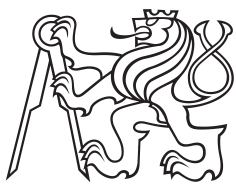


Bakalářská práce (verze pro Bažantovu soutěž)



České
vysoké
učení technické
v Praze

F1

Fakulta stavební
Katedra mechaniky

Porovnání a úprava duálních metod dělení oblasti pro úlohy modulární topologické optimalizace

Tomáš Medřický

Školitel: Ing. Martin Doškář, Ph.D.
Obor: Konstrukce a dopravní stavby
Květen 2022

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

I. OSOBNÍ A STUDIJNÍ ÚDAJE

Příjmení: Medřický Jméno: Tomáš Osobní číslo: 484634
Zadávací katedra: K132 - Katedra mechaniky
Studijní program: Stavební inženýrství
Studijní obor: Konstrukce a dopravní stavby

II. ÚDAJE K BAKALÁŘSKÉ PRÁCI

Název bakalářské práce: Porovnání a úprava duálních metod dělení oblasti pro úlohy modulární topologické optimalizace

Název bakalářské práce anglicky: Comparison and adaptation of dual domain decomposition methods for modular topology optimization problems

Pokyny pro vypracování:

- Studium a implementace standardních duálních metod dělení oblastí
- Kritické zhodnocení vhodnosti jednotlivých metod pro řešení soustav lineárních rovnic objevujících se v úlohách modulární topologické optimalizace
- Návrh heuristického algoritmu pro zlepšení konvergence existujících metod

Seznam doporučené literatury:

C. Farhat, F.-X. Roux. A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *UNIME* 32(5): 1205 – 1227, 1991.
P. Gosselet, D. Rixen, F.-X. Roux, N. Spillane. Simultaneous FETI and block FETI. Robust domain decomposition with multiple search directions. *UNIME* 104(10):905 – 927, 2015.

Jméno vedoucího bakalářské práce: Ing. Martin Doškál, Ph.D.

Datum zadání bakalářské práce: 17. 2. 2022

Termín odevzdání BP v IS KOS 15. 5. 2022

Údaj uveďte v souladu s datem v časovém plánu příslušného ak. roku


Podpis vedoucího práce


Podpis vedoucího katedry

III. PŘEVZETÍ ZADÁNÍ

Beru na vědomí, že jsem povinen vypracovat bakalářskou práci samostatně, bez cizí pomoci, s výjimkou poskytnutých konzultací. Seznam použité literatury, jiných pramenů a jmen konzultantů je nutné uvést v bakalářské práci a při citování postupovat v souladu s metodickou příručkou ČVUT „Jak psát vysokoškolské závěrečné práce“ a metodickým pokynem ČVUT „O dodržování etických principů při přípravě vysokoškolských závěrečných prací“.

17. 2. 2022
Datum převzetí zadání


Podpis studenta(ky)

Poděkování

Děkuji vedoucímu mé práce Ing. Martinu Doškářovi, Ph.D. za odborné rady, lidský přístup a za veškerý čas, který byl ochotný mi věnovat na obohacujících konzultacích. Mé velké poděkování si zaslouží také doc. RNDr. Ivana Pultarová, Ph.D. za pomocné rady, poskytnuté informace a trpělivost při konzultacích, které mi laskavě poskytla. Dále bych chtěl poděkovat prof. Ing. Janu Zemanovi, Ph.D. za důvěru a možnost věnovat se pro mě novému, ale velmi zajímavému tématu. Děkuji také Ing. Marku Tyburcovi, Ph.D. za poskytnuté testovací úlohy.

Můj obdiv za podporu patří také celé mé rodině.

Předložená práce vznikla za finančního přispění Grantové agentury České republiky, projekt č. 19-26143X.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou bakalářskou práci na téma „Porovnání a úprava duálních metod dělení oblasti pro úlohy modulární topologické optimalizace“ zpracoval sám pouze za odborného vedení Ing. Martina Doškáře, Ph.D. a všechny zdroje jsou řádně ocitované v seznamu použité literatury.

