

Abstracts of Dissertations

Institute of Information and
Communication Technologies

BULGARIAN ACADEMY OF
SCIENCES



3 / 2015



PARALLEL ITERATIVE
METHODS FOR
NONCONFORMING FINITE
ELEMENTS

Yavor Vutov

ПАРАЛЕЛНИ ИТЕРАЦИОННИ
МЕТОДИ ЗА НЕКОНФОРМНИ
КРАЙНИ ЕЛЕМЕНТИ

Явор Вутов

Автореферати на дисертации

Институт по информационни и
комуникационни технологии

БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ

ISSN: 1314-6351

Поредицата „Авториферати на дисертации на Института по информационни и комуникационни технологии при Българската академия на науките“ представя в електронен формат авториферати на дисертации за получаване на научната степен „Доктор на науките“ или на образователната и научната степен „Доктор“, защитени в Института по информационни и комуникационни технологии при Българската академия на науките. Представените трудове отразяват нови научни и научно-приложни приноси в редица области на информационните и комуникационните технологии като Компютърни мрежи и архитектури, Паралелни алгоритми, Научни пресмятания, Лингвистично моделиране, Математически методи за обработка на сензорна информация, Информационни технологии в сигурността, Технологии за управление и обработка на знания, Грид-технологии и приложения, Оптимизация и вземане на решения, Обработка на сигнали и разпознаване на образи, Интелигентни системи, Информационни процеси и системи, Вградени интелигентни технологии, Йерархични системи, Комуникационни системи и услуги и др.

Редактори

Генадий Агре

Институт по информационни и комуникационни технологии, Българска академия на науките
E-mail: agre@iinf.bas.bg

Райна Георгиева

Институт по информационни и комуникационни технологии, Българска академия на науките
E-mail: rayna@parallel.bas.bg

Даниела Борисова

Институт по информационни и комуникационни технологии, Българска академия на науките
E-mail: dborissova@iit.bas.bg

Настоящото издание е обект на авторско право. Всички права са запазени при превод, разпечатване, използване на илюстрации, цитирания, разпространение, възпроизвеждане на микрофилми или по други начини, както и съхранение в бази от данни на всички или част от материалите в настоящето издание. Копирането на изданието или на част от съдържанието му е разрешено само със съгласието на авторите и/или редакторите

*The series **Abstracts of Dissertations of the Institute of Information and Communication Technologies at the Bulgarian Academy of Sciences** presents in an electronic format the abstracts of Doctor of Sciences and PhD dissertations defended in the Institute of Information and Communication Technologies at the Bulgarian Academy of Sciences. The studies provide new original results in such areas of Information and Communication Technologies as Computer Networks and Architectures, Parallel Algorithms, Scientific Computations, Linguistic Modelling, Mathematical Methods for Sensor Data Processing, Information Technologies for Security, Technologies for Knowledge management and processing, Grid Technologies and Applications, Optimization and Decision Making, Signal Processing and Pattern Recognition, Information Processing and Systems, Intelligent Systems, Embedded Intelligent Technologies, Hierarchical Systems, Communication Systems and Services, etc.*

Editors

Gennady Agre

Institute of Information and Communication Technologies, Bulgarian Academy of Sciences
E-mail: agre@iinf.bas.bg

Rayna Georgieva

Institute of Information and Communication Technologies, Bulgarian Academy of Sciences
E-mail: rayna@parallel.bas.bg

Daniela Borissova

Institute of Information and Communication Technologies, Bulgarian Academy of Sciences
E-mail: dborissova@iit.bas.bg

This work is subjected to copyright. All rights are reserved, whether the whole or part of the materials is concerned, specifically the rights of translation, reprinting, re-use of illustrations, recitation, broadcasting, reproduction on microfilms or in other ways, and storage in data banks. Duplication of this work or part thereof is only permitted under the provisions of the authors and/or editor.



BULGARIAN ACADEMY OF SCIENCES

Abstract of PhD Thesis

PARALLEL ITERATIVE METHODS FOR NONCONFORMING FINITE ELEMENTS

Yavor Ivanov Vutov

Supervisor: Prof. Svetozar Margenov

Approved by Supervising Committee:

Prof. Michail Todorov

Prof. Emil Manoah

Assoc. Prof. Krasimir Georgiev

Assoc. Prof. Ivan Bajlekov

Prof. Svetozar Margenov



**INSTITUTE OF INFORMATION AND
COMMUNICATION TECHNOLOGIES**
Department of Scientific Computations

The PhD thesis was discussed and allowed to be defended during an extended session of the Department of Scientific Computations at IICT-BAS, which had been held on June 25, 2015.

The Defence of the PhD thesis had been held on September 30, 2015 at 14:00 in room 218, Block 25A, IICT-BAS.

The full volume of the dissertation is 113 pages. It consists of an introduction and five chapters (p. 7-105). The list of references contains 95 titles (p. 107-113). The text of the dissertation includes 29 tables and 25 figures.

Keywords: Finite Element Method, Preconditioned conjugate gradient, MIC(0), Parallel algorithms, Linear Elasticity, Numerical homogenization.

Introduction

Mathematical modeling is a complex interdisciplinary process. Its purpose is to study, describe, and understand various processes from the surrounding world. It consists of:

- Gathering knowledge via observations and experiments;
- Determination of the factors and quantities in the processes;
- Expressing the quantitative and qualitative relationships, formulating physical and mathematical laws.

Once derived, these laws can be applied in other situations. When the mathematical models are implemented in computer programs, which perform simulations of the physical processes we talk about computer modeling. It helps conducting novel, virtual experiments and also gives better understanding of the physically performed ones. Computer modeling is an indispensable tool in variety of situations:

- When the scale of the real experiment (time or space scale) does not allow for its conduction. For example gravity simulation of a galaxy;
- When the experiment is prohibitively expensive;
- When high accuracy of the measured quantities is desired. Most of the physical quantities cannot be measured directly and often the measurements cannot be localized.

The mathematical models for the physical processes are usually described as integral or differential equations. In some ideal cases, and for simple geometries, they can be solved analytically. However, this is often impossible for the real problems. Then we resort to numerical simulations.

When solving differential equations numerically, the first step is *discretization*. This is the approximation of the continuous problem with a discrete one. The two fundamental methods for the discretization of differential equations are the Finite Element Method (FEM) and the Finite Difference Method [16]. Application of both methods leads to a system of linear algebraic equations in the form:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

The matrix A in this system is usually sparse. And the system size tends to be big (with hundreds of millions of unknowns). The solvers of linear algebraic systems can be divided in two groups—direct and iterative methods [6, 19–21]. The direct methods give the exact solution (under the assumption of exact arithmetics), and the number of the operations is bounded and a priori known. Such methods are:

- The Gauss method;

- The Cholesky method;
- The LU decomposition;
- The Nested Dissections method [7];

The iterative methods find the solution as a sequence of improving approximations. Each new approximation is computed from one or more of the previous approximations. The computational complexity and the required random access memory (RAM) of several direct and iterative methods are compared in Table 1. The presented results are for linear systems obtained after the discretization of a second order boundary value problems.

Table 1: Number of operations and the required RAM for various methods for the solution of an $N \times N$ linear algebraic system, obtained after the discretization of a second order boundary value problem.

Method	Dimension	Operations	RAM
Gauss	2D, 3D	$O(N^3)$	$O(N^2)$
Cholesky method	2D	$O(N^2)$	$O(N^{3/2})$
Cholesky method	3D	$O(N^{13/9})$	$O(N^{5/3})$
Nested Dissections	2D	$O(N^{3/2})$	$O(N \log N)$
Nested Dissections	3D	$O(N^2)$	$O(N^{4/3})$
Conjugate Gradient (CG)	2D	$O(N^{3/2})$	$O(N)$
CG	3D	$O(N^{4/3})$	$O(N)$
CG with MIC(0) preconditioner	2D	$O(N^{5/4})$	$O(N)$
CG with MIC(0) preconditioner	3D	$O(N^{7/6})$	$O(N)$
CG with multigrid preconditioner	2D,3D	$O(N)$	$O(N)$
CG with multilevel preconditioner	2D,3D	$O(N)$	$O(N)$

For these types of problems it is clearly seen that the Conjugate Gradient (CG) based methods have clear advantage over the direct methods, both in terms of the number of operations and the amount of required RAM. Their convergence rate depends of the condition number $\kappa(A)$ of the matrix A . It is defined as

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

for some matrix norm $\|\cdot\|$. When the norm $\|\cdot\|$ is the Euclidian norm and the matrix A is symmetric and positive definite, then the condition number can be expressed with the maximal and minimal eigenvalues λ_N and λ_1 of the matrix A :

$$\kappa(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_N}{\lambda_1}.$$

This is the so called spectral condition number of A . It is known [2] that the number of iterations until convergence is proportional to the square root of the spectral condition number.

For improved convergence, preconditioning is required. For even faster solution, parallel computers and algorithms can be used. A parallel preconditioner based on the incomplete Cholesky factorization MIC(0) is developed in this work. The objectives of the thesis are

- Development and study of a parallel MIC(0) preconditioner for 3D elliptic boundary value problems, discretized with Rannacher–Turek finite elements;
- Development and study of a parallel block MIC(0) preconditioner based on displacement decomposition for the Lamé system of equations.
- Development and study of a parallel algorithm for numerical homogenization of voxel structures.

Methodology

Central topic of this thesis is developing of efficient parallel solution methods for linear systems of equations. This required the study of the relative condition number for the proposed preconditioners. Of great importance is also the parallel efficiency. Estimates for the number of operations and for the parallel times are obtained. Efficient RAM usage has also been an important issue.

List of publications

This thesis is based on results in these publications [1, 5, 8–10, 12–15, 17, 18]:

- Y. Vutov. Parallel incomplete factorization of 3D NC FEM elliptic systems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 4310*, 114–121. Springer-Verlag, 2007
- I. Lirkov and Y. Vutov. Comparative analysis of high performance solvers for 3D elliptic problems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 483–492, 2007
- P. Arbenz, S. Margenov, and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning of 3D elliptic problems discretized by Rannacher–Turek finite elements. *Computers and Mathematics with Applications*, 55(10):2197–2211, 2008
- I. Georgiev, E. Ivanov, S. Margenov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of epoxy-clay composite materials. *Numerical Methods and Applications, LNCS 8962*, 130–137. Springer Berlin Heidelberg, 2015
- S. Margenov, S. Stoykov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of heterogeneous anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS*, 347–354. Springer Berlin Heidelberg, 2014

- S. Margenov and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning for numerical upscaling of anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 5910*, 805–812. Springer, 2010
- I. Lirkov, Y. Vutov, M. Paprzycki, and M. Ganzha. Parallel performance evaluation of MIC(0) preconditioning algorithm for voxel μ FE simulation. *Parallel Processing and Applied Mathematics, LNCS 6068*, 135–144. Springer, 2010
- S. Margenov and Y. Vutov. Parallel PCG algorithms for voxel FEM elasticity systems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 517–526, 2007
- Y. Vutov. Parallel DD-MIC(0) Preconditioning of Nonconforming Rotated Trilinear FEM Elasticity Systems. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 4818*, 745–572. Springer-Verlag, 2008
- I. Lirkov, Y. Vutov, M. Ganzha, and M. Paprzycki. Comparative Analysis of High Performance Solvers for 3D Elasticity Problems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 5434*, 392–399. Springer-Verlag, 2009
- S. Margenov and Y. Vutov. Preconditioning of voxel FEM elliptic systems. *TASK Quarterly*, 11(1-2):117–128, 2007

The thesis consists of an introduction and four chapters.

1 General Information

In this chapter basic information about the main mathematical tools used is presented, this includes:

- The finite element method;
- Nonconforming Rannacher–Turek elements;
- The preconditioned conjugate gradient method
- The Lamé systems of linear elasticity
- Modified Incomplete Cholesky factorization MIC(0)
- The algebraic multigrid method.

Some remarks about the actual computer implementation are given at the end of the chapter.

2 Parallel MIC(0) preconditioner for elliptic problems

In this chapter two parallel preconditioners, constructed on an element matrix level are developed. From Figure 1 it can be seen that the stiffness matrix A has block structure with some diagonal blocks on the diagonal. The solution of

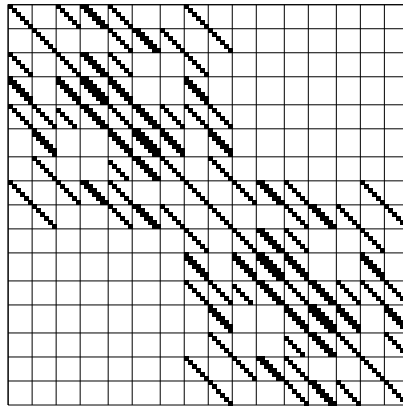


Figure 1: Structure of the nonzero elements of matrix A .

a triangular system of equations, that possesses similar block structure with all diagonal blocks being diagonal matrices, can be parallelized—all the unknowns can be found simultaneously within each block. Thus, we propose two approximations of matrix A constructed on the element level.

Following the standard FEM assembling procedure we write A in the form

$$A = \sum_{e \in \mathcal{T}} T_e^T A_e T_e, \quad (2.1)$$

where A_e is the element stiffness matrix, T_e stands for the restriction mapping of the global vector of unknowns to the local one corresponding to the current element e . The matrix A_e is dense and can be written in the form

$$A_e = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{bmatrix}.$$

We use the following lemma for the construction of the preconditioners

Lemma 2.1. *Let us introduce the auxiliary global matrix B in the form*

$$B = \sum_{e \in \mathcal{T}} \lambda_e^{(1)} T_e^T B_e T_e, \quad (2.2)$$

where B_e is a symmetric positive semidefinite matrix with nonpositive offdiagonal entries such that $B_e \mathbf{e} = A_e \mathbf{e}$, $\mathbf{e}^T = (1, 1, 1, 1, 1, 1)$, and where $\{\lambda_e^{(i)}\}_{i=1}^5$ are the nontrivial eigenvalues of $B_e^{-1}A_e$ in ascending order. Then

- (i) the matrix B satisfies the conditions for a stable MIC(0) factorization, and
- (ii) the local condition number analysis is applicable:

$$\kappa(B^{-1}A) \leq \max_e \kappa(B_e^{-1}A_e).$$

Now we will introduce the structure of two variants for local approximations B_e under the assumption that the conditions of Lemma 2.1 are satisfied. They will later be referred to as Variant B1 and Variant B2.

Variant B1	Variant B2
$B_e = \begin{bmatrix} b_{11} & & & & & \\ & b_{22} & & & & \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & & & \\ b_{41} & b_{42} & & b_{44} & & \\ b_{51} & b_{52} & b_{53} & b_{54} & b_{55} & \\ b_{61} & b_{62} & b_{63} & b_{64} & & b_{66} \end{bmatrix}$	$B_e = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & & & \\ b_{41} & b_{42} & & b_{44} & & \\ b_{51} & b_{52} & & & b_{55} & \\ b_{61} & b_{62} & & & & b_{66} \end{bmatrix}$

The definitions of the introduced sparse approximations B_e correspond to the local numbering shown in Fig. 2. Here the dashed lines represent the connectivity pattern of Variant B1 (left) and Variant B2 (right). Notice that the condition $B_e \mathbf{e} = A_e \mathbf{e}$ prevents from choosing a diagonal B_e .

