УДК 519.63

К. О. Гомон, аспірант,
І. І. Дияк, канд. фіз.-мат. наук
Львівський національний університет імені Івана Франка, м. Львів

ПАРАЛЕЛЬНИЙ АЛГОРИТМ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ НА ОСНОВІ ГІБРИДНИХ СКІНЧЕННО-ГРАНИЧНОЕЛЕМЕНТНИХ АПРОКСИМАЦІЙ

Розглядається використання паралельних обчислень при розв'язуванні задач теорії пружності методом декомпозиції області. Формулюється гетерогенна числова модель. В одній частині підобластей використовуються апроксимації методу скінченних елементів, а в іншій — прямого методу граничних елементів. Для розв'язування системи лінійних рівнянь розроблено паралельний алгоритм на основі методу спряжених градієнтів. Наведено результати апробації запропонованого підходу на модельному прикладі.

Ключові слова: *метод декомпозиції області, паралельні обчислення, метод скінченних елементів, метод граничних елементів, паралельний метод спряжених градієнтів.*

Вступ. Серед сучасних числових методів розв'язання крайових задач математичної фізики найпоширенішими є метод скінченних різниць, метод скінченних елементів (МСЕ) і метод граничних елементів (МГЕ). Кожен із методів має свої характерні переваги та недоліки, що зумовлюють область його застосування. Відтак для розв'язування задач, які містять підобласті з різними фізико-механічними чи геометричними характеристиками та властивостями, доцільно використовувати комбіновані методи скінченних та граничних елементів у рамках однієї чисельної моделі, що поєднує переваги обох методів. Окрім того, однією із основних вимог до сучасних чисельних алгоритмів є можливість їх ефективного розпаралелювання та організації розподілених обчислень. Побудові такого підходу присвячена дана робота.

Постановка задачі. Розглядається крайова задача в області Ω. Область Ω представляється як об'єднання n_p підобластей, тобто $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \cdots \cup \Omega_{n_p}$, $\Omega_i \cap \Omega_j = \varnothing, i \neq j, i, j = \overline{1, n_p}$. Пропонується для розв'язування задачі використовувати у частині підобластей $\Omega_i, i \in I_{MCE}$ — МСЕ, а в іншій групі підобластей $\Omega_i, i \in I_{MГЕ}$ — МГЕ. Поділ області Ω на підобласті Ω_i зумовлюється специфікою задачі (наявність локальних неоднорідностей, зон концентрацій напружень і

 © К. О. Гомон, І. І. Дияк, 2016

т. п.) і відповідно віднесення їх до конкретної групи з майбутнім використанням МСЕ чи МГЕ. Для побудови комбінованої чисельної схеми розв'язування крайової задачі на основі МСЕ і МГЕ необхідно сформулювати відповідну гетерогенну модель [1, 3].

Формулювання задачі для гетерогенної моделі. Нехай $\Omega \subset R^2$ — обмежена область з Ліпшицевою границею $\Gamma = \partial\Omega$. $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, де Γ_D і Γ_N — частини границі, на яких задані кінематичні та статичні граничні умови, відповідно. Розглядається змішана крайова задача лінійної теорії пружності:

$$\Delta^* u = \mu\Delta u + (\lambda + \mu)\, grad\,(divu) = 0 \text{ у } \Omega, \tag{1}$$

$$u\big|_{\Gamma_D} = g, \tag{2}$$

$$p(u)\big|_{\Gamma_N} = h, \tag{3}$$

де u — поле переміщень, Δ — Лапласіан, λ і μ — сталі Ляме, $p(u(x))\big|_{\Gamma_N} = \lambda(divu) + 2\mu\dfrac{\partial u}{\partial n} + \mu \times rotu = \sigma_{ij} n_j$ — оператор зусиль, $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \varnothing$, n — вектор одиничної зовнішньої нормалі до $\partial\Omega$.

Для простоти викладу та побудови гетерогенної чисельної схеми вважатимемо, що область Ω розбивається тільки на дві підобласті, а саме Ω_F — підобласть, у якій розв'язок знаходиться МСЕ і Ω_B — підобласть, у якій розв'язок знаходиться МГЕ. Γ_C — спільна границя підобластей Ω_F і Ω_B, на якій задаються умови нерозривності $\mathrm{u}\big|_{\Gamma_C \cap \Omega_B} = \mathrm{u}\big|_{\Gamma_C \cap \Omega_F}$, $\mathrm{p}\big|_{\Gamma_C \cap \Omega_B} + \mathrm{p}\big|_{\Gamma_C \cap \Omega_F} = 0$ (рис. 1).