V Praze dne

Podpis

Abstrakt

Předmětem této bakalářské práce je implementace, porovnání a kritické zhodnocení vhodnosti využití duálních metod doménové dekompozice na úlohy modulární topologické optimalizace. Naimplementovány byly metody založené na principu Lagrangeových multiplikátorů Total FETI a FETI Dual-Primal včetně několika z literatury známých variant zvyšující robustnost a rychlost konvergence. Srovnány byly kromě různých přístupů k řešení hrubé úlohy také možná škálování a různé podoby projekcí. V rámci práce bylo dále navrženo heuristické kritérium pro adaptivní zvýšení robustnosti FETI-DP.

Klíčová slova: doménová dekompozice, modulární topologická optimalizace, FETI, iterativní řešiče

Školitel: Ing. Martin Doškář, Ph.D.
Katedra mechaniky
Fakulta stavební ČVUT v Praze
Thákurova 7
166 29 Praha 6

Abstract

The aim of this bachelor thesis is to implement, compare and critically assess the performance and overall suitability of several variants of dual domain decomposition methods for modular topology optimization problems. Two methods based on Lagrange multipliers principle — Total FETI and Dual-Primal — with several enhancements known from literature are considered. Apart from various approaches to solving the coarse problem, different scaling possibilities and projection options are also compared. Within this thesis, a new simple heuristic criterion that improves convergence properties of the aforementioned primal-dual method by adaptively adding nodes to the primal set is presented and tested.

Keywords: domain decomposition, modular topology optimization, FETI, iterative solvers

Title translation: Comparison and adaptation of dual domain decomposition methods for modular topology optimization problems

Obsah

1 Úvod	1
2 Motivace	3
2.1 Základy topologické optimalizace	3
2.2 Testovací úloha	3
3 Doménová dekompozice	7
3.1 Primární metody	8
3.1.1 Metoda Schurových doplňků	8
3.2 Duální a primárně-duální metody	9
3.2.1 Lagrangeovy multiplikátory	10
4 Total-FETI	13
4.1 Formulace T-FETI	13
4.2 Předpomínění	17
4.3 Zavedení vazeb v operátoru B	17
4.4 Škálované verze $\tilde{B}$	18
4.4.1 Interpretace algoritmu	18
4.4.2 Pro redundantní vazby	20
4.4.3 Libovolné vazby	21
4.5 Volba projekce	22
5 FETI Dual-Primal	29
5.1 Formulace FETI-DP	29
6 Zlepšující varianty	33
6.1 Plná reortogonalizace	33
6.2 Simultaneous-FETI	34
6.3 FETI-2	35
6.3.1 FETI GenEO	36
6.4 FETI-DP s adaptivně obohaceným setem Π	38
7 Numerické porovnání	41
8 Závěr	47
Literatura	49
A Appendix	53
A.1 Ortogonální projekční matice	53

Obrázky

2.1 Dekompozice testovací úlohy s odlišnými typy modulů	4
2.2 Rozložení materiálu na nosníku v různých krocích topologické optimalizace	5
4.1 Možnosti zavedení vazeb v rohovém uzlu	18
4.2 Srovnání vlivu škálování a projekce s tuhostním škálováním	25
4.3 Srovnání vlivu škálování a projekce s multiplicitním škálováním	26
4.4 Ilustrativní vykreslení „lepících“ sil $(B^{(s)})^T \lambda$	27
6.1 GenEO: Distribuční rozložení vlastních čísel na doménách	37
6.2 GenEO: Některé kritické vlastní módy	38
6.3 Příklady adaptivně vybraných primárních neznámých	40

Tabulky

2.1 Počet neznámých v testovací úloze pro zvolenou jemnost konečněprvkové diskretizace každého modulu	4
4.1 Podmíněnost systému pro různé druhy projekcí a předpodmínění ..	24
6.1 FETI-DP s přidáním primárními uzly, srovnání se základními metodami	38
7.1 Numerické porovnání - iterace 5 v MTO	43
7.2 Numerické porovnání - iterace 10 v MTO	44
7.3 Numerické porovnání - iterace 50 v MTO	45