At this point we introduce the preconditioner \mathcal{C} of A which is defined as the MIC(0) factorization of B , that is,

$$\mathcal{C} = \mathcal{C}_{\text{MIC}(0)}(B).$$

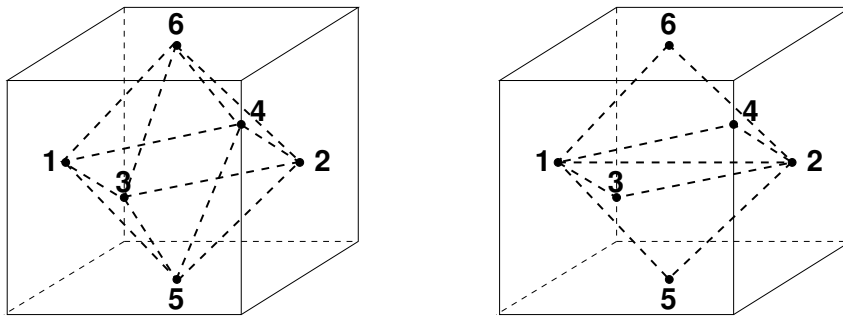


Figure 2: Node numbering of a rotated trilinear hexahedral element and connectivity pattern of B_e .

On Figure 3 the structures of the matrices B in both variants are shown. We have proven the following theorem

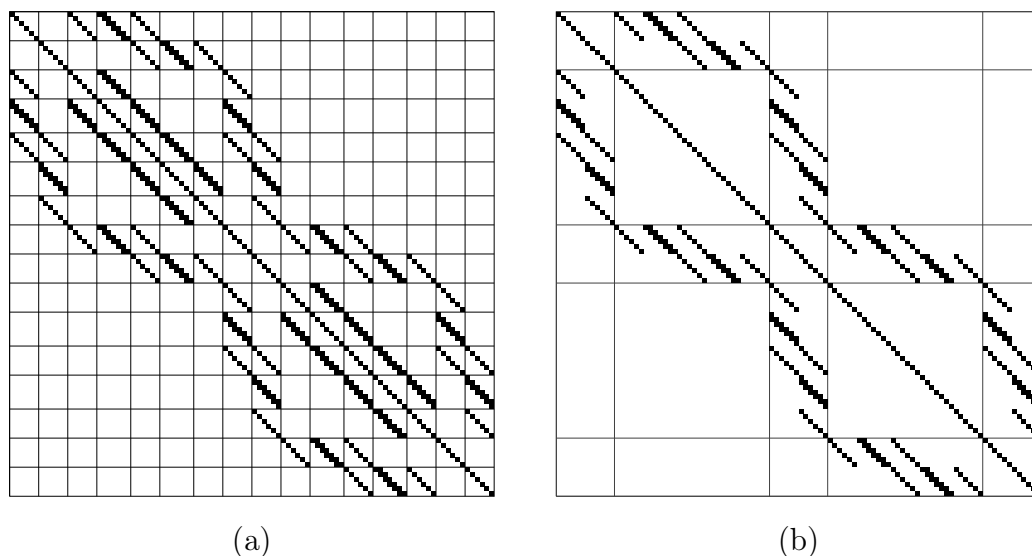


Figure 3: Nonzero pattern of matrices B : (a) Variant 1; (b) Variant 2.

Theorem 2.1. *The following estimates hold for both Variant 1 and Variant 2 of the approximation B , where MP and MV superscripts denote mid point and mean value interpolation conditions for the Rannacher-Turek elements, respectively:*

$$\kappa \left((B^{MP})^{-1} A^{MP} \right) \leq 3, \quad \kappa \left((B^{MV})^{-1} A^{MV} \right) \leq 6,$$

These bounds are uniform with respect to the mesh size h as well as to possible jumps of the coefficients.

Estimates for the parallel times are derived.

In Table 2 and Table 3 the results from numerical experiments are presented. There p denotes number of processors, n is the mesh size parameter, N_{it} is the number of iterations, T_p – the computational time on p processors, $S_p = T_1/T_p$ is the parallel speedup, and $E_p = S_p/p$ is the parallel efficiency. The experiments are performed on three different parallel computers C1, C2, and C3.

It can be seen from the tables that good speedups are obtained either for small number of processors, or for big problems. As expected, the speedups for the Variant 2 are much better, than those for the Variant 1 because of the decreased number of communication steps.

The obtained parallel times are with agreement with the derived estimates.

3 Parallel preconditioner for the Lamé's system of equations

After the discretization of the Lamé's system of equations, using the so called *reduced and selective integration* (RSI) approach[11] we obtain the following linear system of equations for the unknown displacements with the symmetric and positive

Table 2: Variant 1

p	$\frac{n}{N_{it}}$	C1			C2			C3		
		T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p
1		1.08			1.28			0.70		
2	<u>31</u>	0.94	1.15	0.57	0.93	1.38	0.69	0.65	1.07	0.54
4	22	0.91	1.19	0.30	0.83	1.55	0.39	0.45	1.57	0.39
8		1.14	0.95	0.12	1.12	1.15	0.14	0.37	1.90	0.24
16		1.28	0.84	0.05	1.11	1.15	0.07	0.37	1.89	0.11
1		9.87			12.90			7.07		
2	<u>63</u>	6.98	1.41	0.71	8.56	1.51	0.75	4.44	1.59	0.79
4	31	5.91	1.67	0.42	6.39	2.02	0.50	3.54	2.00	0.50
8		5.46	1.81	0.23	7.12	1.81	0.23	2.77	2.55	0.32
16		5.83	1.69	0.11	11.9	1.08	0.07	2.40	2.94	0.18
1		95.3			134.2			78.1		
2	<u>127</u>	63.2	1.51	0.75	84.2	1.59	0.80	43.4	1.80	0.90
4	44	48.5	1.96	0.49	54.2	2.47	0.62	29.2	2.67	0.66
8		36.9	2.59	0.32	45.0	2.98	0.37	20.3	3.84	0.48
16		34.2	2.79	0.17	74.8	1.79	0.11	16.2	4.83	0.30
1		1147			1474 ¹			859 ¹		
2	<u>255</u>	659	1.74	0.87						
4	64	361	3.18	0.79	551	2.67 ¹	0.67 ¹	277	3.10 ¹	0.78 ¹
8		287	4.00	0.50	432	3.41 ¹	0.42 ¹	173	4.97 ¹	0.62 ¹
16		264	4.34	0.27	397	3.71 ¹	0.23 ¹	123	6.98 ¹	0.43 ¹

¹Estimated values

definite matrix:

$$\begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_h^1 \\ \mathbf{u}_h^2 \\ \mathbf{u}_h^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_h^1 \\ \mathbf{f}_h^2 \\ \mathbf{f}_h^3 \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Here, the matrix K is written in block form: the blocks \mathbf{u}_h^i correspond to the displacements in the i -th direction, $i = 1, 2, 3$.

We write the displacement decomposition (DD) preconditioner in the following form:

$$C_{DD}(K) = \begin{bmatrix} A & & \\ & A & \\ & & A \end{bmatrix}. \quad (3.4)$$

Here with A is denoted the matrix corresponding to the following bilinear form:

$$a(u^h, v^h) = \sum_{e \in \Omega^h} \int_e E_e \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\partial u^h}{\partial x_i} \frac{\partial v^h}{\partial x_i} \right) de. \quad (3.5)$$

Table 3: Variant 2

p	$\frac{n}{N_{it}}$	C1			C2			C3		
		T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p
1		0.60			1.00			0.65		
2	<u>31</u>	0.30	2.00	1.00	0.65	1.54	0.77	0.39	1.68	0.84
4	22	0.20	3.05	0.76	0.44	2.27	0.57	0.27	2.37	0.59
8		0.17	3.58	0.45	0.31	3.29	0.41	0.16	4.02	0.50
16		0.08	7.09	0.44	0.27	3.65	0.23	0.11	5.78	0.36
1		6.03			11.14			7.48		
2	<u>63</u>	3.09	1.95	0.97	6.67	1.67	0.83	3.88	1.92	0.96
4	31	1.68	3.58	0.89	3.97	2.80	0.70	2.35	3.18	0.79
8		0.94	6.42	0.80	2.58	4.32	0.54	1.49	5.00	0.63
16		0.57	10.57	0.66	2.55	4.36	0.27	1.09	6.87	0.42
1		74.0			127.0			95.9		
2	<u>127</u>	38.1	1.94	0.97	74.5	1.70	0.85	50.0	1.92	0.96
4	44	20.8	3.56	0.89	41.1	3.10	0.77	25.0	3.83	0.96
8		10.7	6.94	0.86	23.9	5.31	0.66	13.8	6.97	0.87
16		5.63	13.14	0.82	18.8	6.74	0.42	8.6	11.11	0.69
1		910			1397 ¹			1055 ¹		
2	<u>255</u>	458	1.99	0.99						
4	61	206	4.4	1.10	470	2.97 ¹	0.74 ¹	291	3.62 ¹	0.90 ¹
8		111	8.21	1.02	253	5.52 ¹	0.69 ¹	154	6.85 ¹	0.85 ¹
16		61	14.88	0.92	149	9.38 ¹	0.58 ¹	85	12.41 ¹	0.77 ¹

¹Estimated values

With E_e is denoted the Young modulus for the material in each finite element e . For broad specter of problems, the following estimate holds [3]:

$$\kappa(C_{DD}^{-1}K) = O((1 - 2\nu)^{-1}), \quad (3.6)$$

where ν denotes the Poisson ration.

For the parallel solution of the system (3.3) we use (3.4), and the developed in Chapter 2 parallel algorithm for MIC(0) preconditioning of the problem (3.5):

$$C_{DDMIC(0)}(K) = \begin{bmatrix} C_{MIC(0)}(B_{opt}^v) & & \\ & C_{MIC(0)}(B_{opt}^v) & \\ & & C_{MIC(0)}(B_{opt}^v) \end{bmatrix}, v = 1, 2. \quad (3.7)$$

Here the matrix B_{opt}^1 corresponds to Variant 1, and matrix B_{opt}^2 —to Variant 2.

In Table 4 the speedups and parallel efficiencies for both variants of the preconditioner are given. The same 3 parallel systems C1, C2 and C3 were used.

We see that the speedups for fixed n are bigger then the ones for the scalar problem. This is expected, because we solve the three linear systems in (3.7)

Table 4: Parallel speedups and efficiencies

n	p	Вариант 1						Вариант 2					
		C1		C2		C3		C1		C2		C3	
		$S(p)$	$E(p)$	$S(p)$	$E(p)$	$S(p)$	$E(p)$	$S(p)$	$E(p)$	$S(p)$	$E(p)$	$S(p)$	$E(p)$
32	2	1.49	0.74	1.31	0.66	1.77	0.88	1.93	0.96	1.33	0.66	1.97	0.99
	4	1.83	0.45	1.49	0.37	2.40	0.60	3.53	0.88	2.08	0.51	3.25	0.81
	8	2.11	0.26	1.22	0.15	3.34	0.42	5.78	0.72	3.07	0.38	5.20	0.65
	16	1.61	0.10	0.92	0.06	3.22	0.20	9.45	0.59	3.93	0.25	7.63	0.48
64	2	1.68	0.84	1.38	0.69	2.02	1.01	2.02	1.01	1.35	0.68	1.77	0.88
	4	2.46	0.61	1.98	0.49	3.17	0.79	3.92	0.98	2.49	0.62	3.50	0.87
	8	3.27	0.41	1.93	0.24	4.26	0.53	7.38	0.92	4.21	0.52	5.91	0.73
	16	3.78	0.23	2.06	0.13	6.03	0.38	12.83	0.81	6.53	0.40	8.64	0.54
128	2	1.82	0.91	1.51	0.76	1.56	0.78	2.00	1.00	1.49	0.74	1.93	0.96
	4	2.96	0.74	2.40	0.60	2.73	0.68	3.90	0.98	2.54	0.63	3.72	0.93
	8	4.50	0.56	2.70	0.34	5.34	0.67	7.33	0.92	4.59	0.57	7.30	0.91
	16	5.83	0.36	3.64	0.23	7.64	0.48	12.73	0.80	7.51	0.47	12.21	0.76

simultaneously—with the same number of communication steps as in the scalar case.

4 Applications

In this chapter several applications of the algorithms from Chapter 3 are shown. On Figure 4 the displacements, strains and stresses obtained from the computer simulation of pilot fundament loading are shown.

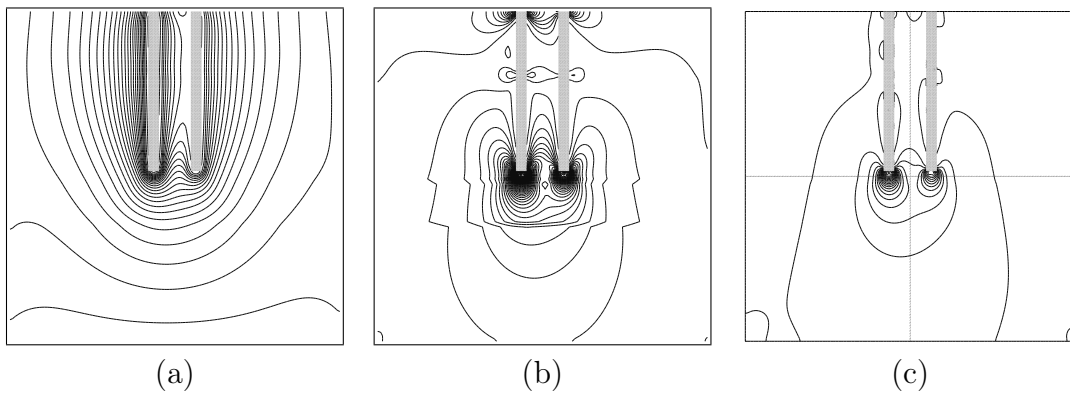


Figure 4: (a) Vertical displacements; (b) Vertical strains; (c) Vertical stresses

On Figure 5 the stresses from the simulation of trabecular bone specimens loading are shown.

