



Българска Академия на Науките
Институт по Информационни и
Комуникационни Технологии

Явор Иванов Вутов

ПАРАЛЕЛНИ ИТЕРАЦИОННИ МЕТОДИ
ЗА
НЕКОНФОРМНИ КРАЙНИ ЕЛЕМЕНТИ

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

на дисертация за присъждане на
образователната и научна степен „Доктор“

Научна специалност: 01.01.13 – „Математическо моделиране и приложение на математиката“

Професионално направление: 4.5 – „Математика“

Научен ръководител: чл.-кор. Светозар Маргенов

София, 2015г.



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 :

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

Тогава 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 МПС(0) преобусловител	2D	$O(N^{5/4})$	$O(N)$
МСГ с МПС(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 *паралелизацията*. 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 ($MIC(0)$). 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 $MIC(0)$ преобусловител за тримерни елиптични задачи, дискретизирани чрез неконформни крайни елементи на Ранахер–Турек.
- Разработване и изследване на паралелен блочен $MIC(0)$ 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:

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

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

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

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 коефициентна 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:

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

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

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

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 функцията $u_h \in \mathcal{V}_h$ 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*.

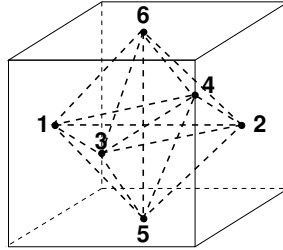
Крайни елементи на Ранахер и Турек

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 интерполационен 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 интерполационни 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 МСПП 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:

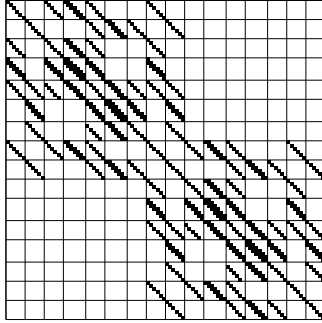
$$\mathbf{x}^k = (L^{k,k})^{-1} \left(\mathbf{b}^k - \sum_{l=1}^{k-1} L^{l,k} \mathbf{x}^l \right), \quad \text{за } k=1, \dots, m. \quad (2.15)$$

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 изобразени 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.

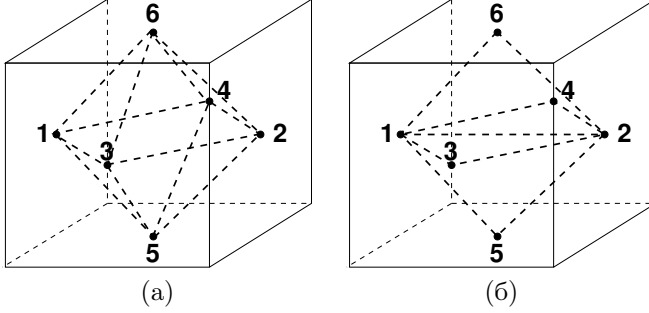
Вариант 1:

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

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.

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

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

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

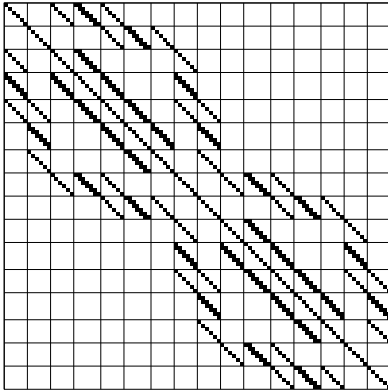
$$B_{opt}^2 = \begin{bmatrix} 4b+a & -a & -b & -b & -b & -b \\ -a & 4b+a & -b & -b & -b & -b \\ -b & -b & 2b & & & \\ -b & -b & & 2b & & \\ -b & -b & & & 2b & \\ -b & -b & & & & 2b \end{bmatrix} \quad a \geq 0, \quad b > 0, \quad (2.23)$$

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:

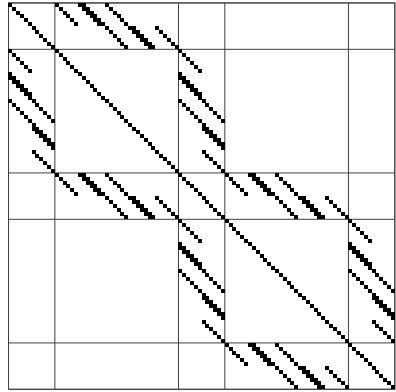
$$\kappa \left((B_e^{MP})^{-1} A_e^{MP} \right) \leq 3, \quad \text{и} \quad \kappa \left((B_e^{MV})^{-1} A_e^{MV} \right) \leq 6. \quad (2.24)$$