Kapitola 1

Úvod

Topologická optimalizace (TO) se stala nepostradatelným nástrojem pro nalezení co nejvhodnějšího rozložení materiálu na geometricky předem ohraničeném tělese s ohledem na stanovená kritéria (například minimalizace poddajnosti, zvyšování nejnižší vlastní frekvence nebo maximalizace odolnosti konstrukce proti kolapsu) a omezující podmínky (typicky omezení objemového zastoupení materiálu). Jako intenzivně zkoumaný a vyvíjený přístup je současně TO součástí několika komerčních softwarů přístupných široké veřejnosti a využívá se pro různé průmyslové problémy, které nezřídka vedou na rozsáhlé soustavy rovnic, přičemž se již vyskytly první případy úloh dosahujících jednotek miliard neznámých [AALS17]. V důsledku takto rozměrných problémů není často možné řešit takovéto úlohy přímo, a na pomoc musí být povolány iterační řešiče, které jsou vhodně uzpůsobené pro paralelní výpočty. Hlavní nevýhodou, která brání jejich častějšímu využití pro TO, je zpravidla velmi špatná podmíněnost řešeného systému, která pramení z parametrizace rozdělení materiálu v úlohách topologické optimalizace, kdy jsou do modelu zahrnuta místa se skutečnou tuhostí materiálu i s fiktivní tuhostí prázdných míst a mezilehlé tuhosti jsou v průběhu výpočtu penalizovány.

Pro mnoho praktických aplikací je ale často kromě vysoké výpočetní náročnosti limitující také samotná výroba optimalizovaných prvků, kdy úspory dosažené menší spotřebou materiálu převáží náklady na výrobu (unikátní formy, nezkušenost personálu, atp.). Řešení by mohla nabízet **modulární topologická optimalizace** (MTO) nedávno představená v [TZD⁺21, TDZK22], ve které se výpočetní oblast sestává z omezeného počtu unikátních čtvercových modulů. Vícenásobný výskyt jednotlivých modulů může být účelně využit pro recyklaci výpočtů a zkrácení výpočetního času.

Metody doménové dekompozice (DD), nebo také metody dělení oblasti, slouží k řešení velmi rozsáhlých soustav rovnic a jejich struktura umožňuje řešit části výpočtů nezávisle na sobě paralelně na jednotlivých procesorech. U metody Finite Element Tearing and Interconnecting, označované FETI, poprvé představené Farhatem a Rouxem v [FR91], byla pro homogenní úlohy prokázána její paralelní škálovatelnost. Charakterem se tedy jeví jako vhodný kandidát pro řešení MTO.

Obsahem a zároveň hlavním cílem předložené bakalářské práce je testování a posouzení vhodnosti zejména duálních a primárně-duálních přístupů DD na úlohách modulární topologické optimalizace zejména z pohledu robustnosti a rychlosti konvergence. Vlastní implementace byla provedena v prostředí MATLAB[®] [MAT21].

Kapitola 2

Motivace

2.1 Základy topologické optimalizace

Jak již bylo zmíněno v úvodu, topologická optimalizace se stala nepostradatelným nástrojem pro nalezení optimalizovaného rozvržení materiálu na zadané výpočetní oblasti.

V metodě Solid Isotropic material with Penalization (SIMP) [BS04] — jedné z nejběžněji používaných metod v TO — je materiálové zastoupení parametrizováno skalárním polem relativní hustoty $\rho(\mathbf{x})$, s $0 \leq \rho \leq 1$, na kterém závisí i rozložení tenzorů tuhosti $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ ve výpočetní oblasti tak, že

