^{(j)}$, kde $j \in \{1, 2, \dots, m\}$ vektory zatížení uzlů uvnitř j-té podoblasti,
- $\boldsymbol{f}_{[b]}$ vektor zatížení uzlů na hranicích podoblastí.

Matice $\boldsymbol{K}^{[bb]}$ je součtem příspěvků z jednotlivých podoblastí

$$\boldsymbol{K}^{[bb]} = \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{K}_j^{[bb]}\ , \tag{2}$$

podobně vektor $\boldsymbol{f}_{[b]}$. V deformační variantě metody konečných prvků jsou matice $\boldsymbol{K}_j^{[ib]}$ a $\boldsymbol{K}_j^{[bi]}$ transponované. Výpočtem Schurových doplňků bloků $\boldsymbol{K}_j^{[ii]}$ vychází výsledná soustava rovnic

$$\left(\boldsymbol{K}^{[bb]} - \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{K}_j^{[bi]} \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]}\right)^{-1} \boldsymbol{K}_j^{[ib]}\right) \boldsymbol{r}_{[b]} = \boldsymbol{f}_{[b]} - \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{K}_j^{[bi]} \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]}\right)^{-1} \boldsymbol{f}_{[i]}^{(j)} , \qquad (3)$$

ve které se vyskytují pouze neznámé na hranicích podoblastí.

Výsledná soustava rovnic si zaslouží pozornost. V některých případech se daří zvolit hranice podoblastí tak, že výsledných neznámých, tj. neznámých na hranicích mezi jednotlivými podoblastmi, je velmi malé množství. V takových případech se vyplatí použít pro řešení nějakou přímou metodu výpočtu, např. $\boldsymbol{LDL}^T$ rozklad. Finitní metoda má svůj velký význam zejména v případě mnoha pravých stran.

Obvykle je ale hraničních neznámých poměrně mnoho a struktura výsledné matice není vhodná pro ukládání skyline, které je spjato s přímými metodami. V matici je stále málo nenulových prvků (matice je stále řídká), ale jsou daleko od diagonály. V takových případech se vyplatí ukládat pouze nenulové prvky matice společně s jejich indexy. Takové ukládání se obvykle označuje jako compressed rows nebo compressed columns. Tím se ale také zúžil výběr metod na iterační [2], [3].

Lze ukázat, že výsledná soustava rovnic je lépe podmíněná než původní soustava. To samo o sobě nestačí a měl by být použit nějaký druh předpodmínění.

3 Dělení oblasti na podoblasti

Z předcházející kapitoly lze usoudit na to, jakým způsobem by měla být původní oblast rozdělena na menší podoblasti. Řadu pravidel lze určit pouhým pohledem na definiční vztahy Schurových doplňků a na rovnici (3). Nicméně rozbor vlastních čísel výsledné soustavy a následný výpočet čísla podmíněnosti vede k určitým úpravám.

V případě tzv. homogenního paralelního počítače, tj. počítače obsahujícího stejné procesory se stejně velkými operačními paměťmi, je třeba dělení provést tak, aby všechny podoblasti byly přibližně stejné, v ideálním případě, aby byly úplně stejné. S výjimkou obdélníkových nebo kvádrových oblastí je ale takový požadavek nereálný. Složitější situace nastává pro tzv. heterogenní paralelní počítače, kterých bude s časem stále přibývat. Je to způsobeno neustálým zvětšováním počtu clusterů, tj. paralelních počítačů, které jsou tvořeny jednotlivými osobními počítači spojenými sítí a vybavenými nějakou vhodnou knihovnou podporující paralelní prostředí. Takové počítače jsou řádově levnější než masivní paralelní stroje. Kromě toho je lze snadno vytvořit ze stávajících osobních počítačů s malou investicí do sítě.

Pro heterogenní počítače by měla být oblast rozdělena na podoblasti v takových poměrech, jako jsou poměry výkonů jednotlivých procesorů. Zjišťování poměrů výkonů procesorů je třeba provést pomocí doplňujících výpočtů.

Na počtu uzlů na jedné podoblasti závisí počet neznámých na procesoru, na počtu prvků na jedné podoblasti závisí pracnost a doba sestavení globálních matic. Je jasné, že pouhá rovnost počtu prvků a počtu uzlů na podoblastech nestačí. Dalším podstatným faktorem je šířka pásu matice podoblasti, která závisí na očíslování neznámých a na tvaru podoblasti. Čím je šířka pásu větší, tím déle trvá eliminace/rozklad matice a tím více paměti je třeba k jejímu uložení. Vhodnou volbou dekompozice lze získat příznivější tvary podoblastí a tím zmenšit šířku pásu.