In this chapter numerical homogenization procedure is also developed. It computes the homogenized elasticity tensor for a given specimen. The homogenization procedure is constructed under the assumption of periodic microstructure. This implies the use of periodic boundary conditions, which in turn leads to the solution of systems with positive semi-definite matrices. We have modified the algorithm from

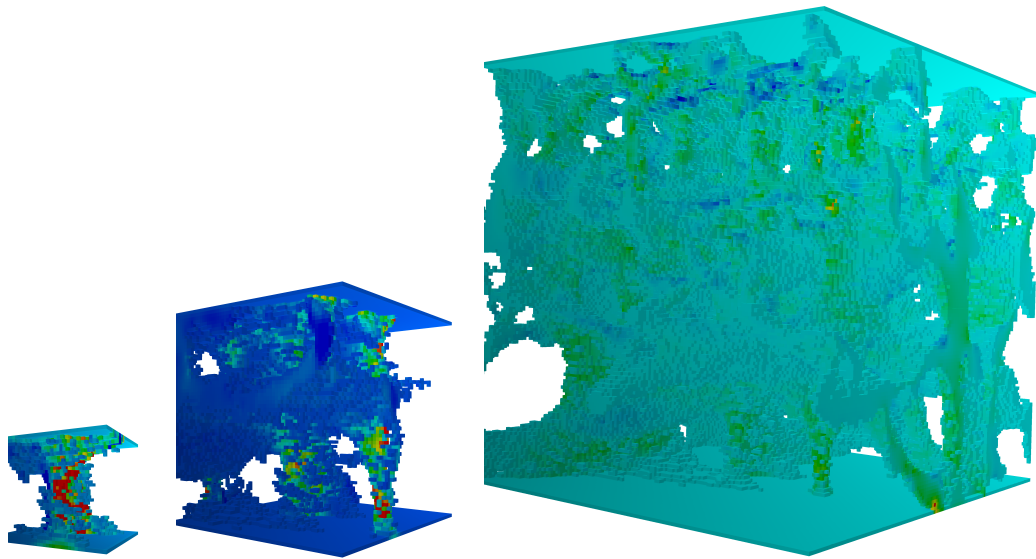


Figure 5: Vertical stresses: $32 \times 32 \times 32$ – left, $64 \times 64 \times 64$ – middle, и $128 \times 128 \times 128$ – right

Chapter 3 to work with such matrices. The obtained homogenized tensors are transformed to the coordinate system of the principal directions of anisotropy. We have also compared our homogenization procedure with theoretical estimates for some model problems, and with the results from the commercial software GeoDict[4].

Contribution summary

The contributions of the thesis can be summarized as follows:

- a parallel MIC(0) preconditioner for 3D elliptic boundary value problems, discretized with nonconforming Rannacher-Turek finite elements is developed and studied;
- a parallel block MIC(0) preconditioner, based on displacement decomposition, for the Lamé's system of equations is developed and studied;
- a parallel algorithm for numerical homogenization of composite materials is developed
- Estimates for the convergence speed and for the parallel computational times are derived.
- All proposed algorithms are coded in C++ and series of numerical experiments are performed, which confirm their robustness and efficiency.

References

- [1] P. Arbenz, S. Margenov, and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning of 3D elliptic problems discretized by Rannacher–Turek finite elements. *Computers and Mathematics with Applications*, 55(10):2197–2211, 2008.
- [2] O. Axelsson. *Iterative Solution Methods*. Cambridge University Press, 1996.
- [3] R. Blaheta. Displacement decomposition – incomplete factorization preconditioning techniques for linear elasticity problems. *Numer. Lin. Alg. Appl.*, 1:107–126, 1994.
- [4] Geodict. GeoDict – the Virtual Material Laboratory. <http://geodict.com>, 2014.
- [5] I. Georgiev, E. Ivanov, S. Margenov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of epoxy-clay composite materials. *Numerical Methods and Applications, LNCS 8962*, 130–137. Springer Berlin Heidelberg, 2015.
- [6] D. Kincaid and W. Cheney. *Numerical analysis: mathematics of scientific computing*. Brooks/Cole, 1991.
- [7] R. Lipton, D. Rose, and R. E. Tarjan. Generalized nested dissection. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 16(2):346–358, 1979.
- [8] I. Lirkov and Y. Vutov. Comparative analysis of high performance solvers for 3D elliptic problems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 483–492, 2007.
- [9] I. Lirkov, Y. Vutov, M. Ganzha, and M. Paprzycki. Comparative Analysis of High Performance Solvers for 3D Elasticity Problems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 5434*, 392–399. Springer-Verlag, 2009.
- [10] I. Lirkov, Y. Vutov, M. Paprzycki, and M. Ganzha. Parallel performance evaluation of MIC(0) preconditioning algorithm for voxel μ FE simulation. *Parallel Processing and Applied Mathematics, LNCS 6068*, 135–144. Springer, 2010.
- [11] D. S. Malkus and T. J. R. Hughes. Mixed finite element methods – reduced and selective integration techniques: a unification of concepts. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 63–81, 1990.
- [12] S. Margenov, S. Stoykov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of heterogeneous anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS*, 347–354. Springer Berlin Heidelberg, 2014.
- [13] S. Margenov and Y. Vutov. Parallel PCG algorithms for voxel FEM elasticity systems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 517–526, 2007.
- [14] S. Margenov and Y. Vutov. Preconditioning of voxel FEM elliptic systems. *TASK Quarterly*, 11(1-2):117–128, 2007.

- [15] S. Margenov and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning for numerical upscaling of anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 5910*, 805–812. Springer, 2010.
- [16] A. Quarteroni and A. Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer, 1994.
- [17] Y. Vutov. Parallel incomplete factorization of 3D NC FEM elliptic systems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 4310*, 114–121. Springer-Verlag, 2007.
- [18] Y. Vutov. Parallel DD-MIC(0) Preconditioning of Nonconforming Rotated Trilinear FEM Elasticity Systems. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 4818*, 745–572. Springer-Verlag, 2008.
- [19] Б. Боянов. *Лекции по числени методи*. „Дарба“, София, 1995.
- [20] Бл. Сендов and В. Попов. *Числени методи – втора част*. Наука и изкуство, София, 1978.
- [21] Бл. Сендов and В. Попов. *Числени методи – първа част*. Университетско издателство „Св. Кл. Охридски“, София, 1996.



АВТОРЕФЕРАТ НА ДИСЕРТАЦИЯ

за присъждане на образователна и научна степен “доктор” по научна специалност „Математическо моделиране и приложение на математиката”

Паралелни итерационни методи за неконформни крайни елементи

Явор Иванов Вутов

Ръководител: чл.-кор. Светозар Маргенов

Научно жури:

Проф. Михаил Тодоров

Проф. Емил Маноах

Доц. Красимир Георгиев

Доц. Иван Бажлеков

Чл.-кор. Светозар Маргенов



Обща характеристика на дисертационния труд

Актуалност и съвременно състояние на темата

Математическото моделиране е сложен интердисциплинарен процес, който има за цел изучаването, разбирането и описването на процесите и явленията в заобикалящият ни свят. То включва:

1. Събиране на познание чрез наблюдения и експерименти;
2. Определяне на имащите отношение към разглежданите процеси фактори и величини;
3. Изясняване на количествените връзки между тях, формулирайки физични и математични закони.

Веднъж изведени тези закони биват прилагани и при други ситуации. Когато математическите модели биват реализирани, като компютърни програми, извършващи симулации на различните физични процеси, говорим за *компютърно моделиране*. То ни позволява да извършваме нови, виртуални експерименти и да разбираме по-добре реалните такива. Например при една термосимулация с компютърен експеримент можем да получим топлинното поле във всяка една точка от изследваната област, дори в точки вътрешни за твърди тела. Компютърното моделиране е незаменим инструмент в редица случаи, сред които:

- Мащабите на експеримента, не позволяват провеждането му – например гравитационна симулация на галактика;
- Цената на оборудването и консумативите за извършване на реален експеримент е много голяма;
- Трябва висока точност – количествена, пространствена и времева – на симулираните величини.

Математическите модели на физичните процеси са обикновено интегрални или диференциални уравнения. В някои идеализирани частни случаи и при прости геометрии те могат да се решат аналитично. Това често не е възможно за реални задачи. Тогава се прибегва до тяхното числено решаване. Първа стъпка от численото решение е *дискретизацията*. Това е апроксимацията на непрекъснатата задача с дискретна такава. Основни методи за числено решаване на диференциални уравнения са методът на крайните разлики (МКР) и методът на крайните елементи (МКЕ) [35]. При дискретизация на гранични задачи се получават системи линейни алгебрични уравнения (СЛАУ) в следния вид.

$$Ax = b.$$

Матриците в тези системи са *разредени* – броят на ненулевите им елементи на всеки ред е ограничен от константа независеща от размера. Те често са с голяма размерност – достигаща милиони и милиарди неизвестни. Методите за решаване на СЛАУ най-общо се делят на два типа: преки и итерационни [22, 41, 44, 45]. Преките методи дават точно решение (при точна аритметика), като броят на операциите е ограничен и предварително известен. Такива методи са

- Гаусовата елиминация – привеждане на матрицата на системата A в триъгълен вид;
- методът на квадратния корен, известен още като метод на Холецки;
- LU факторизация – преобразуване на матрицата A като произведение на долно- и горнотриъгълни такива;
- метод на вложените сечения [24].

При итерационните методи, решението се търси като последователност от приближения, като всяко следващо приближение се намира от предишните едно или повече приближения. Този процес се повтаря до достигането на определен критерий за сходимост. В Таблица 1 са дадени порядъците на броя на операциите и необходимата памет за различни преки и итерационни методи, като са вписани порядъците на броя на операциите и необходима оперативна памет. Както се вижда итерационните методи базирани на метода на спрегнатия градиент (МСГ), както и многонивовите и мултигрид методи имат явни предимства за този клас задачи пред преките, както по отношение на използваната оперативна памет, така и по броя на операциите им. Тяхната сходимост силно зависи от числото на обусловеност на матрицата A . Число на обусловеност на матрицата A бележим с $\kappa(A)$, като

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

за някоя матрична норма $\|\cdot\|$. Когато нормата $\|\cdot\|$ е Евклидовата, а матрицата A е симетрична и положително определена, тогава числото на обусловеност може да бъде изразено чрез най-голямата λ_N и най-малката λ_1 собствени стойности на матрицата A :

$$\kappa(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_N}{\lambda_1}.$$

Тогаво наричаме $\kappa(A)$ *спектрално число на обусловеност*. В тази работа под число на обусловеност навсякъде разбираме спектралното такова. При метода на спрегнатия градиент броят на итерациите необходим за достигане на зададена точност е пропорционален на квадратен корен от числото на обусловеност $\kappa(A)$. Числото на обусловеност има отношение

Таблица 1: Брой на операциите и необходима оперативна памет за различните методи за решаване СЛАУ със симетрична матрица с размери $N \times N$, получена при решаване на гранична елиптична задача от втори ред

Метод	Размерност	Операции	Памет
Гаусова елиминация	2D, 3D	$O(N^3)$	$O(N^2)$
Метод на Холецки	2D	$O(N^2)$	$O(N^{3/2})$
Метод на Холецки	3D	$O(N^{13/9})$	$O(N^{5/3})$
Метод на вложените сечения	2D	$O(N^{3/2})$	$O(N \log N)$
Метод на вложените сечения	3D	$O(N^2)$	$O(N^{4/3})$
МСГ	2D	$O(N^{3/2})$	$O(N)$
МСГ	3D	$O(N^{4/3})$	$O(N)$
МСГ с МИС(0) преобусловител	2D	$O(N^{5/4})$	$O(N)$
МСГ с МИС(0) преобусловител	3D	$O(N^{7/6})$	$O(N)$
МСГ с мултигрид преобусловител	2D,3D	$O(N)$	$O(N)$
МСГ с многонивов преобусловител	2D,3D	$O(N)$	$O(N)$

и към преките методи, където при решаване на системи с лошо обусловените матрици (а това са матриците с голямо число на обусловеност) се получават много големи грешки при закръгления (при работа с числа с крайна точност).

Сходимостта на метода на спрегнатия градиент може да се подобри чрез преобуславяне, което по същество е решаване на друга система с по-добре обусловена матрица B

$$By = c,$$

като търсеното от нас решение x може лесно (и бързо) да бъде намерено от полученото такова y .

Времето за решаването на СЛАУ, след избиране на подходящ метод, може допълнително да бъде намалено, като се използва *паралелизация*. Това означава алгоритъмът да се изпълнява *едновременно* на повече от един процесор. Това може да доведе до ускорение на изпълнението на алгоритмите пропорционално на броя на процесорите. Още повече при съвременните компютърни системи, скоростта на процесорите с общо предназначение, към настоящия момент (2015 година) е спряла да се покачва и паралелизацията е единствения начин за по-бързото изпълнение на даден алгоритъм.

В настоящата работа разработваме паралелен алгоритъм за решаване на тримерни елиптични гранични задачи от втори ред по метода на

спрегнатия градиент с преобусловител модифицирана непълна факторизация на Холецки от нулев ред (МС(0)). Това е логическо продължение на работите на колегите Иван Георгиев, разработил алгоритми за преобуславяне на тримерни задачи, и на Гургана Бенчева, разработила подобен паралелен алгоритъм, но за двумерни задачи [8, 9].

Въпреки неоптималния си характер, показваме, че преобусловителя на базата на непълната факторизация може успешно да се конкурира с модерни, асимптотично оптимални мултигрид алгоритми.

Цели на дисертационния труд

Основните цели на изследванията в дисертацията са:

- Разработване и изследване на паралелен МС(0) преобусловител за тримерни елиптични задачи, дискретизирани чрез неконформни крайни елементи на Ранахер–Турек.
- Разработване и изследване на паралелен блочен МС(0) преобусловител от тип разделяне по преместванията за тримерната система на Ламе и приложението му за числено решаване на еластични задачи върху вокселни структури.
- Разработване и изследване на паралелен алгоритъм за числена хомогенизация на вокселни структури.

Методология на изследванията

При решаването на задачи с голяма размерност от основно значение са времето за изпълнение на програмата и ресурсите, които тя заема – оперативна памет, брой на използваните процесори. Тези величини имат директно отношение, както към цените на компютърните системи, така и към разходите за експлоатацията им (например потребявана електрическа енергия). Специално внимание е обърнато на минималното ползване на оперативна памет – това позволява решаването на по-големи задачи. Времето за изпълнение на програмите също има значение за използването им в практиката. Например, никой не би чакал дни за компютърна проверка на правописа.

От друга страна времето е пропорционално на броя на извършваните операции за даден алгоритъм. За минимизиране на този брой са необходими ефективни алгоритми. Основно средство за решаване на големи СЛАУ е МСГ. Броят на операциите за изпълнение на алгоритъма е пропорционален на корен квадратен на числото на обусловеност на матрицата $\kappa(A)$ и на броя на неизвестните N . В разработените в дисертацията

преобусловители основна цел е създаването на преобусловител C намаляващ относителното число на обусловеност $\kappa(C^{-1}A)$.

Разработените в дисертацията алгоритми на базата на модифицирана непълна факторизация на Холецки имат брой на операциите $O(N^{7/6})$. Времето за изпълнението им са сравнени с мултигрид алгоритъм с оптимална изчислителна сложност $O(N)$.

За паралелните програми времето за изпълнение *силно* зависи и от паралелната ефективност. Тя е оценка за това каква част от процесорното време (на всички процесори) се използва от програмата. Разработените алгоритми имат оптимална асимптотична паралелна ефективност.