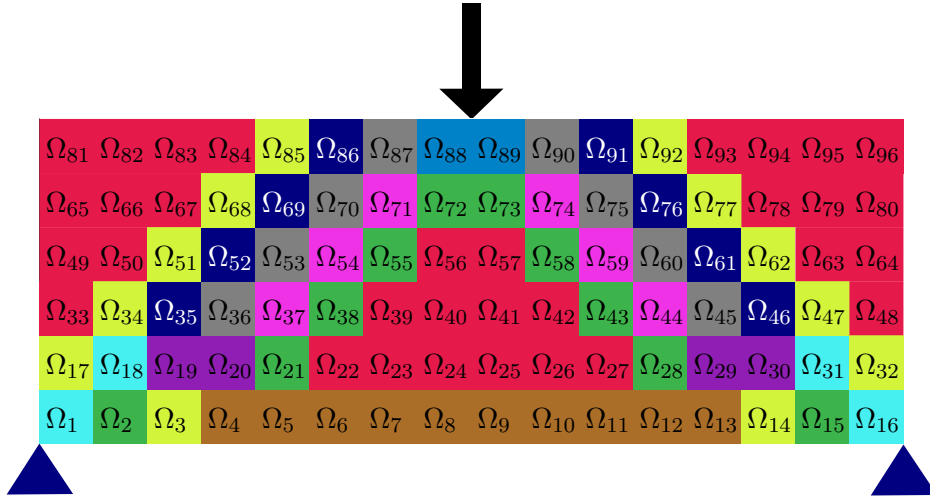
$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}_{\min} + \rho^p(\mathbf{x}) (\mathbf{E}_0 - \mathbf{E}_{\min}) , \quad (2.1)$$

kde p je penalizační koeficient (zpravidla $p \geq 3$), který pomáhá v průběhu optimalizačního procesu k docílení kýženého tzv. „0-1“ rozložení materiálu, kdy jsou potlačeny mezilehlé hodnoty relativní hustoty, a $\mathbf{E}_0$ a $\mathbf{E}_{\min}$ jsou tenzory tuhosti tuhého, respektive „prázdného“ materiálu. Poznamenejme, že zatímco tenzor tuhosti použitého materiálu $\mathbf{E}_0$ má fyzikální podstatu, $\mathbf{E}_{\min}$ popisující chování prázdné, materiálem nezaplňené oblasti je zaveden, aby bylo zabráněno indefinitní matici tuhosti celého problému. S ohledem na skutečné fyzikální chování je tedy žádoucí, aby byla tato tuhost co nejmenší, na druhou stranu příliš malé hodnoty vedou na špatně podmíněný problém. Optimální rozložení materiálu je obvykle hledáno iteračně pomocí oprav pole hustot v závislosti na citlivostní analýze odezvy fyzikálního modelu s pevně zafixovanými hustotami.

2.2 Testovací úloha

Naši testovací úlohu představuje běžný benchmark formulací topologické optimalizace — **Messerschmittův-Bolkowův-Blohmův** (MBB) nosník, tedy prostě podepřený nosník zatížený soustředěnou vertikální silou uprostřed horní hrany. V našem případě je oblast nosníku o velikosti $0,375 \times 1$ jednotek rozdělena na 96 shodně rozměrných čtvercových subdomén v šesti horizontálních a šestnácti vertikálních řadách. Tyto subdomény nejsou obecně libovolné, ale jsou sestaveny z omezeného počtu unikátních modulů, u kterých je navíc definována vzájemná přípustná konektivita. Ta vychází z aplikovaného principu Wangova dláždění [Wan61]. V představené úloze je uvažováno celkem 16 těchto modulů, viz Obr. 2.1.

Pro numerické porovnání volíme tři reprezentativní stavy z průběhu iterací modulárně-topologické optimalizace MBB nosníku s omezeným objemovým zastoupením tuhého materiálu



Obrázek 2.1: Příklad modulární topologické optimalizace MBB nosníku s 96 podoblastmi. Jednotlivé barvy představují 16 různých typů modulů, symetrické moduly jsou zobrazeny stejnou barvou.

