Srovnání některých metod domain decomposition

Bedřich Sousedík

obor: Matematika ve stavebním inženýrství

školitel: Prof. RNDr. Ivo Marek, DrSc.
školitel specialista: Professor Jan Mandel

Katedra matematiky
Fakulta stavební
České vysoké učení technické v Praze

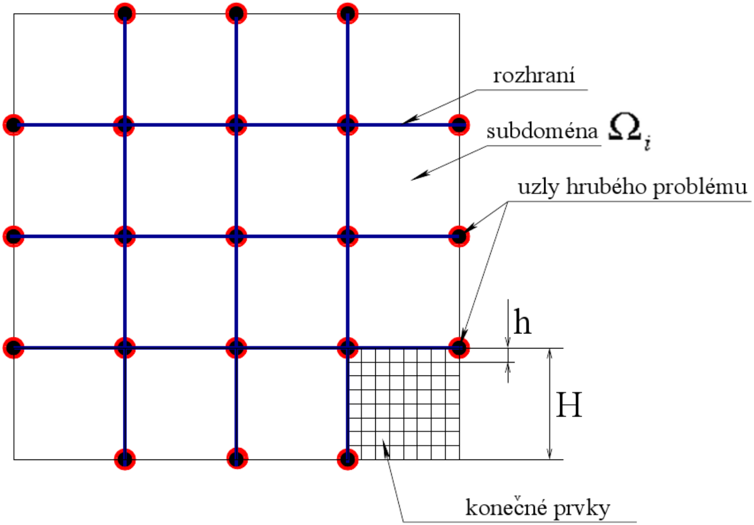
Praha, 17. prosince 2008

Stručný přehled disertační práce

Studium metod domain decomposition *(rozkladu oblasti)*:
BDD – Balancing Domain Decomposition (Mandel 1993),
FETI – Finite Element Tearing and Interconnecting (Farhat, Roux 1991),
a jejich variant: BDDC, P-FETI, FETI-DP a P-FETI-DP.

1.
   - Nalezení minimálního základu pro formulaci metod.
   - Odvození všech zmíněných metod.
   - Porovnání některých dvojic metod:
     - Ekvivalence spekter předpodmíněných operátorů.
     - P-FETI-DP=BDDC a jistých předpokladů P-FETI = BDD.
     - Sestrojení odhadu čísla podmíněnosti BDDC a FETI-DP.
2.
   - Navržení heuristického adaptivního algoritmu zlepšujícího konvergenci BDDC a FETI-DP.
   - Numerické experimenty ve 2D a 3D.

Příklad rozkladu oblasti



Obecná formulace řešené úlohy

Řešíme variační úlohu

$$u \in \widehat{W} : a\left(u, v\right) = \langle f, v \rangle \quad \forall v \in \widehat{W},$$

kde $\widehat{W}$ je konečněrozměrný prostor, ve kterém hledáme řešení,
$a\left(\cdot, \cdot\right)$ je symetrická pozitivně definitní bilineární forma na $\widehat{W}$,
$f \in \widehat{W}'$ je vektor pravé strany

Studované metody jsou charakterizovány výběrem větších prostorů

$$\widehat{W} \subset \widetilde{W} \subset W.$$

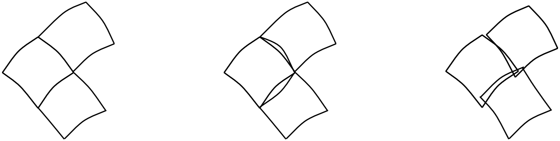
kde

$$a\left(\cdot, \cdot\right) \text{ je pozitivně definitní na } \widetilde{W},$$
$$a\left(\cdot, \cdot\right) \text{ je pozitivně semidefinitní na } W.$$

Formulace metod: prostory

Rozdíly mezi prostory/operátory dány stupněm sestavení globální matice tuhosti.

A – sestavení matice tuhosti podoblastí,
B – sestavení globální matice tuhosti,
C – spojitost přes rozhraní.