Списък на публикациите по дисертацията

Резултати, включени в дисертацията, са публикувани в [1, 16, 26–28, 31–34, 38, 39]:

- Y. Vutov. Parallel incomplete factorization of 3D NC FEM elliptic systems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 4310*, 114–121. Springer-Verlag, 2007
- I. Lirkov and Y. Vutov. Comparative analysis of high performance solvers for 3D elliptic problems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 483–492, 2007
- P. Arbenz, S. Margenov, and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning of 3D elliptic problems discretized by Rannacher–Turek finite elements. *Computers and Mathematics with Applications*, 55(10):2197–2211, 2008
- I. Georgiev, E. Ivanov, S. Margenov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of epoxy-clay composite materials. *Numerical Methods and Applications, LNCS 8962*, 130–137. Springer Berlin Heidelberg, 2015
- S. Margenov, S. Stoykov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of heterogeneous anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS*, 347–354. Springer Berlin Heidelberg, 2014
- S. Margenov and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning for numerical upscaling of anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 5910*, 805–812. Springer, 2010
- I. Lirkov, Y. Vutov, M. Paprzycki, and M. Ganzha. Parallel performance evaluation of MIC(0) preconditioning algorithm for voxel μ FE simulation. *Parallel Processing and Applied Mathematics, LNCS 6068*, 135–144. Springer, 2010

- S. Margenov and Y. Vutov. Parallel PCG algorithms for voxel FEM elasticity systems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 517–526, 2007
- Y. Vutov. Parallel DD-MIC(0) Preconditioning of Nonconforming Rotated Trilinear FEM Elasticity Systems. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 4818*, 745–572. Springer-Verlag, 2008
- I. Lirkov, Y. Vutov, M. Ganzha, and M. Paprzycki. Comparative Analysis of High Performance Solvers for 3D Elasticity Problems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 5434*, 392–399. Springer-Verlag, 2009
- S. Margenov and Y. Vutov. Preconditioning of voxel FEM elliptic systems. *TASK Quarterly*, 11(1-2):117–128, 2007

Апробация на резултатите

Резултати от дисертацията са докладвани на семинари в бившия Институт по Паралелна Обработка на Информацията и на редица международни конференции, сред които

- Large Scale Scientific Computations, Созопол – 2007, 2009, 2011, 2013;
- International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Торун, Полша – 2011
- Enumath, Упсала, Швеция – 2009
- International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications РМАА Нюшател, Швейцария – 2008, Базел, Швейцария – 2010
- Numerical Methods and Applications, Боровец – 2006, 2010, 2014

Участие в научни проекти

Участвал съм в редица научни проекти, сред които:

- ДО02-115/2008 – Център за върхови научни постижения "Супер-компютърни приложения";
- ДО02-147/2008 – Методи, алгоритми и софтуерни средства за задачи с голяма размерност и йерархични компютърни модели;
- ДФНИ И01/5 – Числени методи за свързани системи и компютърно моделиране в биомедицината и екологията;

- BG161PO003-1.1.06-0004-C0001 – ОП „Конкурентоспособност” - Иновативни технологични решения за радиочестотна термоаблация;
- ДЦВП02/1 – Развитие на център за върхови научни постижения "Суперкомпютърни приложения";
- BIS-21++ – Bulgarian IST Centre of Competence in 21 Century;
- PRACE – Partnership for Advanced Computing in Europe.

Съдържание на дисертацията

Дисертацията се състои от увод, четири глави и списък на цитираните източници. Текста е от 113 страници, а изложението е придружено от 25 фигури и 29 таблици. Цитираните източници са 95 на брой. В интернет могат да бъдат намерени текста на дисертацията в електронен формат, изходния код на разработените програми и инструменти, както и други материали по дисертацията [42].

В първа глава са представени общи сведения за методите и алгоритмите използвани в дисертацията. Това включва метода на крайните елементи и крайните елементи на Ранахер-Турек, общи понятия от линейната теория на еластичността, метода на спрегнатия градиент с преобуславяне за решаване на системи линейни алгебрични уравнения, негълната модифицирана факторизация на Холецки $MIC(0)$, алгебричния мултигрид, както и някои бележки върху програмната реализация на разработените алгоритми.

Във втора глава е разработен паралелен алгоритъм за преобуславяне на елиптични задачи, дискретизирани чрез крайни елементи на Ранахер-Турек използвайки $MIC(0)$ факторизация. Изведени са оценки за сходимостта, както и за паралелните времена на алгоритъма.

В трета глава е разработен паралелен алгоритъм за решаване на уравненията на Ламе върху вокселни структури, на базата на разделяне по преместванията и използвайки алгебричен мултигрид или разработения в Глава 2 алгоритъм.

В заключителната четвърта глава са изследвани някои приложения на алгоритмите включващи компютърна симулация на напрегнатото и деформирано състояние на трабекуларна кост и пилотни фундаменти, като и числена хомогенизация за композитни материали.

Съществено място в Глави 2,3 и 4 е отделено и на числените експерименти. Те демонстрират сходимостта, ефективността и приложимостта на разработените методи.

1 Въведение

Тази глава има въвеждащ характер. В нея са включени основни сведения за задачите, методите и алгоритмите засегнати и използвани в дисертацията. Това са: метода на крайните елементи и в частност неконформните крайни елементи на Ранахер и Турек; метода на спрегнатия градиент с преобуславяне; модифицираната непълна факторизация; алгебричния мултигрид, както и формулировка на задачи от линейната еластичност.

Един от съвременните подходи за дискретизация е методът на крайните елементи (МКЕ) [5, 11, 20, 46]. Името на метода произлиза от идеята решенията на диференциалните уравнения да се приближават върху елементи с краен размер, а не безкрайно малки, както при построенията в анализа. При МКЕ решението се търси като линейна комбинация от функции, чийто носител е ограничен върху малък брой (съседни) елементи. Най-често тези функции са на части полиномиални.

Нека разгледаме следната елиптична гранична задача:

$$-\nabla \cdot (a(\mathbf{x})\nabla u(\mathbf{x})) = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1.1a)$$

$$u(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad (1.1b)$$

$$(a(\mathbf{x})\nabla u(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N, \quad (1.1c)$$

където Ω е (ограничена, едносвързана) област в \mathbb{R}^3 , с граница $\partial\Omega$, разделена на две части – Γ_D , с ненулева мярка, където се налагат гранични условия на Дирихле, и Γ_N , където се налагат гранични условия на Нойман, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$, $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, а с $a(\mathbf{x}) = [a_{ij}(\mathbf{x})]_{i,j=1}^3$ е означена симетричната и положително определена коэффициентна матрица от на части гладки функции върху Ω , $a_{ij}(\mathbf{x}) \in C^0$.

Като първа стъпка в МКЕ, диференциалната задача (1.1) се поставя в еквивалентна вариационна формулировка:

$$A(u, v) = B(v) \quad \text{за } \forall v \in \mathcal{V}, \quad \text{където} \quad (1.2a)$$

$$A(u, v) = \int_{\Omega} a(\mathbf{x})\nabla u(\mathbf{x})\nabla v(\mathbf{x})d\mathbf{x} \quad (1.2b)$$

$$B(v) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})v(\mathbf{x})d\mathbf{x} \quad (1.2c)$$

Обикновено при МКЕ се използват еднотипни елементи, например тетраедри или шестостени. Възможни са обаче и постановки с елементи от различен тип, както и елементи с криви стени и ръбове. Ако за дадена триангулация \mathcal{T}_h , никой от върховете не лежи върху стена или ръб на елемент, то такава триангулация наричаме *крайноелементна мрежа* и можем да я използваме в МКЕ. Тук с h е означен максималния диаметър на елементите. Параметърът h е важна характеристика на мрежата.

При метода на крайните елементи се търси приближено решение на задачата (1.2), в подходящо избрано крайномерно пространство \mathcal{V}_h . Нека $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ е базис на пространството \mathcal{V}_h . Тогава всеки две функции v_h и u_h от \mathcal{V}_h могат да се представят по следния начин: $v_h = \sum_{i=1}^N v_i \phi_i$, $u_h = \sum_{i=1}^N u_i \phi_i$. Тук v_i и u_i са реални коефициенти. Така получаваме следната задача: Да се намери функция $u_h \in \mathcal{V}_h$ такава, че

$$\mathcal{A}_h(u_h, v_h) = \mathcal{B}_h(v_h) \quad \text{за } \forall v_h \in \mathcal{V}_h, \quad \text{където} \quad (1.3a)$$

$$\mathcal{A}_h(u_h, v_h) = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_e a(e) \nabla u_h(\mathbf{x}) \nabla v_h(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.3b)$$

$$\mathcal{B}_h(v_h) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) v_h(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.3b)$$

Коеето води до следната система линейни алгебрични уравнения за $\{u_i\}$:

$$\mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{b}, \quad (1.4)$$

където A е матрица $N \times N$ с елементи $a_{ij} = \mathcal{A}_h(\phi_i, \phi_j)$, а \mathbf{B} е вектор стълб с елементи $b_i = \mathcal{B}_h(\phi_j)$.

При МКЕ крайноелементното пространство \mathcal{V}_h , както и самата линейна система 1.4 се конструират на елементно ниво. За целта обикновено се използва референтен елемент. Нека \hat{e} е референтния ни елемент и с L_e е означена матрицата на линейното изображение от глобалния вектор с неизвестни $\{u_i\}_{i=1}^N$ към вектора с неизвестни за текущия елемент e $\hat{u}_{i=1}^{N_e}$. С N_e е означен броя на степените на свобода за елемента e . Нека също, $\{\hat{\phi}_i\}_{i=1}^{N_e}$ е базис в \hat{e} , а с Ψ_e е означено биективното изображение от референтния елемент \hat{e} в текущия e . Тогава можем да запишем матрицата A в следния вид:

$$A = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} L_e^T A_e L_e. \quad (1.5)$$

Матрицата A_e с размери $N_e \times N_e$ се нарича елементна матрица на коравина с елементи $a_{i,j}^e$:

$$a_{i,j}^e = a(e) \int_e \nabla \left(\hat{\phi}_i \circ \Psi_e^{-1} \right) \nabla \left(\hat{\phi}_j \circ \Psi_e^{-1} \right) de.$$

Със символа 'o' е означена суперпозицията на функциите. Обикновено първо се избира типа на референтния елемент, базиса $\{\hat{\phi}_i\}_{i=1}^{N_e}$, а след това с подходящи условия за непрекъснатост се конструира и пространството \mathcal{V}_h . Когато пространството \mathcal{V}_h е подпространство на \mathcal{V} , МКЕ се нарича *конформен*. И обратното, когато \mathcal{V}_h не е подпространство на \mathcal{V} , МКЕ се нарича *неконформен*.

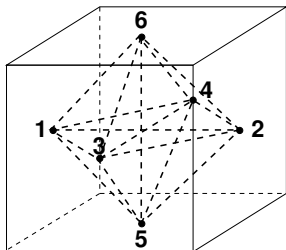
Крайни елементи на Ранахер и Турек

Неконформните крайни елементи базирани на завъртени (дву)трилинейни функции на формата са предложени от Ранахер и Турек [36], като клас от опростени елементи за решаването на задачата на Стокс. Бързо се развиват през последните години методите за ефективно решаване на системи получени чрез неконформни крайни елементи. Това развитие е мотивирано от техните свойства – те са устойчиво средство за дискретизация за лошо обусловени задачи.

Нека T_h е триангулация на Ω съставена от шестостени.

Забележка 1.1. Тук, и по-нататък в тази дисертация под шестостен ще разбираме такъв изпъкнал шестостен имащ шест четириъгълни стени.

За референтен елемент \hat{e} е избран кубът $[-1, 1]^3$ (вижте Фиг. 1). Той се използва за дефиниране на елемента $e \in \mathcal{T}_h$.



Фигура 1: Номерация на възлите на референтния елемент на Ранахер-Турек \hat{e} и шаблон на свързаността на съответната елементна матрица на коравина A_e .

Нека $\Psi_e : \hat{e} \rightarrow e$ е трилинейната трансформация изобразяваща референтния елемент \hat{e} в e . Тогава базисните функции се дефинират по следния начин:

$$\begin{aligned} \{\phi_i\}_{i=1}^6 &= \{\hat{\phi}_i \circ \Psi_e^{-1}\}_{i=1}^6, \\ \{\hat{\phi}_i\}_{i=1}^6 &\in l(1, x_1, x_2, x_3, x_2^2 - x_1^2, x_1^2 - x_3^2). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Има два естествени варианта за избор на възловите интерполационни условия, които водят до две различни крайноелементни пространства. При първият - МР (mid point - средна точка), $\{\hat{\phi}_i\}_{i=1}^6$ са дефинирани от поточковите интерполационни условия

$$\hat{\phi}_i(b_\Gamma^j) = \delta_{ij},$$

където $b_{\Gamma}^j, j = 1, 2, \dots, 6$ са центровете на маса на стените на куба \hat{e} . Така получаваме следните базисни функции.

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_1(\mathbf{x}) &= (1 - 3x_1 + 2x_1^2 - x_2^2 - x_3^2) / 6, \\ \hat{\phi}_2(\mathbf{x}) &= (1 + 3x_1 + 2x_1^2 - x_2^2 - x_3^2) / 6, \\ \hat{\phi}_3(\mathbf{x}) &= (1 - x_1^2 - 3x_2 + 2x_2^2 - x_3^2) / 6, \\ \hat{\phi}_4(\mathbf{x}) &= (1 - x_1^2 + 3x_2 + 2x_2^2 - x_3^2) / 6, \\ \hat{\phi}_5(\mathbf{x}) &= (1 - x_1^2 - x_2^2 - 3x_3 + 2x_3^2) / 6, \\ \hat{\phi}_6(\mathbf{x}) &= (1 - x_1^2 - x_2^2 + 3x_3 + 2x_3^2) / 6.\end{aligned}$$

При другия вариант - MV (mean value - средна стойност) се използва усредняващ интерполяционен функционал във вида:

$$|\Gamma_{\hat{e}}^j|^{-1} \int_{\Gamma_{\hat{e}}^j} \hat{\phi}_i = \delta_{ij},$$

където $\Gamma_{\hat{e}}^j, j = 1, 2, \dots, 6$ са стените на куба \hat{e} , базисните функции се получават в следния вид:

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_1(\mathbf{x}) &= (2 - 6x_1 + 6x_1^2 - 3x_2^2 - 3x_3^2) / 12, \\ \hat{\phi}_2(\mathbf{x}) &= (2 + 6x_1 + 6x_1^2 - 3x_2^2 - 3x_3^2) / 12, \\ \hat{\phi}_3(\mathbf{x}) &= (2 - 3x_1^2 - 6x_2 + 6x_2^2 - 3x_3^2) / 12, \\ \hat{\phi}_4(\mathbf{x}) &= (2 - 3x_1^2 + 6x_2 + 6x_2^2 - 3x_3^2) / 12, \\ \hat{\phi}_5(\mathbf{x}) &= (2 - 3x_1^2 - 3x_2^2 - 6x_3 + 6x_3^2) / 12, \\ \hat{\phi}_6(\mathbf{x}) &= (2 - 3x_1^2 - 3x_2^2 + 6x_3 + 6x_3^2) / 12.\end{aligned}$$

И при двата варианта на интерполяционни условия, степените на свобода са асоциирани със стените на елемента. Това е съществено, защото дава възможност за единна програмна реализация, при която като параметър се задават различните функции на формата.