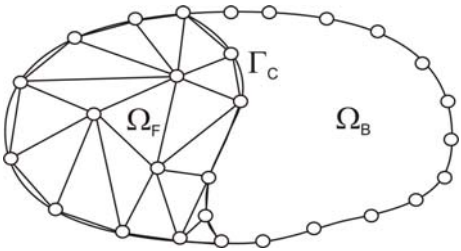

Рис. 1. *Декомпозиція області на підобласті для застосування МСЕ і МГЕ*

Введемо позначення: $u_F = u\big|_{\Omega_F}$, $u_B = u\big|_{\Omega_B}$, $\Gamma_{BD} = \partial\Omega_B \cap \Gamma_D$ $\Gamma_{BN} = \partial\Omega_B \cap \Gamma_N$, $\Gamma_{FD} = \partial\Omega_F \cap \Gamma_D$, $\Gamma_{FN} = \partial\Omega_F \cap \Gamma_N$.

Енергетичний простір пробних функцій позначимо

$$H_D^1(\Omega_F) = \left\{ v_F \in H^1(\Omega_F) : v_F = 0 \quad \text{при} \quad x \in \Gamma_{FD} \right\}. \tag{4}$$

Зазначимо, що $\forall u \in H^1(\Omega_B)$, її слід $\overline{u} \in H^{1/2}(\partial\Omega_B)$, а $p \in H^{-1/2}(\partial\Omega_B)$ — простору, спряженому до $H^{1/2}(\partial\Omega_B)$. Скалярний добуток у $H^{1/2}(\partial\Omega_B)$, або відношення двоїстості між $H^{1/2}(\partial\Omega_B)$ і $H^{-1/2}(\partial\Omega_B)$, запишемо у вигляді

$$\langle p, u \rangle = \int_{\partial\Omega_B} (p, u) d\Gamma, \tag{5}$$

де $(\cdot,\cdot)$ — скалярний добуток в R^n.

Уведемо також підпростір

$$H_0^{-1/2}(\partial\Omega_B) := \left\{ \chi \in H^{-1/2}(\partial\Omega_B) : \langle \chi, 1 \rangle = 0 \wedge \langle \chi, r \rangle = 0 \right\},$$

де r — радіус-вектор точки.

Уведемо простір мортарних функцій

$$\tilde{u} \in H^{1/2}(\partial\Omega_B) := \left\{ \tilde{w} = w, x \in \partial\Omega_B : w \in H^1(\Omega)\, i \left\| \tilde{w} \right\|_{H^{1/2}(\partial\Omega_B)} := \inf \left\| w \right\|_{H^1(\Omega)} \right\}$$

і простір-добуток

$$\Re = \left\{ (w_F, \tilde{w}) \in H^1(\Omega_F) \times H^{1/2}(\partial\Omega_B) : \tilde{w} = w_F, x \in \Gamma_C \right\} \tag{6}$$

з нормою

$$\left\| (w_F, \tilde{w}) \right\|_{\Re} := \inf \left\{ \left\| w \right\|_{H^1(\Omega)}, w \in H^1(\Omega), w = w_F, x \in \Omega_F \; i \; w = \tilde{w}, x \in \partial\Omega_B \right\}.$$

Простір пробних функцій визначимо як

$$\Re_D = \left\{ (v_F, \tilde{v}) \in \Re : v_F \in H^1(\Omega_F) \; i \; \tilde{v} = 0, x \in \Gamma_{BD} \right\}. \tag{7}$$

Оскільки Δ^* — оператор задачі Ляме є симетричний та додатновизначений, то слабке формулювання для гетерогенної чисельної схеми можна записати так:

знайти

$$\left((u_F, \tilde{u}), u_B, p_B \right) \in \Re \times H^{1/2}(\Gamma_B) \times H^{-1/2}(\Gamma_B) \tag{8}$$

при

$$u_F = g, x \in \Gamma_{FD}, \tilde{u} = g, x \in \Gamma_{BD}, \tag{9}$$

що задовольняє варіаційне рівняння $\forall (v_F, \tilde{v}) \in \Re_D$

$$a_{\Omega_F}(u_F, v_F) + \langle p_B, \tilde{v} \rangle_{\Gamma_B} = \int_{\Gamma_{FN}} h v_F d\Gamma + \int_{\Gamma_{BN}} h \tilde{v} d\Gamma, \tag{10}$$

умови спряження

$$\int_{\Gamma_B} \left(\tilde{u} - u_B\right) \chi_B d\Gamma = 0 \ \text{ для } \forall \chi_B \in H_0^{-1/2}\left(\Gamma_B\right) \tag{11}$$

та граничне інтегральне рівняння

$$\left\langle \left(\frac{1}{2} I + K\right) u_B, \chi_B \right\rangle_{\Gamma_B} = \left\langle V p_B, \chi_B \right\rangle_{\Gamma_B}, \forall \chi_B \in H_0^{-1/2}\left(\Gamma_B\right) \tag{12}$$

У рівнянні (12) V і K — граничні інтегральні оператори пружного простого та подвійного шару, відповідно.