	$\widehat{W}$	$\subset$	$\widetilde{W}$	$\subset$	W
A	plně		plně		plně
B	plně		částečně		vůbec
C	plná		pouze v rozích		žádná

$$\widehat{S}:\widehat{W}\to\widehat{W}',\quad \left\langle \widehat{S}v,w\right\rangle = a\left(v,w\right)\quad \forall v,w\in\widehat{W},$$

$$\widetilde{S}:\widetilde{W}\to\widetilde{W}',\quad \left\langle \widetilde{S}v,w\right\rangle = a\left(v,w\right)\quad \forall v,w\in\widetilde{W},$$

$$S:W\to W',\quad \left\langle Sv,w\right\rangle = a\left(v,w\right)\quad \forall v,w\in W.$$

Formulace metod: operátory a předpoklady

Metody jsou formulovány pomocí lineárních operátorů:

- E ... projekce na $\widehat{W}$,
$$E : W \to \widehat{W}.$$
- R ... vnoření z $\widehat{W}$ do W.
- B ... zajišťuje splnění podmínky $u \in \widehat{W}$ jako
$$Bu = 0 \Leftrightarrow u \in \widehat{W}.$$
- B_D^T ... je zobecněnou inverzí B.

Předpokládáme, že
$$B_D^T B + RE = I.$$

Metody na W: FETI, P-FETI a BDD

(úplný rozklad na podoblasti)

- **F**inite **E**lement **T**earing and **I**nterconnecting (Farhat a Roux 1991):
  – spojitost přes rozhraní zajištěna Lagrangeovými multiplikátory λ,
  – iterační řešení duálního systém pro λ,
  – spojité primární řešení získáme po ukončení iteračního cyklu.
- **P-FETI** (Primal-FETI, Fragakis a Papadrakakis 2003)
  – založena na jednom kroku metody FETI.
- **B**alancing **D**omain **D**ecomposition (Mandel 1993):
  – iterační řešení problému v primárních proměnných.
- Špatná konvergence pro biharmonické problémy (desky, skořepiny). Důvod: číslo podmíněnosti závisí na "skocích" přes rohy podoblastí.

  Efektivní řešení: formulace metod na prostoru $\widetilde{W}$...

Metody na $\widetilde{W}$: FETI-DP, P-FETI-DP a BDDC

(spojitost v rozích podoblastí vynucena a-priori)

- **FETI**-**D**ual, **P**rimal (Farhat et al 2001).
- **P-FETI-DP** (nezávisle Fragakis a Papadrakakis 2003, Cros 2003) – založena na jednom kroku metody FETI-DP.
- **B**alancing **D**omain **D**ecomposition by **C**onstraints (Dohrmann 2003).

Maticový zápis předpodmíněných operátorů FETI-DP a BDDC je

$$P_{FETI-DP} = \left(B_D \widetilde{S} B_D^T\right)\left(B \widetilde{S}^{-1} B^T\right),$$

$$P_{BDDC} = \left(E \widetilde{S}^{-1} E^T\right)\left(R^T \widetilde{S} R\right),$$

kde $\widetilde{S}$ je symetrický, pozitivně definitní operátor na prostoru $\widetilde{W}$.

Porovnání metod: hlavní výsledky

Theorem

Předpodmiňovač dle Crose, P-FETI-DP a BDDC jsou stejné (vše 2003).

Theorem (Mandel, Dohrmann, Tezaur (2005), Mandel, B.S. (2007))

Vlastní čísla předpodmíněných operátorů FETI-DP a BDDC splňují $1 \leq \lambda \leq \omega_{FETI-DP}$ a $1 \leq \lambda \leq \omega_{BDDC}$, kde

$$\omega_{BDDC} = \|RE\|_{\widetilde{S}}^2, \quad \omega_{FETI-DP} = \|B_D^T B\|_{\widetilde{S}}^2.$$

Navíc, jestliže platí $\widetilde{W} \neq \widehat{W}$, pak také

$$\omega_{BDDC} = \omega_{FETI-DP}.$$

Tato věta je klíčem k adaptivnímu předpodmínění pro FETI-DP a BDDC.