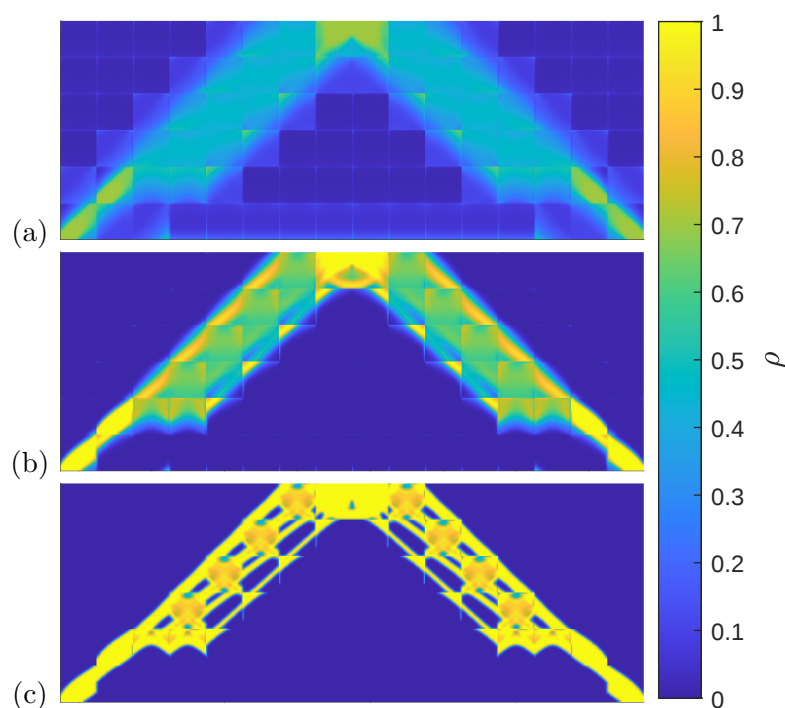
rovným 20 % oblasti, viz Obr. 2.2. První uvažovaný a celkově pátý iterační stav zachycuje oblast na počátku optimalizačního procesu, tj. s nízkým rozptylem relativní hustoty a bez ostrých přechodů v tuhostech. Přibližně prostřední, v TO desátý iterační krok zobrazuje doménu se zřetelnými rysy optimalizované konstrukce avšak s výraznými přechody v rozložení materiálu mezi sousedícími moduly. V poslední testované, celkově 50. iteraci se již konstrukce skládá převážně ze dvou diskrétních hodnot tuhosti, tj. dvou fází — prázdnými a materiálem plně zastoupenými elementy — s ostrými vzájemnými přechody. V rámci výpočtu modulární topologické optimalizace byly vygenerovány stavy pro několik hodnot jemností konečněprvkové diskretizace začínajících na 10×10 a končících na 50×50 bilineárních obdélníkových prvků na každém modulu. Počet neznámých pro celou úlohu MBB pro jednotlivé jemnosti je shrnut v tabulce 2.1.

Diskretizace modulu	10×10	20×20	30×30	40×40	50×50
Počet neznámých	19 642	77 682	174 122	308 962	482 202

Tabulka 2.1: Počet neznámých v testovací úloze pro zvolenou jemnost konečněprvkové diskretizace každého modulu

Úlohy modulární topologické optimalizace vykazují několik vlastností, které motivují využití metod dělení oblasti:

1. Dělení oblasti na menší celky je automaticky poskytnuto přítomností modulů.
2. Moduly jsou čtvercové a subdomény tak mají vhodný poměr stran.
3. Moduly se v konstrukci několikrát opakují, čímž se otevírá prostor pro recyklaci a s ní související urychlení výpočtů (např. při faktorizaci matic tuhostí jednotlivých domén).
4. Všechny moduly mají jednotnou diskretizaci, což nahrazá aplikaci tuhostního škálování, kdy je za daných podmínek odhad nové iterace nejpřesnější.



Obrázek 2.2: Topologie MBB nosníku získaná metodou SIMP s objemovým zastoupení materiálu $= 0,2$ a poměrem tuhostí plných a prázdných elementů $10^6 : 1$ ve třech krocích MTO a) 5. iterace, b) 10. iterace a c) 50. iterace.

Nevýhodou úloh modulární topologické optimalizace z pohledu iteračních metod, a metod dělení oblasti především, je výskyt velkého kontrastu v materiálových parametrech v rámci celé domény. Pokud navíc budeme brát dělení oblasti za dané modularitou úlohy, je tato nevýhoda ještě zesílena tím, že se tuhosti mění podél hranic subdomén, na což jsou metody dělení oblasti velmi citlivé [SR13, KRR15].