Постановка задачі (8)–(12) дозволяє використовувати апроксимації МСЕ і МГЕ у відповідних підобластях. Для розв'язування цієї задачі у роботах [1, 3, 4] розроблено паралельні та послідовні ітераційні алгоритми методу декомпозиції області (МДО), досліджено збіжність ітераційних схем, продемонстрована їх ефективність на модельних задачах.

Метод розв'язування. Незважаючи на велику кількість різних формулювань гібридних гранично-скінченноелементних методів у численних наукових публікаціях, відомо два основні способи реалізації МДО, тобто методів поділу області без налягання підобластей. Прямі методи [5] передбачають формування єдиної глобальної системи рівнянь для всієї області і їх, у свою чергу, можна поділити на дві підгрупи. У першому випадку підобласть для МГЕ трактується як один скінченний суперелемент (макроелемент). Рівняння МГЕ, які пов'язують переміщення і зусилля, перетворюють у рівняння зв'язку між силами та переміщеннями, як у МСЕ. У другому підході, шляхом відповідних перетворень, записують рівняння для підобласті МСЕ у вигляді, подібному до рівнянь МГЕ. Результуюча матриця системи лінійних рівнянь (СЛАР) при цьому втрачає властивість розрідженості і, у загальному випадку, симетричності. Альтернативою прямим методам є побудова ітераційних алгоритмів [1, 4], в яких рівняння для підобластей розв'язують окремо. У ітераційному процесі, граничні умови на спільній межі підобластей оновлюються, до тих пір поки не виконається умова збіжності. У [1, 4] досліджено ефективність застосування паралельних і послідовних ітераційних схем МДО для розв'язування різних задач, а також проведено аналіз їх збіжності.

У даній роботі розглядається підхід паралельної реалізації МДО на n_p процесорах, суть якого полягає у формуванням єдиної глобальної системи рівнянь для всієї області де підобласті для МГЕ трактуються як окремі скінченні суперелементи. У випадку послідовного алгоритму всі етапи розв'язування виконуються послідовно: введення вхідних даних; побудова сітки МСЕ чи МГЕ; обчислення локальних (елементних) матриць; формування матриць системи

$$Ax = b, \tag{13}$$

розв'язування системи лінійних алгебричних рівнянь (13).

У запропонованому підході глобальна система рівнянь для всієї області не формується. Алгоритм грунтується на представленні матриць і векторів для всієї області через локальні матриці та вектори для підобластей з використанням булевих матриць зв'язності, які відображають співвідношення між локальними степенями вільності та незалежними невідомими для всієї області.

Позначимо через $\tilde{A}_i$ матрицю жорсткості, $\tilde{x}_i$ — вектор невідомих, $\tilde{b}_i$ — вектор правих частин підобласті Ω_i без вкладів з сусідніх підобластей, а через $\overline{A}_i$, $\overline{x}_i$, $\overline{b}_i$ ті ж величини, але з вкладами з сусідніх підобластей у глобальніо розподіленому форматі. Також допустимо, що нумерація невідомих у підобласті здійснена від 1 до n_i, а N — розмірність системи (13). Глобальну матрицю жорсткості A можна представити, використовуючи булеву матрицю $C_i \in Z^{n_i \times N}$ (матрицю зв'язності), формулою

$$A = \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{A}_i C_i \,. \tag{14}$$

Аналогічно глобальні вектори x і b можна представити через глобально розподілені вектори $\overline{x}_i$ і $\overline{b}_i$

$$\overline{x}_i = C_i\, x, \quad \overline{b}_i = C_i\, b, \tag{15}$$

або через локально розподілені вектори $\tilde{\mathrm{x}}_i$ і $\tilde{\mathrm{b}}_i$

$$\mathrm{x} = \sum_{i=1}^{n_p} \mathrm{C}_i^T \tilde{\mathrm{x}}_i,\ \mathrm{b} = \sum_{i=1}^{n_p} \mathrm{C}_i^T \tilde{\mathrm{b}}_i \,. \tag{16}$$