Vycházíme z předpokladu

$$B_D^T B + RE = I \quad \Rightarrow \quad B_D^T B = I - RE,$$

a z algebraického odhadu čísla podmíněnosti. Jejich kombinací obdržíme

$$\omega = \sup_{w \in \widetilde{W}} \frac{\left\| B_D^T B w \right\|_{\widetilde{S}}^2}{\| w \|_{\widetilde{S}}^2} = \sup_{w \in \widetilde{W}} \frac{\| (I - RE)\, w \|_{\widetilde{S}}^2}{\| w \|_{\widetilde{S}}^2}.$$

Odhad přepíšeme jako zobecněný problém vlastních čísel na prostoru $\widetilde{W}$,

$$(I - RE)^T\, \widetilde{S}\, (I - RE)\, w = \lambda \widetilde{S} w,$$

kde matice $\widetilde{S}$ je SPD a ω je stejná jako největší vlastní číslo λ_{max}.

Zaveďme nový prostor $\widetilde{W}^{avg}$ jako

$$\widehat{W} \subset \widetilde{W}^{avg} \subset \widetilde{W} \subset W,$$

Prostor $\widetilde{W}^{avg}$ definujeme ("svázáním podoblastí průměry"), jako

$$\widetilde{W}^{avg} = \left\{ w \in \widetilde{W} : Q_D^T B w = 0 \right\}, \qquad (\textbf{FETI-DP}, \text{ Mandel, B.S. (2007)})$$

$$\widetilde{W}^{avg} = \left\{ w \in \widetilde{W} : D^T w = 0 \right\}, \qquad (\textbf{BDDC}, \text{ Mandel, B.S., Šístek})$$

kde Q_D je duální váhová matice, D je vazební matice a platí, že

$$Q_D^T B = D^T.$$

Prostor $\widetilde{W}^{avg}$ je podprostor funkcí z $\widetilde{W}$ orthogonálních "k něčemu".

Optimální konstrukce prostoru $\widetilde{W}^{avg}$ je dána následovně:

Theorem

Nechť w_i jsou vlastní vektory a λ_i vlastní čísla zobecněného problému, bez ztráty na obecnosti uspořádaná jako $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq 0$. Nechť $k \geq 0$. Definicí (nových řádek) operátoru D daných jako

$$\begin{aligned} d_i^T &= w_i^T (I - RE)^T \widetilde{S} (I - RE), \quad i = 1, \ldots, k \\ D &= \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & \ldots & d_k \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

zajistíme, že $\omega = \lambda_{k+1}$. Dále platí, že $\omega \geq \lambda_{k+1}$ pro jakoukoliv jinou konstrukci D^T pomocí nejvýše k řádek.

Nevýhoda: Výpočet globálních vlastních vektorů je výpočetně náročný. Numerické experimenty také ukazují, že mnohdy stači přidat vazby pouze lokálně, abychom rapidně zlepšili konvergenci algoritmu...

Lokální vazby a adaptivní algoritmus

... větu nahradíme "lokální" verzí pro dvojice **přilehlých** podoblastí, a poté definujeme heuristický indikátor čísla podmíněnosti

$$\widetilde{\omega} = \max_{\{ij\} \in \mathcal{A}} \omega_{ij}.$$

Algoritmus: Přidání vazeb ke snížení hodnoty heuristického indikátoru $\widetilde{\omega}$ tak, aby $\omega_{ij} \leq \tau$ pro a-priori stanovený ukazatel τ.