Метод на спрегнатия градиент

Най-добрият известен итерационен метод за системи с положително определени и симетрични матрици е *методът на спрегнатия градиент* (МСГ)[4].

Нека припомним, че ако $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ са подредените в нарастващ ред собствени стойности на симетричната и положително определената матрица A (те са реални и положителни), то спектралното число на обусловеност можем да иразим по следния начин:

$$\kappa(A) = \frac{\lambda_N}{\lambda_1}.$$

Тогава относно сходимостта на МСГ е в сила следната теорема [43]:

Теорема 1.2. Нека $p(\epsilon)$ е най-малкото цяло положително число k , за което е изпълнено неравенството

$$\|\mathbf{x}^k - \hat{\mathbf{x}}\|_A \leq \epsilon \|\mathbf{x}^0 - \hat{\mathbf{x}}\|_A.$$

В сила е следната оценка за $p(\epsilon)$:

$$p(\epsilon) \leq \frac{1}{2} \sqrt{\kappa(A)} \ln\left(\frac{2}{\epsilon}\right) + 1$$

□

Тоест броят на итерациите за достигане на желаната от нас точност е пропорционален на квадратния корен от числото на обусловеност на матрицата на системата:

$$\mathcal{N}_{it} = O(\sqrt{\kappa(A)}). \quad (1.7)$$

След дискретизация на тримерна елиптична задача, за числото на обусловеност на матрицата е в сила оценката

$$\kappa = O(N^{2/3}),$$

където N е броят на неизвестните. На всяка итерация при разрежена матрица се извършват $O(N)$ операции. Броят на итерациите при прилагане на метода на спрегнатия градиент е $O(N^{1/3})$. Следователно общата изчислителна сложност е $O(N^{4/3})$.

Този резултат може да бъде подобрен още чрез преобуславяне. Идеята на този подход е, вместо системата

$$Ax = b,$$

да решим системата

$$E^{-1T} A E^{-1} y = E^{-1T} b,$$

където $y = Ex$, а E е неособена матрица и числото на обусловеност на матрицата $E^{-1T} A E^{-1}$ е по-малко от числото на обусловеност на A . По този начин намаляваме броя на итерациите. Този метод се нарича метод на спрегнатия градиент с преобуславяне (МСГП). При него на всяка итерация е необходимо решаване на системи с матрица $C = E^T E$. Тази матрица се нарича *преобусловител*.

Общата стратегията за конструиране на ефективни преобусловители е да съществува ефективен алгоритъм за решаване на системи с преобусловителя C и числото на обусловеност на $C^{-1}A$ да е много по-малко от това на A , тоест:

$$\mathcal{N}(C^{-1}x) \ll \mathcal{N}(A^{-1}x)$$

и

$$\kappa(C^{-1}A) \ll \kappa(A)$$

На всяка итерация в МСПГ се извършва едно умножение на матрицата A с вектор, две скаларни произведения на вектори, три операции от тип умножение на скалар с вектор плюс вектор, едно решаване на система с преобуславящата матрица C и две деления.

МПС(0) факторизация

Нека A е симетрична и положително определена реална матрица с размери $N \times N$. Записваме матрицата A в следния вид

$$A = D - L - L^T,$$

където D е диагоналната част на матрицата A , а $(-L)$ е строго долно триъгълната част на A . Тогава ще търсим МПС(0) преобусловител C във вида:

$$C = (X - L)X^{-1}(X - L^T) \quad (1.8)$$

Диагоналната матрица X ще определим от условието:

$$Ae = Ce, \quad e^T = (1, 1, \dots, 1)$$

Тъй като ще използваме матрицата C за преобусловител, се интересуваме от случая, когато $x_{i,i} > 0$. В сила е следната теорема [10].:

Теорема 1.3. *Нека $A = (a_{i,j})$ е симетрична и положително определена реална матрица с размери $N \times N$, $A = D - L - L^T$, като са в сила неравенствата (в поелементен смисъл)*

$$L \geq 0, \quad (1.9)$$

$$Ae \geq 0 \quad (1.10)$$

$$Ae + L^T e > 0, \quad e = (1, 1, \dots, 1)^T \in R^N \quad (1.11)$$

Тогава може да бъде намерена диагонална матрица X , такава че $x_{i,i} > 0$ по следния начин:

$$x_{i,i} = a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{a_{i,k}}{x_{k,k}} \sum_{j=k+1}^N a_{k,j}, \quad \text{за } i=1, \dots, N$$

□

Забележка 1.4. При всички числени експерименти в дисертацията се използва пертурбиран вариант на МІС(0) алгоритъма, където факторизацията се прилага към матрица $\tilde{A} = A + \tilde{D}$. Диагоналната пертурбация $\tilde{D} = \tilde{D}(\xi) = \text{diag}(\tilde{d}_1, \dots, \tilde{d}_N)$ се дефинира по следния начин:

$$\tilde{d}_i = \begin{cases} \xi a_{ii}, & \text{if } a_{ii} \geq 2w_i, \\ \xi^{1/2} a_{ii}, & \text{if } a_{ii} < 2w_i, \end{cases}$$

където

$$w_i = - \sum_{j>i} a_{ij},$$

а $0 < \xi < 1$ е константа от порядъка на най-малката собствена стойност на матрицата A . При числените експерименти е използван $\xi = h^{-2}$ при крайни елементи на Ранахер-Турек от тип МР и $\xi = 16h^{-2}$ при такива от тип МV, където h е параметъра на дискретизация.

Нека A е матрицата на коравина за тримерната задача (1.1) с константни коефициенти. Тогава е в сила следната оценка за числото на обусловеност на матрицата $C^{-1}A$

$$\kappa(C^{-1}A) = O\left(N^{\frac{1}{3}}\right),$$

където C е пертурбираната МІС(0) факторизацията на A [10]. Както се вижда от (1.8), решаването на системи с матрица C се свежда до решаване на две системи с триъгълни матрици и една с диагонална. Следователно, ако матрицата A е разреждена, то за решаването на система с матрицата C трябва се извършват $O(N)$ операции. Трябва да подчертаем, че в общия случай, ако не знаем нищо за структурата на A , решаването на получаващите се триъгълни системи в C в същността си е рекурентно и не се поддава на ефективно разпаралеляване.

2 Паралелен МІС(0) преобусловител за елиптични задачи

Тази глава е посветена на конструирането на паралелен алгоритъм за МІС(0) преобуславяне на скаларни елиптични задачи. Изведени са теоретични оценки за сходимостта на предложения алгоритъм, както и за паралелната ефективност. Представени са и числени експерименти илюстриращи получените оценки

Тримерната задачата (1.1) дискретизираме чрез неконформните крайни елементи на Ранахер-Турек. Ще конструираме паралелен МІС(0) преобусловител за системата (1.4). От вида на МІС(0) факторизацията (1.8) се вижда, че решаването на СЛАУ с така факторизирана матрица се

свежда до решаването на други три СЛАУ: Една с долнотриъгълна матрица, една с диагонална и една с горнотриъгълна матрица. Решаването на диагонални системи е тривиално. Решаването на триъгълни системи се свежда до прилагане на обратния ход на метода на Гаус. Системата

$$L\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (2.12)$$

където L е долнотриъгълна матрица $N \times N$ с елементи $\{l_{i,j}\}$ се решава по следния начин:

$$x_i = \frac{1}{l_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{j,i} x_j \right), \quad \text{за } i=1, \dots, N. \quad (2.13)$$

В (2.13) имаме рекурентна зависимост, като за пресмятането на x_i е необходимо всички $\{x_j : j < i\}$ да са вече пресметнати.

Нека напишем системата (2.12) в блокчен вид:

$$\begin{bmatrix} L^{1,1} & & & \\ L^{2,1} & L^{2,2} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ L^{m,1} & L^{m,2} & \dots & L^{m,m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}^1 \\ \mathbf{x}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}^m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}^1 \\ \mathbf{b}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{b}^m \end{bmatrix}, \quad (2.14)$$

където блоковете $L^{k,l}$ са матрици с елементи $\{l_{i,j}^{k,l}\}$ и размер $N^k \times N^l$, векторите \mathbf{x}^k и \mathbf{b}^k са с размер N^k и с елементи съответно $\{x_i^k\}$ и $\{b_i^k\}$. Тогава равенството (2.13) приема следната блокчна форма:

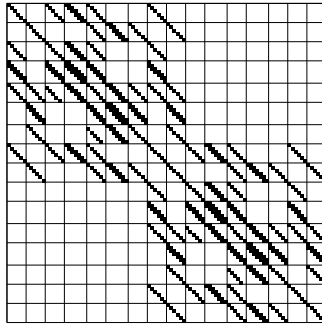
$$\mathbf{x}^k = (L^{k,k})^{-1} \left(\mathbf{b}^k - \sum_{l=1}^{k-1} L^{l,k} \mathbf{x}^l \right), \quad \text{за } k=1, \dots, m. \quad (2.15)$$

Ако даден блок $L^{k,k}$ е диагонална матрица, то елементите $\{x_i^k\}_{i=1}^{N^k}$ могат да бъдат намерени по следния начин:

$$x_i^k = \frac{1}{l_{i,i}^{k,k}} \left(b_i^k - \sum_{l=1}^{k-1} \sum_{j=1}^{N^l} l_{i,j}^{l,k} x_j^l \right). \quad (2.16)$$

От горното равенство се вижда, че x_i^k не зависи от никое x_j^k , $j \neq i$. Това значи че всичките елементи на частта от решението \mathbf{x}^k могат да се намерят едновременно, независимо един от друг. По този начин могат да бъдат използвани N^k различни процесори.

На Фиг 2 е изобразена структурата на ненулевите елементи на матрица на коравина A . Използвана е лексикографска номерация на възлите



Фигура 2: Структура на ненулевите елементи на матрицата на коравина A , за разделяне на Ω на $2 \times 2 \times 6$. Ненулевите елементи са изобразени с малки квадратчета.

относно координатите им. Матрицата може се раздели на блокове, както е показано на фигурата. Вижда се, че част от блоковете по диагонала са диагонални матрици, а останалите са *почти* диагонални.

Идеята на нашия подход е да приложим МІС(0) факторизацията към спомагателна матрица B , която има специална блочна структура. Целта е тази структура да позволява ефективна паралелна реализация. Идеята за това, черпим от опита за паралелни МІС(0) алгоритми за двумерни задачи (виж [8, 9, 18, 23]). Нашият алгоритъм, както и тези в двумерния случай са вдъхновени от структурата на матрицата на коравина, получена при дискретизация с елементи на Ранахер и Турек. Алгоритъмът се базира на модификации на елементните матрици на коравина, (виж [17]).

Локално оптимизирани паралелни МІС(0) преобусловители

Ще конструираме спомагателната матрицата B на елементно ниво. Следвайки стандартната процедура в МКЕ за асемблиране, матрицата на коравина A може да бъде записана по следния начин:

$$A = \sum_{e \in \mathcal{T}} T_e^T A_e T_e, \quad (2.17)$$

където A_e е елементната матрица на коравина, а T_e е матрицата изобразяваща глобалния вектор на неизвестните в локалния, за текущия елемент

е. Матрицата A_e е плътна и може да бъде записана в следния вид:

$$A_e = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\ a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66} \end{bmatrix},$$

където номерацията и шаблона на свързаност са изброени на Фиг. 1.

Лема 2.1. Нека въведем спомагателната матрица B в следния вид:

$$B = \sum_{e \in \mathcal{T}} \lambda_e^{(1)} T_e^T B_e T_e, \quad (2.18)$$

където B_e е симетрична и положително полуопределена матрица с неположителни извъндиагонални елементи, такава че $B_e \mathbf{e} = A_e \mathbf{e}$, $\mathbf{e}^T = (1, 1, 1, 1, 1, 1)$, и където $\{\lambda_e^{(i)}\}_{i=1}^5$ са ненулевите обобщени собствени стойности на задачата $A_e \mathbf{v} = \lambda B_e \mathbf{v}$ подредени в нарастващ ред. Тогава:

- (i) матрицата B удовлетворява условията на Теорема 1.3 за устойчива MIC(0) факторизация;
- (ii) B сила е следната локална оценка на числото на обусловеност,

$$\kappa(B^{-1}A) \leq \max_e \kappa(B_e^{-1}A_e).$$

Сега ще представим структурата на два варианта за локална апроксимация B_e , при условие, че са спазени условията на Лема 2.1.

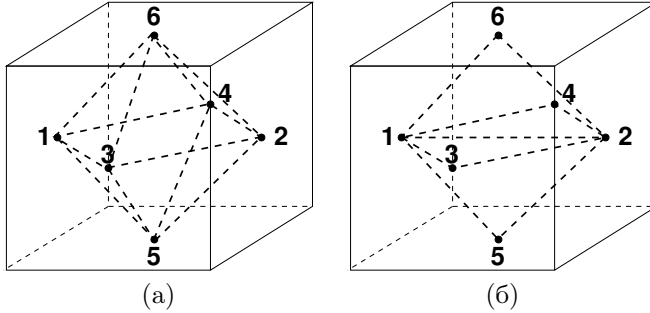
Вариант 1:

$$B_e^1 = \begin{bmatrix} b_{11} & & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} \\ & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & & b_{35} & b_{36} \\ b_{41} & b_{42} & & b_{44} & b_{45} & b_{46} \\ b_{51} & b_{52} & b_{53} & b_{54} & b_{55} & \\ b_{61} & b_{62} & b_{63} & b_{64} & & b_{66} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

Вариант 2:

$$B_e^2 = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & & & \\ b_{41} & b_{42} & & b_{44} & & \\ b_{51} & b_{52} & & & b_{55} & \\ b_{61} & b_{62} & & & & b_{66} \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

Дефинициите на въведените апроксимации B_e съответстват на локалната номерация, показана на Фиг. 3. Тук с пунктирни линии е изобразен шаблона на свързаност за Вариант 1 (вляво) и Вариант 2 (вдясно). Нека отбележим, че диагонална матрица B_e не би могла да удовлетвори условието $B_e \mathbf{e} = A_e \mathbf{e}$.



Фигура 3: Локална номерация и схема на свързаност на степените за свобода на матриците B_e : (а) Вариант 1; (б) Вариант 2.