Kapitola 3

Doménová dekompozice

K řešení rozsáhlých soustav lineárních rovnic se nabízí dva přístupy: přímé a iterativní řešiče. Přímé řešiče jsou robustní, rychlé a pro libovolnou úlohu dosáhnou řešení v předem stanovitelném (vždy konečném) počtu operací, který závisí pouze na velikosti a charakteru problému¹ a nikoli jeho obtížnosti. S velikostí problému ale dramaticky rostou paměťové nároky, což od jisté chvíle začne být limitací i pro výkonné počítače. Navíc pro špatně podmíněné úlohy mohou být výsledky získané výpočtem v konečné aritmetice zatížené významnou chybou. Iterativní řešiče jsou ze své podstaty vhodnější pro možnou paralelizaci výpočtů, neboť převážně využívanou operací je násobení vektoru maticí. Jejich nevýhodou je ale nedostatek robustnosti: pokud je úloha špatně podmíněná, výpočetní čas se prodlužuje neúměrně velikosti problému a řešení může být navíc postupně znehodnocováno vlivem kumulace numerických chyb. Využití vhodného předpokládání je pak mnohdy naprosto stěžejní.

Metody doménové dekompozice zpravidla využívají účelný kompromis mezi těmito dvěma přístupy. Tyto metody spočívají v rozložení problému do dvou úrovní: (i) na úrovni jednotlivých domén probíhá odděleně největší objem výpočtů nezávisle na ostatních (jednotlivým procesorům nebo vláknům jsou přiřazeny menší subproblémy, které lze řešit přímo), (ii) na globální úrovni pak probíhá výměna informací. Iterativně se pak korigují výsledky mezi těmito dvěma procesy až do dosažení aproximace řešení s uspokojivou velikostí rezidua.

Metody doménové dekompozice se dále dělí podle charakteru neznámých hraniční úlohy na primární, duální a primárně-duální, někdy označované jako hybridní. Primární přístupy, jako např. metoda Schurových doplňků [Kru06] nebo Balancing Domain Decomposition [Man93] zachovávají fyzikální podstatu neznámých při řešení, v úlohách stavební mechaniky tedy hledaných přemístění. U duálních metod jsou těmito neznámými ekvivalentní protějšky, čili síly. Primárně-duální formulace představují jistý přechod mezi prvními dvěma zmíněnými.

V celé práci se omezíme na řešení soustavy lineárních rovnic ve tvaru

$$\mathbf{K}^\Omega \mathbf{u}^\Omega = \mathbf{f}^\Omega, \quad (3.1)$$

která vychází např. z numericky diskretizovaných parciálních diferenciálních rovnic druhého (rovinná napjatost) nebo čtvrtého řádu (např. rovnice desek) platných na oblasti $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \{2, 3\}$.

Příznačně pro metody doménové dekompozice bez překryvu podoblastí předpokládáme, že

¹Standardně používané faktorizace mohou být efektivně uzpůsobeny zejména pokud je matice koeficientů řídká

původní doména Ω je rozložena na N_s vzájemně disjunktních subdomén Ω_s , $s = 1 \dots N_s$,

$$\Omega = \bigcup_{s=1}^{N_s} \Omega_s, \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset, \quad \forall i, j \in \{1 \dots N_s\};, \quad i \neq j.$$

Hranice původní oblasti $\partial\Omega$ se skládá z $\partial_u\Omega$ s předepsanými Dirichletovými okrajovými podmínkami a komplementární části $\partial_f\Omega$ s Neumannovými okrajovými podmínkami. Pro hranice jednotlivých subdomén platí

$$\Gamma_s := \partial\Omega_s \setminus \partial\Omega, \quad \Gamma = \bigcup_{s=1}^{N_s} \Gamma_s, \quad \partial_u\Omega_s = \partial\Omega_s \cap \partial_u\Omega.$$

Řešení soustavy lineárních rovnic (3.1) je pak hledáno pomocí řady lokálně zavedených subproblémů

$$\mathbf{K}^{(s)} \mathbf{u}^{(s)} = \mathbf{f}^{(s)} \quad \text{pro } s = 1 \dots N_s, \quad (3.2)$$

kdy je navíc vyžadována spojitost na rozhraní subdomén (vynucení této spojitosti se liší v závislosti na zvolené metodě, jak bude popsáno dále). Pro zjednodušení zápisu předpokládáme, že v lokálních příspěvcích rovnice (3.2) jsou předně řazeny vnitřní uzly označené dolním indexem I , následovány uzly na hranici $\partial\Omega_s$ značené B

$$\mathbf{K}^{(s)} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{II}^{(s)} & \mathbf{K}_{IB}^{(s)} \\ \mathbf{K}_{BI}^{(s)} & \mathbf{K}_{BB}^{(s)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}^{(s)} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_I^{(s)} \\ \mathbf{u}_B^{(s)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}^{(s)} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_I^{(s)} \\ \mathbf{f}_B^{(s)} \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Horními indexy v celé práci označujeme doménu příslušné veličiny.