1. Spočti největší lokální vlastní čísla a vektory dokud nenalezneš index ℓ_{ij} takový, že $\lambda_{ij,\ell_{ij}+1} \leq \tau$ a tedy

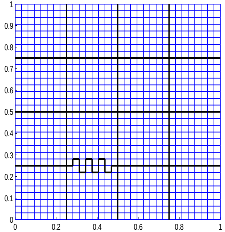
$$\widetilde{\omega} = \max_{\{ij\} \in \mathcal{A}} \lambda_{ij,k_{ij}+1} \leq \tau$$

2. Použij tyto vlastní vektory ke konstrukci "lokálních" vazeb $d_{ij,\ell}$.
3. Přidej do matice D tyto vazby "globálně" jako její nové sloupce, pomocí jednoduchého vnoření $\mathcal{R}_{ij}$ (rozšíření nulami) jako

$$D = \left[\ \dots \quad \mathcal{R}_{ij}^T D_{ij,\ell} \quad \dots \ \right], \qquad \forall \{ij\} \in \mathcal{A}, \quad \ell = 1, \dots, k_{ij}.$$

Numerické výsledky ve 2D: stlačitelná elasticita, $\lambda = 1$, $\mu = 2$

H/h	Ndof	τ	Nc	$\widetilde{\omega}$	κ	it
4	578	∞	-	11.3	5.5	20
		10	1	5.4	4.9	19
		3	20	2.8	2.5	14
		2	42	1.8	1.7	11
16	8450	∞	-	24.2	18	37
		10	11	9.1	8.7	28
		3	75	<3	2.5	15
		2	93	<2	2.0	13
64	132098	∞	-	99.6	44	55
		10	56	<10	9.9	35
		3	135	<3	2.9	17
		2	209	<2	2.0	13



Ndof: počet stupňů volnosti

τ: žádané č. podmíněnosti

Nc: počet vazeb v matici D

$\widetilde{\omega}$: heuristický indikátor

κ: odhad č. podm. z PCG

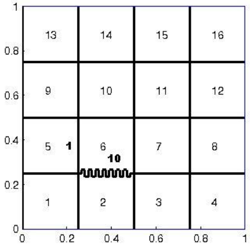
it: počet iterací

tolerance: 10^{-8}

Vlastní čísla lokálních úloh pro dvojice přilehlých podoblastí i a j:

i	j	$\lambda_{ij,1}$	$\lambda_{ij,2}$	$\lambda_{ij,3}$	$\lambda_{ij,4}$	$\lambda_{ij,5}$
1	2	5.5	3.6	1.7	1.5	1.3
1	5	6.7	3.6	3.0	1.4	1.3
2	3	8.6	3.6	1.9	1.7	1.3
2	6	24.2	18.0	18.0	16.5	16.4
3	4	5.2	3.3	1.7	1.4	1.2
3	7	7.9	4.7	3.8	1.8	1.5
4	8	6.4	3.6	2.7	1.4	1.4
5	6	12.6	5.2	4.4	1.9	1.6
5	9	6.1	3.6	2.8	1.4	1.3
6	7	8.7	4.9	4.1	1.8	1.5
6	10	7.5	4.7	3.8	1.8	1.5

Počty průměrů při $\tau = 10$:

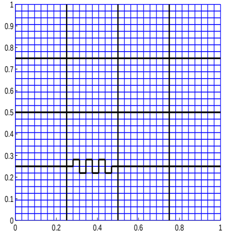


Očíslování podoblastí:

13	14	15	16
9	10	11	12
5	6	7	8
1	2	3	4

Numerické výsledky ve 2D: téměř nestlačitelná elasticita, $\lambda = 10000$, $\mu = 2$

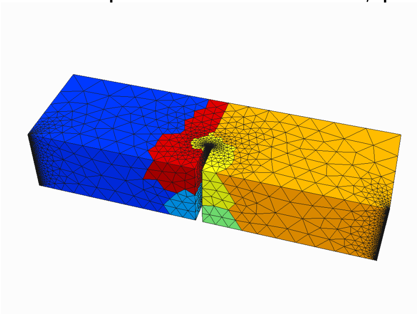
H/h	Ndof	τ	Nc	$\widetilde{\omega}$	κ	it
4	578	∞	-	2746	1935	147
		10	76	4.5	3.5	17
		5	76	4.5	3.5	17
		3	78	2.9	2.8	16
16	8450	∞	-	10246	10217	342
		10	61	9.6	6.7	28
		5	76	4.5	3.5	17
		3	78	2.9	2.8	16
64	132098	∞	-	33698	NA	∞
		10	178	9.8	9.8	39
		5	235	5.0	4.9	28
		3	282	3.0	2.9	20