С помощта на въведената спомагателна матрица B , дефинираме паралелен $\text{MIC}(0)$ преобусловител C за матрицата A във вида

$$C = C_{\text{MIC}(0)}(B).$$

Ще конструираме елементни матрици изпълняващи условията на Лема 2.1, такива че относителното число на обусловеност

$$\kappa \left((B_e^{MP})^{-1} A_e^{MP} \right) \text{ и } \kappa \left((B_e^{MV})^{-1} A_e^{MV} \right)$$

е минимално.

$$B_{opt}^1 = \begin{bmatrix} 4b & -b & -b & -b & -b \\ & 4b & -b & -b & -b \\ -b & -b & 4b & -b & -b \\ -b & -b & & 4b & -b \\ -b & -b & -b & -b & 4b \\ -b & -b & -b & -b & & 4b \end{bmatrix}, \quad b > 0. \quad (2.21)$$

Лема 2.2. За Вариант 1 матрицата B_{opt}^1 е локално оптимално приближение на A_e^{MP} и A_e^{MV} . За всяко положително b е в сила оценката

$$\kappa \left((B_{opt}^1)^{-1} A_e^{MP} \right) = 9/8, \quad \text{and} \quad \kappa \left((B_{opt}^1)^{-1} A_e^{MV} \right) = 2. \quad (2.22)$$

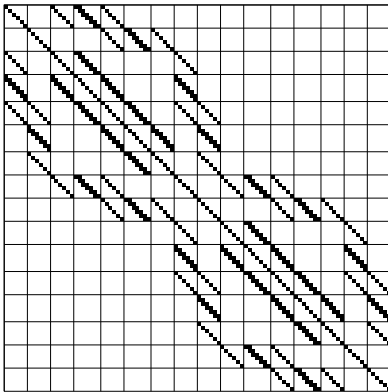
$$B_{opt}^2 = \begin{bmatrix} 4b + a & -a & -b & -b & -b & -b \\ -a & 4b + a & -b & -b & -b & -b \\ -b & -b & 2b & & & \\ -b & -b & & 2b & & \\ -b & -b & & & 2b & \\ -b & -b & & & & 2b \end{bmatrix} \quad a \geq 0, \quad b > 0, \quad (2.23)$$

Лема 2.3. За Вариант 2 локално оптималните приближения на матриците A_e^{MP} и A_e^{MV} имат вида на матрицата B_{opt}^2 , за всяко b , при $a = 0$ в (2.23), като са в сила следните равномерни оценки на числото на обусловеност:

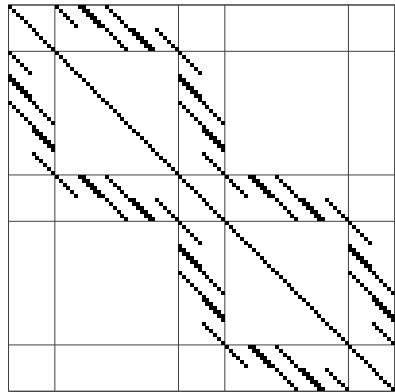
$$\kappa \left((B_e^{MP})^{-1} A_e^{MP} \right) \leq 3, \quad \text{и} \quad \kappa \left((B_e^{MV})^{-1} A_e^{MV} \right) \leq 6. \quad (2.24)$$

Теорема 2.1. Нека B^{MP} и B^{MV} са дефинирани чрез (2.18), където локалните (елементни) матрици B_e са равни на B_{opt}^1 или B_{opt}^2 . Тогава са в сила следните оценки.

$$\kappa \left((B^{MP})^{-1} A^{MP} \right) \leq 3, \quad \kappa \left((B^{MV})^{-1} A^{MV} \right) \leq 6.$$



(а)



(б)

Фигура 4: Структура на ненулевите елементи на матрицата B , за разделяне на Ω на $2 \times 2 \times 6$ елемента: (а) Вариант 1; (б) Вариант 2. Ненулевите елементи са изобразени с малки квадратчета.

Структурата на ненулевите елементи на матрицата B е показана на Фиг. 4 и за двата Варианта - 1 и 2. Използвана е лексикографска номерация на възлите. Нека отбележим, че и в двата случая блоковете стоящи

по диагонала на матрицата B са диагонални. Размерите на тези блокове варират. Те са съответно n_3 или $(n_3 + 1)$ за Вариант 1 и $n_2 n_3$ или $n_2(n_3 + 1) + (n_2 + 1)n_3$ за Вариант 2. На i -тата стъпка се намира блокът y^i . Тъй като блоковете \tilde{L}_{ii} , са диагонални, изчисленията за всеки елемент y^i могат да се пресметнат паралелно.

Нека имаме $p \leq n_3 + 1$ процесора, означени с $P_i|_{i=1}^p$. Разделяме областта Ω на p на брой подобласти $\Omega_i|_{i=1}^p$. Всеки процесор съхранява част от елементите на векторите, участващи в метода на спрегнатия градиент с преобуславяне, съответстваща на възли от мрежата от определена подобласт. По този начин всеки вектор се разпределя по всички процесори. При Вариант 1 всеки блок y^i съответства на една вертикална линия от възли на мрежата, а при Вариант 2 – на възли разположени в една равнина.

Оценки за паралелните времена

В този раздел са изведени оценки на паралелните времена.

При разделяне на областта Ω на $n_1 \times n_2 \times n_3$ елемента общият брой неизвестни N е

$$N = 3n_1 n_2 n_3 + n_1 n_2 + n_1 n_3 + n_2 n_3.$$

Забележка 2.2. В този раздел ще броим умножението с натрупване (умножение плюс събиране) като *една операция*. Този избор е оправдан от два факта: първо, при всички използвани векторни операции, както и при умножение на матрица по вектор и при решаването на системи с преобусловителя след всяко умножение следва натрупване и второ, при съвременните процесори събирането може, и се изпълнява *едновременно* с умножението и не изисква допълнително време за изпълнение.

Броят на операциите на една итерации от МСПГ за Вариант 1 е

$$\mathcal{N}_{it}^{MСПГ} \approx 26N, \quad (2.25)$$

а за Вариант 2

$$\mathcal{N}_{it}^{MСПГ} \approx 23N. \quad (2.26)$$

Оценките са изведени при следните допускания: а) за изпълнението на M аритметични операции на един процесор е необходимо време

$$T = Mt_a \quad [s], \quad (2.27)$$

където t_a е средното време необходимо за изпълнение на една операция. б) времето за прехвърляне на M елемента между два съседни процесора може да бъде приближено с

$$T^{comm} = t_s + Mt_c \quad [s]. \quad (2.28)$$

Тук параметърът t_s е независимо от размера на съобщението време за започване на комуникацията (start-up time), а t_c е времето с което се увеличава общото време за прехвърлянето на всеки един от M -те елемента. Константата t_c характеризира скоростта (bandwidth) на комуникационния канал, докато t_a зависи от дължината на комуникационния канал, броя на междинните ретранслатори между източника и приемника на съобщението, и др. в) изпращането и получаването на данни между два съседни процесори могат да се извършват паралелно. Тоест съществуват независими канали за комуникация в различните посоки. Времето t_c е обратнопропорционално на скоростта на мрежата. Времето t_s включва операции, като проверка на параметрите на използваните функции, определяне на маршрут, инструктиране на хардуера. В съвременните високоскоростни компютърни мрежи е в сила следната релация:

$$t_s \gg t_c. \quad (2.29)$$

Това означава, че времето за прашане на N елемента в едно съобщение е много по-малко (от порядъка на N пъти) от времето за изпращане на 1 елемент N пъти. Времето t_s може, да бъде разглеждано, като времето необходимо за прехвърляне на първия елемент, а времето t_c – това за всеки следващ. Вариант 1:

$$T_p^{it} \approx \frac{26Nt_a}{p} + (6n_1n_2 + 1)t_s + 10n_1n_2t_c$$

Вариант 2:

$$T_p^{it} \approx \frac{23Nt_a}{p} + (2n_1 + 1)t_s + 10n_1n_2t_c$$

Ускоренията $S_p = T_1/T_p$ са съответно за Вариант 1:

$$S_p \approx \frac{p}{1 + \frac{2t_s p}{26n_3 t_a} + \frac{10t_c p}{78n_3 t_a}},$$

а за Вариант 2:

$$S_p \approx \frac{p}{1 + \frac{2t_s p}{69n_2 n_3 t_a} + \frac{10t_c p}{69n_3 t_a}}.$$

Тук е използвано приближението $N \approx 3n_1n_2n_3$. Ускоренията и следователно ефективностите $E_p = S_p/p$, ще растат заедно с n_3 и в двата варианта до теоретическите им максимуми $S_p = p$ и $E_p = 1$. Обаче, тъй като при съществуващите компютри $t_s \gg t_c$ и $t_s \gg t_a$ ще можем да очакваме добри ефективности само когато $n_3 \gg p t_s/t_a$. Ускоренията при Вариант 2 очакваме да са много по-добри от тези при Варианта 1, защото се изпращат около $3n_2$ по-малко съобщения.

Числени експерименти

В дисертацията са представени числени експерименти демонстриращи сходимостта на предложените алгоритми, както и тяхната паралелна ефективност.

Експерименти са извършени на следните три компютърни системи, които ще наричаме за краткост C1 – „IBM SP Cluster 1600“, C2 – „IBM LinuxCluster 1350“ и C3 – „Cray XD1“. В Таблица 2 са показани размерът на мрежата n , броя на итерациите N_{it} , времето за изпълнение T_p в секунди, паралелното ускорение S_p и паралелната ефективност E_p за Вариант 1 на системите C1, C2 и C3. Тук с p е означен броя на процесорите. Същите данни, но за изпълнението на Вариант 2 са показани в Таблица 3.

Таблица 2: Вариант 1

p	$\frac{n}{N_{it}}$	C1			C2			C3		
		T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p
1		1.08			1.28			0.70		
2	<u>31</u>	0.94	1.15	0.57	0.93	1.38	0.69	0.65	1.07	0.54
4	<u>22</u>	0.91	1.19	0.30	0.83	1.55	0.39	0.45	1.57	0.39
8		1.14	0.95	0.12	1.12	1.15	0.14	0.37	1.90	0.24
16		1.28	0.84	0.05	1.11	1.15	0.07	0.37	1.89	0.11
1		9.87			12.90			7.07		
2	<u>63</u>	6.98	1.41	0.71	8.56	1.51	0.75	4.44	1.59	0.79
4	<u>31</u>	5.91	1.67	0.42	6.39	2.02	0.50	3.54	2.00	0.50
8		5.46	1.81	0.23	7.12	1.81	0.23	2.77	2.55	0.32
16		5.83	1.69	0.11	11.9	1.08	0.07	2.40	2.94	0.18
1		95.3			134.2			78.1		
2	<u>127</u>	63.2	1.51	0.75	84.2	1.59	0.80	43.4	1.80	0.90
4	<u>44</u>	48.5	1.96	0.49	54.2	2.47	0.62	29.2	2.67	0.66
8		36.9	2.59	0.32	45.0	2.98	0.37	20.3	3.84	0.48
16		34.2	2.79	0.17	74.8	1.79	0.11	16.2	4.83	0.30
1		1147			1474 ¹			859 ¹		
2	<u>255</u>	659	1.74	0.87						
4	<u>64</u>	361	3.18	0.79	551	2.67 ¹	0.67 ¹	277	3.10 ¹	0.78 ¹
8		287	4.00	0.50	432	3.41 ¹	0.42 ¹	173	4.97 ¹	0.62 ¹
16		264	4.34	0.27	397	3.71 ¹	0.23 ¹	123	6.98 ¹	0.43 ¹

¹Прогнозирани стойности

Тестовите с $n = 255$ не можеше да се проведат на един и два процесора, поради недостиг на памет на системите C2 и C3. Поради същата причина, експериментите на C2 при $n = 255$ и $p = 4$ са проведени на 4

Таблица 3: Вариант 2

p	$\frac{n}{N_{it}}$	C1			C2			C3		
		T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p	T_p	S_p	E_p
1		0.60			1.00			0.65		
2	<u>31</u>	0.30	2.00	1.00	0.65	1.54	0.77	0.39	1.68	0.84
4	22	0.20	3.05	0.76	0.44	2.27	0.57	0.27	2.37	0.59
8		0.17	3.58	0.45	0.31	3.29	0.41	0.16	4.02	0.50
16		0.08	7.09	0.44	0.27	3.65	0.23	0.11	5.78	0.36
1		6.03			11.14			7.48		
2	<u>63</u>	3.09	1.95	0.97	6.67	1.67	0.83	3.88	1.92	0.96
4	31	1.68	3.58	0.89	3.97	2.80	0.70	2.35	3.18	0.79
8		0.94	6.42	0.80	2.58	4.32	0.54	1.49	5.00	0.63
16		0.57	10.57	0.66	2.55	4.36	0.27	1.09	6.87	0.42
1		74.0			127.0			95.9		
2	<u>127</u>	38.1	1.94	0.97	74.5	1.70	0.85	50.0	1.92	0.96
4	44	20.8	3.56	0.89	41.1	3.10	0.77	25.0	3.83	0.96
8		10.7	6.94	0.86	23.9	5.31	0.66	13.8	6.97	0.87
16		5.63	13.14	0.82	18.8	6.74	0.42	8.6	11.11	0.69
1		910			1397 ¹			1055 ¹		
2	<u>255</u>	458	1.99	0.99						
4	61	206	4.4	1.10	470	2.97 ¹	0.74 ¹	291	3.62 ¹	0.90 ¹
8		111	8.21	1.02	253	5.52 ¹	0.69 ¹	154	6.85 ¹	0.85 ¹
16		61	14.88	0.92	149	9.38 ¹	0.58 ¹	85	12.41 ¹	0.77 ¹

¹Прогнозирани стойности

възела, използвайки само по един процесор на възел. Представените последователни времена са приложени само за сравнение. Те са изчислени, като се вземат пред вид броя на итерациите, както и времената за изпълнение при $n = 128$ на един процесор. Вижда се, че броят на итерациите е от порядък $O(n^{1/2}) = O(N^{1/6})$, а общото време за изчисление расте както $O(n^{7/2}) = O(N^{7/6})$. Като правило, за фиксиран брой процесори, ускоренията и ефективностите растат при увеличаване на размера на задачата. И обратно, ефективността пада, при фиксирано n и увеличение на броя на процесорите. Това важи и за трите платформи и потвърждава теоретичния анализ.

При Вариант 1 приемливи ефективности се получават само когато отношението n/p е достатъчно голямо. Както очаквахме, за фиксирани p и n Вариант 2 работи много по-добре даже и при по-малки отношения n/p . Ясно се вижда как намаляването на броя на стъпките за комуникация подобрява паралелната производителност. Също така припокриването на комуникациите с изчисленията има по-голям положителен ефект при Ва-

риант 2.