Відповідно локально розподілені вектори $\tilde{x}_i$ і $\tilde{b}_i$, використовуючи формули (15), (16), можна перетворити у глобально розподілені вектори $\overline{x}_i$ і $\overline{b}_i$ за формулами

$$\overline{x}_i = C_i \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{x}_i, \quad \overline{b}_i = C_i \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{b}_i. \tag{17}$$

Необхідно відзначити, що саме обчислення за формулами (17) вимагають комунікації між процесорами, тобто здійснення обміну між процесорами частинами векторів $\tilde{x}_i$ і $\tilde{b}_i$, які необхідні для обчислення $\overline{\mathrm{x}}_i$ і $\overline{\mathrm{b}}_i$. Позначимо процедуру перетворення $\tilde{x}_i$ у $\overline{x}_i$ і $\tilde{b}_i$ у $\overline{b}_i$ як

$$\overline{x}_i \equiv \sum\nolimits_{\Leftrightarrow}^{\partial\Omega_i} \tilde{x}_i, \quad \overline{b}_i \equiv \sum\nolimits_{\Leftrightarrow}^{\partial\Omega_i} \tilde{b}_i \,. \tag{18}$$

Паралельний алгоритм розв'язування системи лінійних рівнянь методом спряжених градієнтів. Наступним етапом, який вима-

гає розпаралелення обчислень між n_p процесами, є розв'язування системи лінійних рівнянь. Подамо алгоритм на основі методу спряжених градієнтів (МСГ), який не вимагає побудови глобальної матриці жорсткості та дає можливість ефективно використовувати паралельні обчислення. Основні кроки алгоритму:

1.1. Вибрати початкове наближення $\overline{x}_i^0 (i = 1, n_p)$ і точність обчислення $\varepsilon > 0$.

1.2. Обчислити $\tilde{r}_i^0 = \tilde{b}_i - \tilde{A}_i \overline{x}_i^0$.

1.3. Перетворити $\tilde{r}_i^0$ у $\overline{r}_i^0 \equiv \sum_{\Leftrightarrow}^{\partial\Omega_i} \tilde{x}_i$. Для цього здійснюється пересилка між процесорами тих частин векторів $\tilde{r}_i^0$, які роблять вклад у сусідні області з подальшим їх сумуванням.

1.4. Задати $\overline{p}_i^0 = \tilde{r}_i^0$ і $k = 0$ (номер ітерації).

1.5. Обчислити $\left\| r^0 \right\|_2$. Для цього використовуються елементи вектора $\overline{r}_i^0$. Ті частини вектора, які належать декільком областям Ω_i враховуються тільки один раз.

2.1. Обчислити скалярний добуток $\rho_k = \sum_{i=1}^{n_p} \left(\tilde{r}_i^k, \overline{p}_i^k \right)$. Для цього кожний процес обчислює $\left(\tilde{r}_i^k, \overline{p}_i^k \right)$. Дальше проводиться сумування результатів з усіх процесів з відправкою на процес з номером 0, а потім розсилка ρ_k на усі процеси.

2.2. Обчислити $\tilde{q}_i^k = \tilde{A}_i \overline{p}_i^k$.

2.3. Аналогічно до кроку 2.1 обчислити $\gamma_k = \sum_{i=1}^{n_p} \left(\tilde{q}_i^k, \overline{p}_i^k \right)$.

2.4. Обчислити $\alpha_k = \dfrac{\rho_k}{\gamma_k}$.

2.5. Обчислити нове наближення $\overline{x}_i^{k+1} = \overline{x}_i^k + \alpha_k \overline{p}_i^k$.

2.6. Обчислити $\tilde{r}_i^{k+1} = \tilde{r}_i^k - \alpha_k \tilde{q}_i^k$.

2.7. Аналогічно до кроку 1.3 обчислити $\overline{r}_i^{k+1}$.

2.8. Обчислити $\left\| r^{k+1} \right\|_2$ (аналгічно до кроку 1.5).

2.9. Здійснити перевірку збіжності $\left\| r^{k+1} \right\|_2 \Big/ \left\| r^0 \right\|_2 < \varepsilon$. Якщо «так», то припинити алгоритм, інакше продовжити обчислення.

3.1. Обчислити $g_k = \sum_{i=1}^{n_p} \left(\overline{r}_i^{k+1}, \tilde{q}_i^k \right)$.

3.2. Обчислити $\beta_k = \frac{g_k}{\gamma_k}$.

3.3. Обчислити $\overline{p}_i^{k+1} = \overline{r}_i^{k+1} - \beta_k \overline{p}_i^k$.