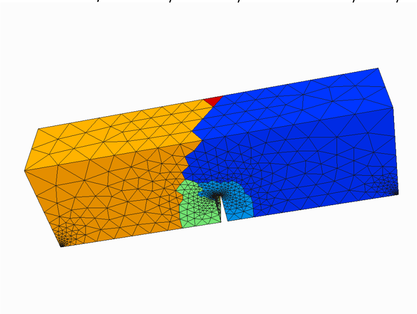


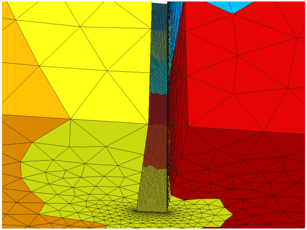
Ndof: počet dof
τ: žádané č. podm.
Nc: počet vazeb v D
$\widetilde{\omega}$: heuristický indikátor
κ: odhad č. podm.
it: počet iterací
tolerance: 10^{-8}

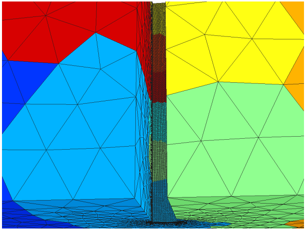
Numerické výsledky ve 3D (data: doc. J. Kruis, vizualizace: M. Brezina)

počet stupňů volnosti: 143451, podoblastí: 8, rohů/hran/stěn: 31/18/19









Numerické výsledky ve 3D: Nosník s vrubem

počet stupňů volnosti: 143451, podoblastí: 8, rohů/hran/stěn: 31/18/19

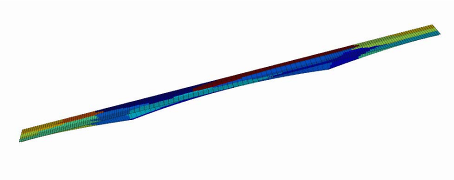
typ vazby	*Nc*	κ	*it*
c	-	127.09	79
c+e	111	100.97	61
c+e+f	168	22.43	32
c+e+f (3eigv)	168	13.23	30

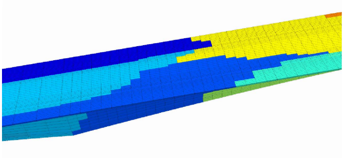
τ	$\widetilde{\omega}$	*Nc*	κ	*it*
∞(=c+e)	149.029	111	100.97	61
10	9.996	134	8.50	31
5	4.993	163	4.65	24
2	1.993	340	2.14	14

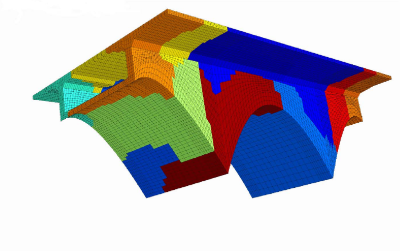
τ: žádané č. podm., $\widetilde{\omega}$: heuristický indikátor, *Nc*: počet vazeb,
κ: odhad č. podm. předpodmíněného operátoru, *it*: počet iterací (tol=10^{-8})