3 Паралелен метод за преобуславяне на уравненията на Ламе

В тази глава е представен паралелен метод за преобуславяне на уравненията на Ламе, базиран на паралелния МС(0) преобусловител представен в предишната глава. Нека разгледаме следната линейно еластична задача, представена във вариационна формулировка: Да се намери функцията $\mathbf{u} \in [H_E^1(\Omega)]^3 = \{\mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^3 : \mathbf{v}|_{\Gamma_D} = \mathbf{u}_S\}$ такава, че

$$\int_{\Omega} [2\mu\varepsilon(\mathbf{u}) : \varepsilon(\mathbf{v}) + \lambda \operatorname{div} \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{v}] d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f}^t \mathbf{v} d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{g}^t \mathbf{v} d\Gamma, \quad (3.30)$$

$\forall \mathbf{v} \in [H_0^1(\Omega)]^3 = \{\mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^3 : \mathbf{v}|_{\Gamma_D} = 0\}$, където $\lambda > 0$ и $\mu > 0$ са константите на Ламе,

$$\varepsilon(\mathbf{u}) := 0.5(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t)$$

е симетричният тензор на деформация, \mathbf{f} са обемните сили и \mathbf{g} са зададените напрежения на границата $\Gamma_N \cup \Gamma_D = \partial\Omega$. За дискретизация на задачата 3.30 използваме неконформните елементи на Ранахер-Турек. За получаване на стабилна апроксимация, обикновено се използва смесен МКЕ, където неизвестните са \mathbf{u} и $\operatorname{div} \mathbf{u}$. Като се използват неконформни крайни елементи, дуалната променлива може да бъде елиминирана на макроелементно ниво [12]. По този начин се получава симетрична и положително определена система, само в термините на преместванията [3]. Този подход е известен в литературата като *reduced and selective integration* (RSI), вижте [29].

Нека $\Omega^H = n_1^H \times n_2^H \times n_3^H$ е мрежа, получена чрез равномерно разделяне на областта $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ на шестостени, и нека $\Omega^h = n_1^h \times n_2^h \times n_3^h$ е мрежата, получена чрез разделянето на всеки макроелемент $E \in \Omega^H$ на 8 шестостена. В сила са равенствата $n_i^h = 2n_i^H$ за $i = 1, 2, 3$. Разглеждаме следния вариант на RSI дискретизация [30]: Да се намери функцията $\mathbf{u}^h \in V_E^h$, която да изпълнява равенството

$$\sum_{e \in \Omega^h} \int_e [2\mu\varepsilon^*(\mathbf{u}^h) : \varepsilon^*(\mathbf{v}^h) + \lambda \operatorname{div} \mathbf{u}^h \operatorname{div} \mathbf{v}^h] de = \int_{\Omega} \mathbf{f}^t \mathbf{v}^h d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{g}^t \mathbf{v}^h d\Gamma, \quad (3.31)$$

$\forall \mathbf{v}^h \in V_0^h$, където

$$\varepsilon^*(\mathbf{u}) := \nabla \mathbf{u} - 0.5I_L^{QH} [\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^t],$$

V_0^h е пространството, което изпълнява хомогенни гранични условия върху Γ_D . Означили сме с I_L^{QH} оператора на ортогонална L^2 проекция върху пространството от на части константни функции Q^H в (макро)елементите от разделянето Ω^H на Ω .

След стандартна процедура за асемблиране на крайноелементна матрица получаваме следната линейна система алгебрични уравнения:

$$\begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_h^1 \\ \mathbf{u}_h^2 \\ \mathbf{u}_h^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_h^1 \\ \mathbf{f}_h^2 \\ \mathbf{f}_h^3 \end{bmatrix}. \quad (3.32)$$

Тук матрицата на коравина K е записана в блочна форма, като блоковете \mathbf{u}_h^i съответстват на преместванията по i -тото направление. Тъй като матрицата K е разредена, симетрична и положително определена, използваме метода на спрегнатия градиент с преобуславяне за решаването на системата (3.32).

Преобуславяне чрез разделяне по преместванията

Като основа за паралелния алгоритъм за решаване на системата на Ламе използваме т.н. изотропен вариант на разделяне по преместванията (DD, от англ. displacement decomposition) [10]. Разглеждаме DD преобусловител в следния вид:

$$C_{DD}(K) = \begin{bmatrix} A & & \\ & A & \\ & & A \end{bmatrix}. \quad (3.33)$$

Тук с A е означена матрица съответстваща на следната билинейна форма:

$$a(u^h, v^h) = \sum_{e \in \Omega^h} \int_e E_e \left(\sum_{i=1}^3 \frac{\partial u^h}{\partial x_i} \frac{\partial v^h}{\partial x_i} \right) de. \quad (3.34)$$

С E_e е означен модулът на еластична деформация, известен също като модул на Юнг, за материала в съответния елемент. Такова преобуславяне базирано на разделяне по преместванията е теоретически мотивирано от второто неравенство на Корн, което е изпълнено за разглежданата RSI дискретизация [6]. За широк кръг задачи е в сила и зависимостта [10]

$$\kappa(C_{DD}^{-1}K) = O((1 - 2\nu)^{-1}), \quad (3.35)$$

където с ν е означен коефициента на Поасон за съответния материал.

За паралелно решаване на системата (3.32) ще използваме разделяне по преместванията (3.33), както и разработения в Глава 2 паралелени

алгоритъми за $MIC(0)$ преобуславяне на задачата (3.34). Построяваме

$$C_{DDMIC(0)}(K) = \begin{bmatrix} C_{MIC(0)}(B_{opt}^v) & & \\ & C_{MIC(0)}(B_{opt}^v) & \\ & & C_{MIC(0)}(B_{opt}^v) \end{bmatrix}, v = 1, 2. \quad (3.36)$$

Където за матрицата B_{opt}^1 съответства на Вариант 1, а матрицата B_{opt}^2 – на Вариант 2.

Паралелен мултигрид преобусловител

Друг възможен вариант на преобуславяне е да решим системите с матрица A в (3.33) с вътрешна итерация с МСПП, като за преобусловител използваме алгебричния мултигрид BoomerAMG от библиотеката Нурге [19, 40]. Така получаваме следния преобусловител на K :

$$C_{DD}^{-1}{}_{BAMG} \begin{bmatrix} \mathbf{b}^1 \\ \mathbf{b}^2 \\ \mathbf{b}^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{МСПП}(A, \mathbf{b}^1) \\ \text{МСПП}(A, \mathbf{b}^2) \\ \text{МСПП}(A, \mathbf{b}^3) \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

В дисертацията изведени оценки паралелните времена. за решаване на системата на Ламе с предложените паралелни преобусловители.

Числени експерименти

В дисертацията са представени редица числени експерименти, такива сравняващи полученото числено решение с известно аналитично такова, такива демонстриращи сходимостта при задачи със скок в коефициентите, както и експерименти демонстриращи паралелната ефективност. Тук ще покажем експериментите показващи паралелните ускорения и ефективности:

4 Приложения

В тази глава са разгледани приложения на представения в глава 3 паралелен алгоритъм за решаване на системата на Ламе. Те включват симулация на еластични структури, и числена хомогенизация.

Симулации на линейни еластични системи

Пилотни фундаменти

Типично приложение в практиката е симулацията на фундаментите на различни конструкции, които предават и разпределят общото натоварване върху почвата. Съвместната работа на конструкцията и почвата

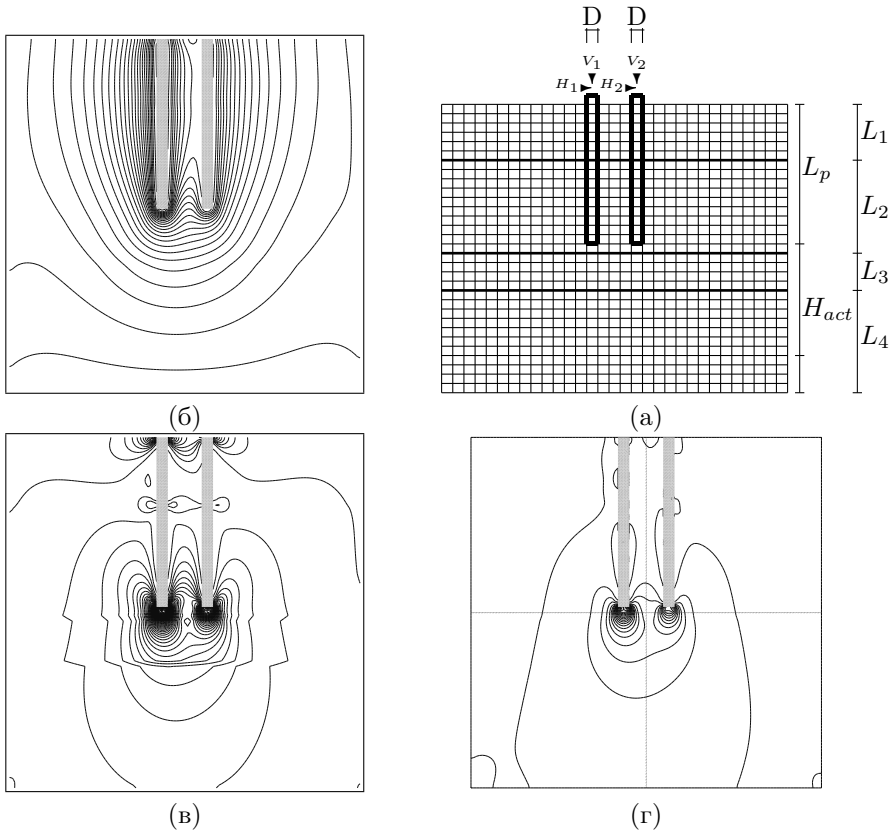
Таблица 4: Паралелни ускорения и ефективности

<i>n</i>	<i>p</i>	Вариант 1						Вариант 2					
		C1		C2		C3		C1		C2		C3	
		<i>S(p)</i>	<i>E(p)</i>	<i>S(p)</i>	<i>E(p)</i>	<i>S(p)</i>	<i>E(p)</i>	<i>S(p)</i>	<i>E(p)</i>	<i>S(p)</i>	<i>E(p)</i>	<i>S(p)</i>	<i>E(p)</i>
32	2	1.49	0.74	1.31	0.66	1.77	0.88	1.93	0.96	1.33	0.66	1.97	0.99
	4	1.83	0.45	1.49	0.37	2.40	0.60	3.53	0.88	2.08	0.51	3.25	0.81
	8	2.11	0.26	1.22	0.15	3.34	0.42	5.78	0.72	3.07	0.38	5.20	0.65
	16	1.61	0.10	0.92	0.06	3.22	0.20	9.45	0.59	3.93	0.25	7.63	0.48
64	2	1.68	0.84	1.38	0.69	2.02	1.01	2.02	1.01	1.35	0.68	1.77	0.88
	4	2.46	0.61	1.98	0.49	3.17	0.79	3.92	0.98	2.49	0.62	3.50	0.87
	8	3.27	0.41	1.93	0.24	4.26	0.53	7.38	0.92	4.21	0.52	5.91	0.73
	16	3.78	0.23	2.06	0.13	6.03	0.38	12.83	0.81	6.53	0.40	8.64	0.54
128	2	1.82	0.91	1.51	0.76	1.56	0.78	2.00	1.00	1.49	0.74	1.93	0.96
	4	2.96	0.74	2.40	0.60	2.73	0.68	3.90	0.98	2.54	0.63	3.72	0.93
	8	4.50	0.56	2.70	0.34	5.34	0.67	7.33	0.92	4.59	0.57	7.30	0.91
	16	5.83	0.36	3.64	0.23	7.64	0.48	12.73	0.80	7.51	0.47	12.21	0.76

формират сложно напрегнато деформирано състояние, в областта на взаимодействие. При проектиране на съвременни конструкции се търси постигане на висока икономическа ефективност, при гарантирани надежност и функционалност. Точно в такива случаи, компютърното моделиране се оказва незаменим инструмент. Тази инженерна задача се моделира чрез системата уравнения на Ламе. В разглеждания от нас модел се правят следните допускания: (1) преместванията са малки и (2) свойствата на материалите са изотропни. По-подробно описание на задачата може да бъде намерено в [25]. На Фигура 5 е представена постановката на задачата, както са изобразени с изолинии вертикалните премествания, деформации и напрежения на решението. $\times [0, x_2^{max}] \times [0, x_3^{max}]$. Тук за числените експерименти е използвана моделна задача от [15]. Задачата описва взаимодействие на два пилота в нехомогенна пясъчливо-глинеца почва, вижте Фигура 5. С *n* е означен броят на елементите по всяко направление. Представени са експерименти за две мрежи – по-груба с елементи с размери $1.2 \times 1.2 \times 1[\text{m}]$ и фина – с размери $0.6 \times 0.6 \times 0.5[\text{m}]$.

Костни микроструктури

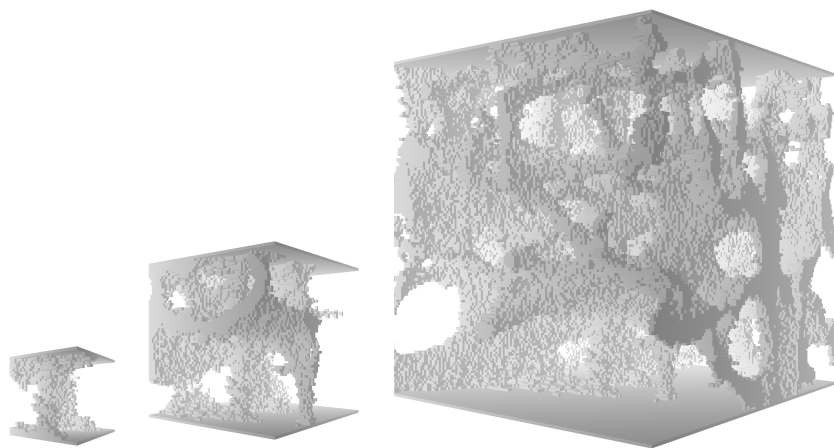
Остеопорозата е болест на костната система. Тя е свързана със загуба на костна маса, като загубата е най-осезаема в трабекуларната част. В следствие на намаляването на плътността на твърдата фаза, костите стават по-податливи на счупвания. От болестта са силно застрашени жените в менопауза, както и двата пола над 75 годишна възраст. От съществено значение е диагностиката и превенцията на остеопорозата. Основно средство за целта е рентгенографията, а напоследък и рентгеновата компютърна томография.



Фигура 5: а) Описание на задачата в сечение на изчислителната област Ω . $x_1^{max} = x_2^{max} = 37.2m$, $x_3^{max} = 31.0m$. $|H_1| = |H_2| = 150kN$, $|V_1| = 4000kN$, $|V_2| = 2000kN$, $E_{pile} = 31500MPa$, $\nu_{pile} = 0.2$, $E_{L_1} = 5.2MPa$, $\nu_{L_1} = 0.4$, $E_{L_2} = 9.4MPa$, $\nu_{L_2} = 0.35$, $E_{L_3} = 14.0MPa$, $\nu_{L_3} = 0.25$, $E_{L_4} = 21.4MPa$, $\nu_{L_4} = 0.2$; б) Вертикални премествания; в) Вертикални деформации г) Вертикални напрежения.