4 Čísla podmíněnosti matice výsledného problému

Všechny požadavky uvedené v předcházející kapitole se týkají zejména první fáze výpočtu, tj. kondenzace vnitřních neznámých a sestavení matice výsledného problému. V kapitole 2 bylo uvedeno, že řešení výsledné soustavy rovnic (3) se provádí nejčastěji iteračními metodami. Rychlost jejich konvergence se obvykle odhaduje z vlastních čísel. Výpočet vlastních čísel je náročnější než řešení samotné soustavy a při řešení konkrétních problémů se pochopitelně neprovádí. Tento článek se věnuje vlivu různých tvarů podoblastí na efektivitu celého výpočtu.

Table 1: Čísla podmíněnosti a počty iterací.

počty podobl.	počty prvků na podoblastech	největší vlastní číslo	nejmenší vlastní číslo	číslo podmíněnosti	počet iterací
4x4	12x12	30.514	0.00891	3390.960	94
8x2	6x24	30.594	0.00758	4034.175	100
2x8	24x6	30.069	0.00756	3977.871	100
16x1	3x48	30.380	0.00488	6215.673	124
1x16	48x3	30.489	0.00485	6283.377	121

Table 2: Čísla podmíněnosti a počty iterací.

počty podobl.	počty prvků na podoblastech	největší vlastní číslo	nejmenší vlastní číslo	číslo podmíněnosti	počet iterací
4x4	48x48	30.07287	0.002200	13668.231	194
8x2	24x96	30.07070	0.001858	16177.247	208
2x8	96x24	30.07261	0.001858	16238.884	205
1x16	192x12	30.07261	0.001191	25245.413	240
16x1	12x192	30.07129	0.001203	24999.466	249

Odhady čísel podmíněnosti a počtu iterací lze pro jednoduché oblasti a problémy zkonstruovat bez numerického výpočtu vlastních čísel. Pro složitější tvary oblastí s uvažováním heterogenního materiálu je třeba vlastní čísla vypočítat. V této kapitole je studována čtvercová oblast, protože nabízí mnoho možností dekompozice na podoblasti. Kromě toho i s velmi propracovanými metodami přečíslování vedou čtvercové oblasti na velkou šířku pásu. Některé dekompozice jsou uvedeny na obrázku 1.

V tabulkách 1 a 2 jsou uvedena čísla podmíněnosti a počty iterací při řešení výsledného problému pro dvě různě husté sítě prvků. Celkový počet prvků a uzlů na celé oblasti byl konstantní. Z tabulek je vidět pouze dvojnásobný nárůst čísel podmíněnosti a počtů iterací pro oblasti s poměrem stran 1/16 oproti čtvercovým podoblastem. V tabulce 3 jsou uvedeny počty prvků v maticích a počty neznámých. Pro dělení oblasti na 4x4 a 8x2 podoblasti jsou nároky prakticky stejné. Z výše uvedených dat je vidět, že dělení na 4x4 a 8x2 podoblasti je téměř shodné jak co do nároků na paměť, tak co do počtu iterací. To je dobrá zpráva pro tvůrce generátorů sítí, protože přísné požadavky na tvary podoblastí by byly těžko splnitelné.

Až dosud byl uvažován homogenní materiál. V praxi, zejména stavební, se ovšem téměř vždy setkáváme s heterogenitou. Jsou-li moduly pružnosti na sousedních prvcích v poměru 1/10, konvergence iterační metody řešící výslednou soustavu rovnic se zhorší tak, jak je uvedeno v tabulce 4. Síť prvků je totožná se sítí uvedenou v tabulce 2. Z posledních sloupců je vidět prakticky dvojnásobný nárůst počtu iterací.