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 \mathbf{y}^i . Тъй като блоковете \tilde{L}_{ii} , са диагонални, изчисленията за всеки елемент \mathbf{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 \mathbf{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

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

а за Вариант 2

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

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

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

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

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

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 изпълнени 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 МІС(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 $I_L^{Q^H}$ 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

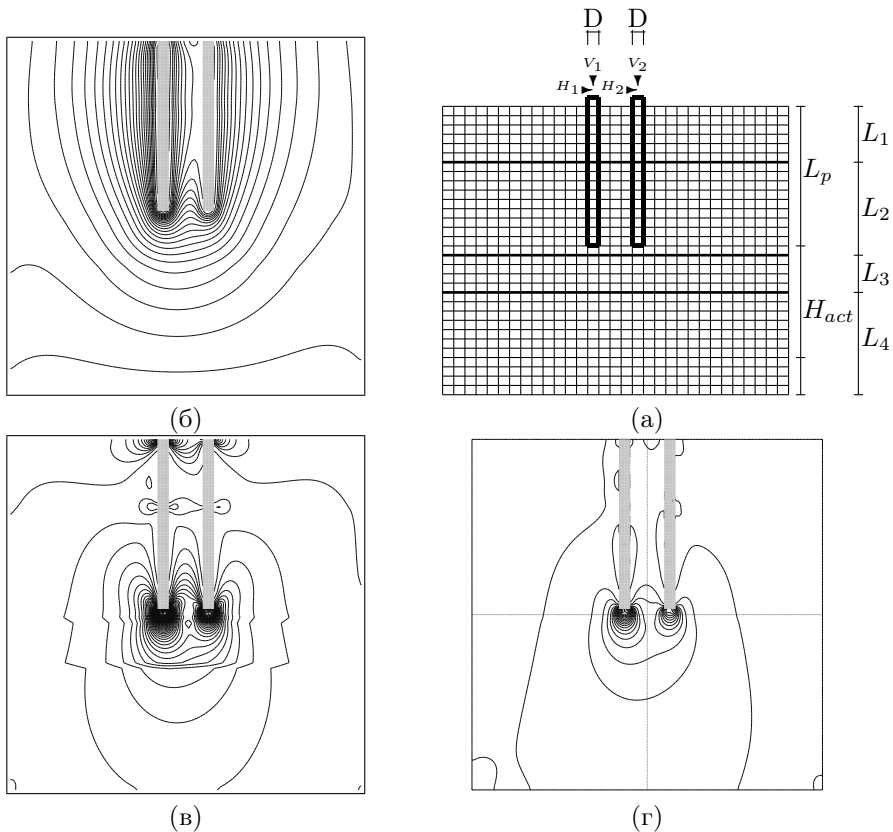
Таблица 4: Паралелни ускорения и ефективности

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

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

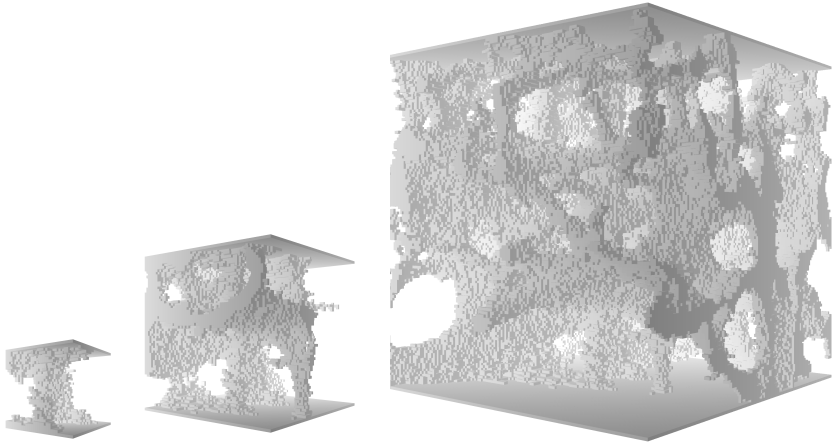
Остеопорозата е болест на костната система. Тя е свързана със загуба на костна маса, като загубата е най-осезаема в трабекуларната част. В следствие на намаляването на плътността на твърдата фаза, костите стават по-податливи на счупвания. От болестта са силно застрашени жените в менопауза, както и двата 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 екземпляр: $32 \times 32 \times 32$ – 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

		$\zeta = 1$				$\zeta = 0.1$				$\zeta = 0.01$				$\zeta = 0.001$			
		MIC(0)		AMG		MIC(0)		AMG		MIC(0)		AMG		MIC(0)		AMG	
n	p	$T[s]$	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. Menzel, 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. Saporin 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.