3.1 Primární metody

Pro svou jednoduchost zde zmíníme i metodu Schurových doplňků, která velmi názorně popisuje podstatu metod DD bez překryvu podoblastí (*substructuring* metod).

3.1.1 Metoda Schurových doplňků

Původní systém v podobě rovnice (3.1) lze pomocí vhodného přechíslování neznámých ekvivalentně zapsat ve formě

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{II}^{(1)} & & & & \mathbf{K}_{IB}^{(1)}(\mathbf{L}_B^{(1)})^\top \\ & \mathbf{K}_{II}^{(2)} & & & \mathbf{K}_{IB}^{(2)}\mathbf{L}_B^{(2)\top} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \mathbf{K}_{II}^{(N_s)} & \mathbf{K}_{IB}^{(N_s)}(\mathbf{L}_B^{(N_s)})^\top \\ \mathbf{L}_B^{(1)}\mathbf{K}_{BI}^{(1)} & \mathbf{L}_B^{(2)}\mathbf{K}_{BI}^{(2)} & \dots & \mathbf{L}_B^{(N_s)}\mathbf{K}_{BI}^{(N_s)} & \mathbf{K}_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_I^{(1)} \\ \mathbf{u}_I^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{u}_I^{(N_s)} \\ \mathbf{u}_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_I^{(1)} \\ \mathbf{f}_I^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{f}_I^{(N_s)} \\ \mathbf{f}_B \end{bmatrix}, \quad (3.4)$$

kde vektor $\mathbf{u}_B$ ukládá všechny hraniční uzly a $\mathbf{L}_B^{(s)\top}$ je lokalizační operátor s ortonormálními řádky, který realizuje mapování z lokálních hranic $\partial\Omega^s$ do globálních, tedy

$$\mathbf{u}_B^{(s)} = (\mathbf{L}_B^{(s)})^\top \mathbf{u}_B, \quad (\mathbf{L}_B^{(s)})^\top \mathbf{L}_B^{(s)} = \mathbf{I}, \quad (3.5)$$

a proto

$$\mathbf{K}_{BB} = \sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{L}_B^{(j)} \mathbf{K}_{BB}^{(j)} (\mathbf{L}_B^{(j)})^\top, \quad \mathbf{f}_B = \sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{L}_B^{(j)} \mathbf{f}_B^{(j)}. \quad (3.6)$$

Jsou-li submatice $\mathbf{K}_{II}^{(j)}$ regulární, lze z výše uvedené rovnice vyjádřit lokální vnitřní neznámé v závislosti na hraničních $\mathbf{u}_B$ jako

$$\mathbf{u}^{(j)} = (\mathbf{K}_{II}^{(j)})^{-1} (\mathbf{f}_I^{(j)} - \mathbf{K}_{IB}^{(j)} (\mathbf{L}_B^{(j)})^\top \mathbf{u}_B) \quad \text{pro } j = 1, \dots, N_s. \quad (3.7)$$

Postupným dosazením vztahu pro všechny subdomény do posledního bloku rovnic v (3.4) můžeme celou úlohu přeformulovat v závislosti na hraničních neznámých

$$\underbrace{\left(\mathbf{K}_{BB} - \sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{L}_B^{(j)} \mathbf{K}_{BI}^{(j)} (\mathbf{K}_{II}^{(j)})^{-1} \mathbf{K}_{IB}^{(j)} (\mathbf{L}_B^{(j)})^\top \right)}_{\tilde{\mathbf{K}}} \mathbf{u}_B = \underbrace{\mathbf{f}_B - \sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{L}_B^{(j)} \mathbf{K}_{BI}^{(j)} (\mathbf{K}_{II}^{(j)})^{-1} \mathbf{f}_I^{(j)}}_{\tilde{\mathbf{f}}}. \quad (3.8)$$