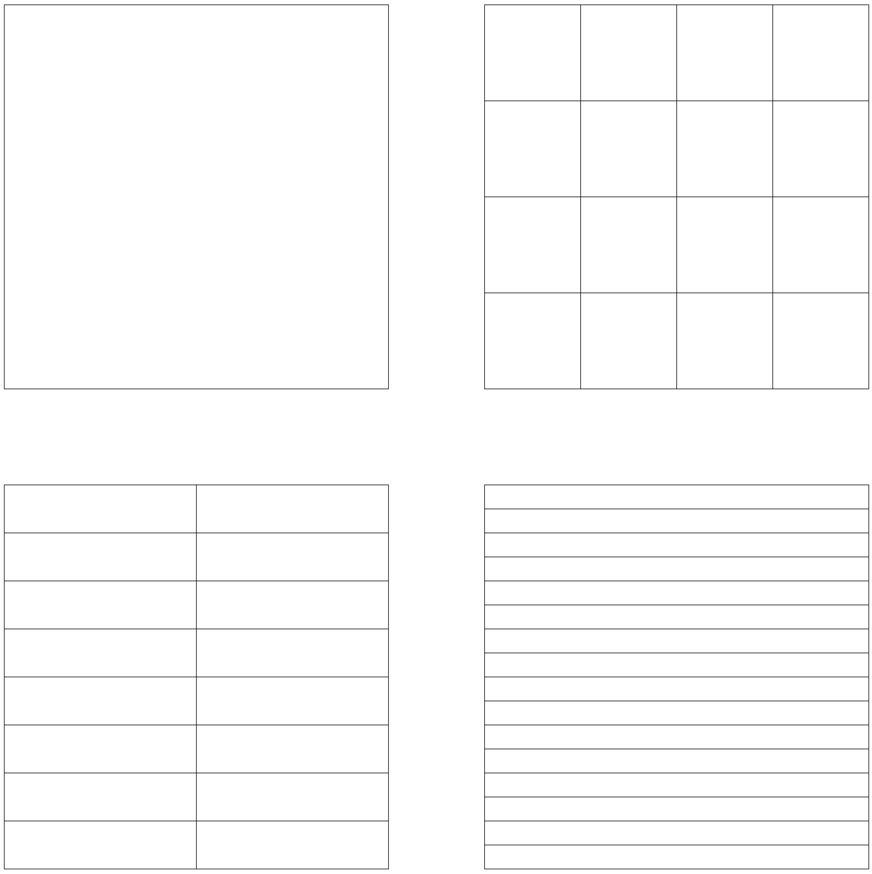

Figure 1: Ukázky některých dělení oblasti.

Table 3: Nároky na paměť.

počty podoblastí	počty prvků na podoblastech	počet prvků v matici	počet neznámých na podobl.	počet hran. nezn. na podobl.
4x4	48x48	1 361 955	4802	384
8x2	24x96	1 991 595	4850	480
2x8	96x24	1 396 011	4850	480
1x16	192x12	2 041 348	4992	790
16x1	12x192	3 539 271	5018	816

5 Závěr

Z rozborů jednotlivých tvarů podoblastí a z našich předcházejících zkušeností vyplývají tyto požadavky pro využití homogenního clusteru:

- stejný počet uzlů na všech podoblastech - zajistí stejný počet neznámých na procesorech,
- stejný počet prvků na všech podoblastech - zajistí stejnou pracnost při sestavování matice
- vhodný tvar podoblastí - zmenší se šířky pásů matic, zmenší se nároky na paměť,
- malý počet neznámých na hranicích podoblastí - z počtu neznámých na hranicích se odvozuje rozměr výsledného problému.

Table 4: Čísla podmíněnosti a počty iterací. Nehomogenní materiál.

počty podobl.	počty prvků na podoblastech	největší vlastní číslo	nejmenší vlastní číslo	číslo podmíněnosti	počet iterací
4x4	48x48	175.325	0.006457	27150.618	374
8x2	24x96	175.391	0.005409	32424.523	400
2x8	96x24	163.256	0.005428	30075.488	408
1x16	192x12	163.444	0.003476	47011.661	480
16x1	12x192	157.581	0.003447	45706.433	471

V případě heterogenního clusteru je třeba pravidla upravit podle poměrů výkonů a velikostí pamětí jednotlivých procesorů.

Získaná vlastní čísla a čísla podmíněnosti pro čtvercové a obdélníkové podoblasti vedou k závěru, že tvar podoblastí má zejména vliv na šířku pásu matic. Vliv na počty iterací je slabší a lze ho do jisté míry kompenzovat vhodným předpodmíněním.

References

[1] C. Farhat and F. X. Roux. A Method of Finite Element Tearing and Interconnecting and its Parallel Solution Algorithm. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **32**, 1205–1227, (1991).

[2] A. Greenbaum. *Iterative Methods for Solving Linear Systems.* SIAM frontiers in applied mathematics, Philadelphia, (1997).

[3] W. Hackbusch. *Iterative Solution of Large Sparse Systems of Equations.* Springer-Verlag, Applied Mathematical Sciences, Vol. 95, (1994).

[4] J. Kruis and Z. Bittnar. The Application of Parallel Technologies for the Implicit Solution of Large Linear Systems in Structural Mechanics. *CTU Reports*, Vol. **3**, No. **4**, 161-175, (1999).

[5] J. Kruis and Z. Bittnar. Domain Decomposition Methods in Structural Mechanics. J. Náprstek et al., editors, *Engineering mechanics 2000,* pages 105–110, Svratka. Ústav termomechaniky AV ČR, (2000).

[6] J. Kruis and K. Matouš. Applying FETI to Composite Laminated Plates. I. Marek editor, *Proceeding of the XIIIth Summer School Software and Algorithms of Num. Math.*, pages 173-189, Nečtiny. MFF UK, (1999).

[7] J. Kruis and K. Matouš. Domain Decomposition of Composite Laminated Plates. B. H. V. Topping editor, *Developments in Engineering Computational Technology,* pages 183–189, Edinburgh. Civil-Comp Press, (2000).

[8] J. Kruis and Z. Bittnar. Advantages of Parallel Algorithms in Structural Mechanics. In B. H. V. Topping editor, *Developments in Engineering Computational Technology*, pages 219–227, Edinburgh. Civil-Comp Press, (2000).

[9] M. Papadrakakis. *Solving Large-Scale Problems in Mechanics, The Development and Application of Computational Solution Methods.* John Wiley & sons, (1993).

[10] M. Papadrakakis. *Parallel Solution Methods in Computational Mechanics.* John Wiley & sons, (1997).