3.4. Збільшити k на одиницю і перейти до кроку 2.1.

Тестовий приклад. Апробація запропонованого підходу до розпаралелення обчислень у методі декомпозиції області проводилась на кластері Львівського національного університету імені Івана Франка, який складається з 14 обчислювальних вузлів і сервера. Обчислювальні вузли — AMD® Athlon II 2x із частотою 2,9 ГГц, 8 Гб ОЗП, 500 Гб HDD. GPU — Nvidia GTS450 (CUDA 2.1). Операційна система: Scientific Linux 6.2 (ядро 3.6.6). Усі обчислювальні вузли для обміну даними між паралельними процесами користувацьких задач об'єднані мережею Ethernet 1 Гбіт/с.

Дослідження проводились на одному (послідовний алгоритм), двох і чотирьох вузлах. Для цього область Ω розбивалась на дві ($n_p = 2$) і чотири підобласті ($n_p = 4$). Розбиття всієї області і кожної підобласті здійснювалось таким чином, щоб розмірність СЛАР була однаковою у всіх трьох випадках, тобто для послідовного алгоритму, паралельного на двох процесорах і паралельного на чотирьох процесорах. У таблиці 1 наведено результати обчислень для різної кількості розбиття на елементи. У першому стовбці таблиці наведено розмірність СЛАР, стовбці таблиці 4 і 6 містять відношення часу обчислення на одному процесорі до відповідного часу на кожному з двох або чотирьох процесорів, тобто ефективність використання паралельних обчислень.

Таблиця 1

Результати обчислень

розмірність СЛАР	**послідовний алгоритм (час)**	**2 процесори (час)**	**2 процесори (прискорення)**	**4 процесори (час)**	**4 процесори (прискорення)**
1 268	1.49	0.51	2.92	0.38	3.96
7 132	142.99	38.24	3.74	14.46	9.89
14 300	884.45	227.24	3.89	60.28	14.67

Висновки. Запропонована гетерогенна числова модель дозволяє використовувати в одній частині підобластей апроксимації методу скінченних елементів, а в іншій — прямого методу граничних елементів. Такий підхід особливо ефективний у випадку наявності у задачі локальних неоднорідностей. Розроблений паралельний алгоритм розв'язування СЛАР на основі методу спряжених градієнтів дозволяє

не формувати глобальну матрицю у МДО, що значно скорочує загальний час розрахунку задачі. Як видно з результатів таблиці 1 у залежності від розміру задачі та структури сітки зменшення часу обчислень становило від 3-4 до 10-14 разів.

Список використаних джерел:

1. Григоренко А. Я. Применение метода декомпозиции области с использованием гибридных аппроксимаций для решения задач теории упругости / А. Я. Григоренко, И. И. Дыяк, И. И. Прокопышин // Прикладная механика. — 2008. — Т. 44, № 11. — С. 18–29.
2. Дияк І. І. Чисельне дослідження плоскої задачі теорії пружності методом граничних елементів / І. І. Дияк // Мат. методи та фіз.-мех. поля. — 1997. — Т. 40. — С. 60–64.
3. Дияк І. Числова ефективність гібридних скінченно-граничноелементних апроксимацій задач теорії пружності на підставі методу декомпозиції області / І. Дияк, І. Макар, І. Прокопишин // Вісник Львівського університету. — 2007. — № 12: Серія прикладна математика та інформатика. — С. 93–100.
4. Dyyak I. I. Domain Decom¬position Methods for Problems of Unilateral Contact Between Elastic Bodies with Nonlinear Winkler Covers / I. I. Dyyak, I. I. Prokopyshyn, R. M. Martynyak, I. A. Prokopyshyn // Lecture Notes in Computational Science and Engineering / ed. J. Erhel, M. J. Gander and oth. Springer Int. Publ. Switzerland. — 2014. — P. 739–748.
5. Elleithy W. Analysis of Problems in Elasto-Plasticity via an Adaptive FEM-BEM Coupling Method / W. Elleithy // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2008. — Vol. 197, Issues 45–48. — P. 3687–3701.

The parallel computing for solving the problems of elasticity by domain decomposition method is used. The heterogeneous numerical model is formulated. We use the finite element method in one of the subdomains and a direct boundary element method in another. Parallel algorithm based on conjugate gradient method is developed for solving a system of linear equations. The results of testing the proposed approach for modeling example are considered.

Key words: *domain decomposition method, parallel computing, finite element method, direct boundary element method, parallel conjugate gradient method.*

Отримано: 04.04.2016