По-добър индикатор за наченки на остеопороза са напреженията във всяка една точка от костта. Получаваме ги с помощта на компютърната томография и компютърното моделиране. Прилагаме така наречения μ МКЕ, при който всеки отделен воксел се представя с отделен краен еле-

мент [2, 7]. Тук прилагаме разработеният в Глава 3 паралелен алгоритъм за решаване на еластични задачи, за симулация на натоварване на трабекуларната част от костта. Геометрията е получена от тримерна компютърна томография на човешки гръбначен прешлен L3 [13]. Всеки воксел е с форма на куб със страна $37\mu\text{m}$. Изрязали сме три образца с размери $32 \times 32 \times 32$, $64 \times 64 \times 64$ и $128 \times 128 \times 128$ воксела. Оставащите „висящи“ парчета са премахнати. В горната и долната част и на трите изображения са поставени пластинки с дебелина един воксел, които служат за по-добра интерпретация на натоварването. Получените костни фрагменти са изобразени на Фигура 6



Фигура 6: Структура на твърдата фаза на трабекуларна кост, различни екземпляри: $32 \times 32 \times 32$ – вляво, $64 \times 64 \times 64$ – по средата, и $128 \times 128 \times 128$ – вдясно

Важно е да отбележим, че микроструктурата на трабекуларната кост е типичен пример за силно хетерогенна среда. В нашата симулация разглеждаме трабекуларната кост, състояща се от твърда и флуидна част. Както споменахме по-горе, костния образец е поставен между две пластини. На долната пластина са наложени нулеви гранични условия на Дирихле – тоест тя е твърдо застопорена. Към горната пластина са наложени гранични условия на фон Нойман, съответстващи на приложена вертикално натоварване с интензитет $20[N/m^2]$

За симулацията са използвани следните коефициенти: $E_p = 200[GPa]$, $E_s = 20[GPa]$, $E_f = \zeta E_s$, $\zeta \in \{0.1, 0.01, 0.001\}$, а коефициента на Поасон за трите вида материали е взет $\nu = 0.3$. Тук с E_p е означен модула на Юнг за двете пластини, с E_s – този за твърдата част на костта, а коефициента на

флуидната фаза E_f е изразен чрез този на твърдата посредством вариращ скок ζ на модула на Юнг. Резултати с вариращ параметър на скока ζ са представени в Таблица 5. Задачата е решена както с преобусловителя с паралелна непълна факторизация Вариант 2 (3.36), така и с този с алгебричен мултигрид (3.37). Трябва да отбележим, че заради особености при дискретизацията, можем да си позволим скокове на коефициентите само между различните макроеlementи. Тоест за образца с размери $m \times m \times m$ воксела, решаваме задачи с параметър $n = 2m$, като броят на неизвестните става $9n^2(n + 1)$ При всички експерименти с алгебричния мултигрид е използвано задебеляване на Фалгот, $V(1,1)$ цикъл с метод за релаксация хибриден Гаус-Зайдел. Параметъра за близост (AMG strength threshold) е избран 0.5, което е и препоръчаната стойност, от авторите на използваната библиотеката за тримерни задачи.

Таблица 5: Паралелни тестове

		$\zeta = 1$				$\zeta = 0.1$				$\zeta = 0.01$				$\zeta = 0.001$			
n	p	MIC(0)		AMG		MIC(0)		AMG		MIC(0)		AMG		MIC(0)		AMG	
		$T[s]$	It	$T[s]$	It	$T[s]$	It	$T[s]$	It	$T[s]$	It	$T[s]$	It	$T[s]$	It	$T[s]$	It
64	1	91.2	122	156.2	13	239.3	330	374.9	27	348.3	505	757.9	57	588.6	823	1040.5	78
128	8	221.1	181	293.6	13	833.2	708	681.0	25	975.5	830	1501.3	60	2166.7	1850	2908.9	107
256	64	537.6	272	492.8	13	2393.8	1237	945.4	25	3495.7	1831	2114.4	57	6025.8	3150	5520.1	114

От Таблица 5 се вижда, че броят на итерациите за MIC(0) преобусловителя нараства по-бързо при увеличаване на размера на задачата, когато има скокове, в сравнение със случая без скок ($\zeta=1$). Броят на външните итерации при мултигрид преобусловителя се вижда, че почти не зависи от размера на задачата, освен в случая на най-голям скок ($\zeta = 0.001$), където се наблюдава увеличение. За най-малката задача ($N=2 \ 396 \ 160$) MIC(0) преобусловителят е по-бърз от мултигридския за всички стойности на ζ . За средната по размер задача ($N=19 \ 021 \ 824$) MIC(0) е по-бърз при всички тестове, освен при $\zeta = 0.1$. За най-голямата задача мултигридът е по-бърз, но превъзходството му намалява с увеличаване на скока. Причината за това е, че външните итерации при мултигрида са много по-скъпи от тези при непълната факторизация, което от своя страна води до влошаване на времената.

Можем да направим извода, че и двата преобусловителя предоставят стабилна платформа за компютърни симулации на костна структура. И двата преобусловителя имат плюсове и минуси, в зависимост от размера на задачата, както и от костната микроструктура.

Числена хомогенизация

В този раздел представяме един метод за числена хомогенизация, който намира ефективният еластичния тензор, за даден композитен образец.

С други думи намира свойствата на такъв хомогенен (еднороден) материал, който има същото поведение, като разглеждания композитен (съставен) образец.

Алгоритъмът за хомогенизация е построен при допускането за периодична микроструктура. Това налага използването на периодични гранични условия, което от своя страна води до решаване на системи с положително полуопределени матрици. Модифицирали сме метода от Глава 3 за периодични гранични условия, както и МСПП за положително полуопределени матрици.

Получените хомогенизирани тензори на коравина се трансформират в координатна система, чиито оси съвпадат с главните направления на анизотропията. Това представяне е еднозначно и спомага за сравнение и класификация на различните материали.

Представили сме редица експерименти за числена хомогенизация на силно хетерогенни трабекуларни костни тъкани, епоксидни композите и ламинати. Сравнили сме резултатите, както с аналитични оценки [21, 37], така и числени резултати получени от софтуерния продукт GeoDict [14]. Получените хомогенизирани тензори са в много добро съгласие, както с аналитичните оценки, така и с получените от GeoDict тензори.

Разгледания алгоритъм за хомогенизация и разработеният софтуер позволяват хомогенизирането на композити съставени от произволен брой материали.

Авторска справка

Основните резултати от дисертацията са:

- Разработен е паралелен МС(0) преобусловител за тримерни елиптически задачи, дискретизирани чрез неконформни крайни елементи на Ранахер–Турек. Изведени са оценки за скоростта на сходимост на метода и за паралелните времена.
- Разработен е паралелен блочен МС(0) преобусловител от тип разделяне по преместванията за тримерната система на Ламе и приложението му за числено решаване на еластични задачи върху вокселни структури. Изведени са оценки за паралелните времена.
- Разработен е паралелен алгоритъм за числена хомогенизация на композитни материали.
- Програмно са реализирани разработените методи и алгоритми. Проведени са числени експерименти потвърждаващи качествата и ефективността на разработените алгоритми.

- Разработените програмни средства са приложени за важни класове задачи с голяма размерност от практиката.

Благодарности

Тази работа нямаше да бъде реалност без всеотдайната подкрепа на много хора:

- жена ми,
- приятелите ми,
- колегите ми,
- роднините ми,
- и разбира се, на научния ми ръководител.

Сърдечно ви благодаря!

Също така искам да благодаря и на програмата НРС-Еуропа, благодарение на която на два пъти посетих суперкомпютърния център „CINECA“, Италия, където свърших по-голямата част от работата по глави 2 и 3. Благодаря и на „Българският център за суперкомпютърни приложения“ за предоставения ми достъп до компютъра Blue Gene/P.

Литература

- [1] P. Arbenz, S. Margenov, and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning of 3D elliptic problems discretized by Rannacher–Turek finite elements. *Computers and Mathematics with Applications*, 55(10):2197–2211, 2008.
- [2] P. Arbenz, G. H. van Lenthe, U. Mennel, R. Müller, and M. Sala. A scalable multi-level preconditioner for matrix-free μ -finite element analysis of human bone structures. Technical Report 543, Institute of Computational Science, ETH Zurich, 2006.
- [3] T. Arbogast and Z. Chen. On the implementation of mixed methods as nonconforming methods for second-order elliptic problems. *Mathematics of Computation*, 64:943–972, 1995.
- [4] O. Axelsson. *Iterative Solution Methods*. Cambridge University Press, 1996.
- [5] O. Axelsson and V. Barker. *Finite Element Solution of Boundary Value Problems: Theory and Computations*. Academic Press, 1983.
- [6] O. Axelsson and I. Gustafsson. Iterative methods for the solution of the Naviers equations of elasticity. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engin.*, 15:241–258, 1978.
- [7] H. Bayraktar. Nonlinear micro finite element analysis of human trabecular bone: a study. ABAQUS Inc.
- [8] G. Bencheva and S. Margenov. Parallel incomplete factorization preconditioning of rotated linear FEM systems. *J. Comput. Appl. Mech*, 4(2):105–117, 2003.
- [9] G. Bencheva and S. Margenov. Performance analysis of a parallel MIC(0) preconditioning of rotated bilinear nonconforming FEM systems. *Mathematica Balkanica*, 17:319–335, 2003.
- [10] R. Blaheta. Displacement decomposition – incomplete factorization preconditioning techniques for linear elasticity problems. *Numer. Lin. Alg. Appl*, 1:107–126, 1994.
- [11] D. Braess. *Finite Elements: Theory, Fast Solvers, and Applications in Solid Mechanics*. Cambridge University Press, 1997.
- [12] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and hybrid finite element methods*. Springer Series In Computational Mathematics. Springer-Verlag, 1991.

- [13] G. Beller, M. Burkhart, D. Felsenberg, W. Gowin, H.-C. Hege, B. Koller, S. Prohaska, P. I. Sapiro and J. S. Thomsen. Vertebral body data set ESA29-99-L3.
<http://bone3d.zib.de/data/2005/ESA29-99-L3/>, 2009.
- [14] Geodict. GeoDict – the Virtual Material Laboratory.
<http://geodict.com>, 2014.
- [15] A. Georgiev, A. Baltov, and S. Margenov. Hipergeos benchmark problems related to bridge engineering applications. *REPORT HG CP*, 94–0820, 1994.
- [16] I. Georgiev, E. Ivanov, S. Margenov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of epoxy-clay composite materials. *Numerical Methods and Applications, LNCS 8962*, 130–137. Springer Berlin Heidelberg, 2015.
- [17] I. Gustafsson. An incomplete factorization preconditioning method based on modification of element matrices. *BIT Numerical Mathematics*, 36(1):86–100, 1996.
- [18] I. Gustafsson and G. Lindskog. On parallel solution of linear elasticity problems: Part I: theory. *Numerical linear algebra with applications*, 5(2):123–139, 1998.
- [19] V. Henson and U. Yang. BoomerAMG: a parallel algebraic multigrid solver and preconditioner. *Applied Numerical Mathematics*, 155–177, 2000.
- [20] C. Johnson. *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. Cambridge University Press New York, 1987.
- [21] R. Jones. *Mechanics of composite materials*. McGraw-Hill New York, 1975.
- [22] D. Kincaid and W. Cheney. *Numerical analysis: mathematics of scientific computing*. Brooks/Cole, 1991.
- [23] R. Lazarov and S. Margenov. On a Two-Level Parallel MIC(0) Preconditioning of Crouzeix-Raviart Non-conforming FEM Systems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 2542*, 192–201. Springer Berlin Heidelberg, 2003.
- [24] R. Lipton, D. Rose, and R. E. Tarjan. Generalized nested dissection. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 16(2):346–358, 1979.

- [25] I. Lirkov. MPI solver for 3D elasticity problems. *Mathematics and computers in simulation*, 61(3):509–516, 2003.
- [26] I. Lirkov and Y. Vutov. Comparative analysis of high performance solvers for 3D elliptic problems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 483–492, 2007.
- [27] I. Lirkov, Y. Vutov, M. Ganzha, and M. Paprzycki. Comparative Analysis of High Performance Solvers for 3D Elasticity Problems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 5434*, 392–399. Springer-Verlag, 2009.
- [28] I. Lirkov, Y. Vutov, M. Paprzycki, and M. Ganzha. Parallel performance evaluation of MIC(0) preconditioning algorithm for voxel μ FE simulation. *Parallel Processing and Applied Mathematics, LNCS 6068*, 135–144. Springer, 2010.
- [29] D. S. Malkus and T. J. R. Hughes. Mixed finite element methods – reduced and selective integration techniques: a unification of concepts. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 63–81, 1990.
- [30] S. Margenov. Displacement decomposition—MIC(0) preconditioning of linear elasticity nonconforming FEM problems. *16th IMACS World Congress 2000, Lausanne, Proceedings, 107-4*, 2000.
- [31] S. Margenov, S. Stoykov, and Y. Vutov. Numerical homogenization of heterogeneous anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS*, 347–354. Springer Berlin Heidelberg, 2014.
- [32] S. Margenov and Y. Vutov. Parallel PCG algorithms for voxel FEM elasticity systems. *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, 517–526, 2007.
- [33] S. Margenov and Y. Vutov. Preconditioning of voxel FEM elliptic systems. *TASK Quarterly*, 11(1-2):117–128, 2007.
- [34] S. Margenov and Y. Vutov. Parallel MIC(0) preconditioning for numerical upscaling of anisotropic linear elastic materials. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 5910*, 805–812. Springer, 2010.
- [35] A. Quarteroni and A. Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer, 1994.
- [36] R. Rannacher, S. Turek, S.S.M. Modelle, and D. Forschungsgemeinschaft. Simple nonconforming quadrilateral Stokes element. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 8(2):97–112, 1992.

- [37] S. W. Tsai. Structural behavior of composite materials. Technical report, DTIC Document, 1964.
- [38] Y. Vutov. Parallel incomplete factorization of 3D NC FEM elliptic systems. *Numerical Methods and Applications, LNCS 4310*, 114–121. Springer-Verlag, 2007.
- [39] Y. Vutov. Parallel DD-MIC(0) Preconditioning of Nonconforming Rotated Trilinear FEM Elasticity Systems. *Large-Scale Scientific Computing, LNCS 4818*, 745–572. Springer-Verlag, 2008.
- [40] U. Yang. Parallel algebraic multigrid methods-high performance preconditioners. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 51:209, 2005.
- [41] Б. Боянов. *Лекции по числени методи*. „Дарба“, София, 1995.
- [42] Я. Вутов. Паралелни Итерационни Методи за Неконформни Крайни Елементи.
<http://parallel.bas.bg/~yavor/disert/>, 2015.
- [43] С. Маргенов. *Числени методи за системи с разредени матрици*. Институт по Паралелна Обработка на Информацията – Българска Академия на Науките, София, 2007.
- [44] Бл. Сендов and В. Попов. *Числени методи – втора част*. Наука и изкуство, София, 1978.
- [45] Бл. Сендов and В. Попов. *Числени методи – първа част*. Университетско издателство „Св. Кл. Охридски“, София, 1996.
- [46] Г. Стренг and Дж. Фикс. *Теория метода конечных элементов*. „Мир“, Москва, 1977.

Abstracts of Dissertations

Number 3, 2015

INSTITUTE OF INFORMATION AND COMMUNICATION TECHNOLOGIES
BULGARIAN ACADEMY OF SCIENCES

БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ

ИНСТИТУТ ПО ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ ТЕХНОЛОГИИ

Брой 3, 2015

Автореферати на дисертации