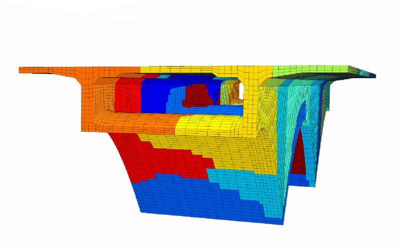
Numerické výsledky ve 3D (data: doc. J. Kruis, vizualizace: M. Brezina)

počet stupňů volnosti: 157356, podoblastí: 16, rohů/hran/stěn: 250/30/43









Numerické výsledky ve 3D: Mostní konstrukce

počet stupňů volnosti: 157356, podoblastí: 16, rohů/hran/stěn: 250/30/43

typ vazby	Nc	κ	it
c	-	2301.37	224
c+e	180	2252.39	220
c+e+f	309	653.61	160
c+e+f (3eigv)	309	177.77	103

τ	$\widetilde{\omega}$	Nc	κ	it
∞(=c+e)	6500.50	180	2252.39	220
650	589.338	185	483.52	169
30	29.568	292	28.74	64
5	4.997	655	5.01	26
2	1.998	1301	2.01	14

τ: žádané č. podm., $\widetilde{\omega}$: heuristický indikátor, Nc: počet vazeb,
κ: odhad č. podm. předpodmíněného operátoru, it: počet iterací (tol=10^{-8})

Závěr: přehled hlavních výsledků práce

- Nalezení minimálního základu pro formulaci metod BDD, BDDC, FETI, FETI-DP a jejich primárních variant P-FETI, P-FETI-DP.
- Odvození všech zmíněných metod z minimálního základu.
- Nová formulace metody BDDC pomocí zobecnění změny proměnných podle práce autorů Li a Widlund (spolupráce s Dr. Šístkem).
- Důkaz, že P-FETI-DP = BDDC = předpodmiňovač navržený Crosem.
- Sestrojení odhadu čísla podmíněnosti FETI-DP a BDDC.
- Navržení adaptivního algoritmu zlepšujícího konvergenci obou metod.
- Vývoj programů a numerické experimenty ve 2D i 3D.

Korektury:

`http://math.ucdenver.edu/~sousedik/papers/BSthesisCZerrata.pdf`

Závěr: nástin budoucí práce

- Paralelní implementace adaptivního algoritmu včetně efektivního výběru počátečních vazeb (probíhá s Dr. Novotným a Dr. Šístkem).
- Teoretické zdůvodnění adaptivního algoritmu.
- Multilevel BDDC pro lineární elasticitu. Pro skalární úlohy:

Jan Mandel, Bedřich Sousedík, Clark Dohrmann: Multispace and Multilevel BDDC. *Computing*, 83(2-3):55–85, 2008.

- Kombinace adaptivního algoritmu a Multilevel BDDC.

$$\Longrightarrow$$

Efektivní řešení velkých a výpočetně náročných úloh.

Seznam prací vztahujících se k disertaci

Bedřich Sousedík, Jan Mandel:
On the equivalence of primal and dual substructuring methods.
To appear in ETNA, October 2008.

Jan Mandel and Bedřich Sousedík:
BDDC and FETI-DP under minimalist assumptions.
Computing, 81:269–280, 2007.

Jan Mandel and Bedřich Sousedík:
Adaptive selection of face coarse degrees of freedom in the BDDC and the FETI-DP iterative substructuring methods.
Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 196(8):1389–1399, 2007.

Jan Mandel and Bedřich Sousedík:
Adaptive coarse space selection in the BDDC and the FETI-DP iterative substructuring methods: Optimal face degrees of freedom.
In *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVI, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, vol. 55*, pages 421–428. Springer-Verlag, 2006.

Účast na řešení grantových projektů

- GA ČR, granty (strojní f., Prof. Burda, Dr. Novotný):
  - 106/05/2731
  - 106/08/0403
- Program Informační společnosti AV ČR:
  - 1ET 400300415 (Ústav Informatiky AV ČR, Prof. Marek)
  - 1ET 400760509 (Ústav Termomechaniky AV ČR, Dr. Novotný)
- Výzkumný projekt CEZ MSM 6840770003 (stavební f., Prof. Bittnar)
- National Science Foundation (University of Colorado, Prof. Mandel):
  - CNS-0325314
  - CNS-0719641
  - DMS-0713876