Odkondenzovaný systém $\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{u}_B = \tilde{\mathbf{f}}$ má oproti formulaci (3.4) pouze tolik neznámých, kolik neznámých stupňů volnosti se nachází na hranicích subdomén, matice $\tilde{\mathbf{K}}$ je ale kvůli inverzním subblokům hustá. Problém (3.8) představuje nejjednodušší způsob kondenzace neznámých a označuje se jako **hrubá úloha**. Vektor hraničních neznámých lze hledat mnoha způsoby. V případě, že submatice vzniklá eliminací řádků a sloupců matice $\mathbf{K}$ v (3.1) náležející hledaným neznámým je symetrická a pozitivně definitní, lze využít $\text{LDL}^\top$ nebo Choleského faktorizaci, případně využít sdružené gradienty. Bloková struktura navíc umožňuje distribuci výpočtů, tedy rozložení „lokálních“ výpočtů jedné nebo několika subdomén mezi dostupné procesory. Poté, co je stanoven vektor $\mathbf{u}_B$, jsou z rovnice (3.7) jednoduše stanovitelné interní neznámé.

Zdůrazněme, že je žádoucí, aby počet neznámých $\mathbf{u}_B$ byl co nejmenší. Proto by stačilo, aby tento vektor obsahoval pouze stupně volnosti náležející alespoň dvěma subdoménám a podepřené stupně volnosti. V našem případě je, s ohledem na zmíněnou modularitu, výhodné ponechat na doménách stejný rozklad, jelikož produkt $\mathbf{K}_{BI}^{(j)} (\mathbf{K}_{II}^{(j)})^{-1} \mathbf{K}_{IB}^{(j)}$ může být při opakovaném výskytu subdomény uložen a ve výpočtu recyklován.

3.2 Duální a primárně-duální metody

V metodách DD s duálními veličinami vstupují do pravé strany rovnice (3.2) také účinky sil vynucující spojitost řešení $\{\mathbf{u}^s\}_{s=1\dots N_s}$ na rozhraních jednotlivých subdomén Γ .

Na rozdíl od podsekcce 3.1.1, ve které jsme použili indexy I a B , nyní pro zjednodušení zápisu předpokládáme, že v lokálních příspěvcích rovnice (3.2) jsou vnitřní a nepodepřené uzly, které neleží na Γ , označené indexem i řazeny předně, následovány uzly na hranici $\partial\Omega_s \cap (\Gamma_s \cup \partial_u\Omega_s)$ značené dolním indexem b

$$\mathbf{K}^{(s)} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ii}^{(s)} & \mathbf{K}_{ib}^{(s)} \\ \mathbf{K}_{bi}^{(s)} & \mathbf{K}_{bb}^{(s)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}^{(s)} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i^{(s)} \\ \mathbf{u}_b^{(s)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}^{(s)} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_i^{(s)} \\ \mathbf{f}_b^{(s)} \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Finite Element Tearing and Interconnecting (FETI), představená poprvé v [FR91], je duální metoda bez překryvu podoblastí s Lagrangeovými multiplikátory vyvinutá k efektivnímu

řešení rozsáhlých lineárních (nebo linearizovaných) systémů rovnic vycházejících např. z konečněprvkové diskretizace výpočetní oblasti Ω . Tato doména je rozdělena na větší počet jednotlivých podoblastí (či subdomén), na kterých jsou jednotlivé uzly definovány lokálně, což umožňuje efektivní rozložení výpočetní síly při vysokém stupni paralelizace výpočtů.

Výborné výsledky FETI metody na především při masivních paralelních výpočtech postupně motivovaly vývoj modifikací původní podoby metody, buď s cílem zvýšení robustnosti nebo efektivity při paralelizaci. V naší studii jsme se zaměřili na dvě takové varianty — Total-FETI a FETI Dual-Primal — založené na původní FETI. Ačkoliv se tyto dvě metody vzájemně principiálně liší, jejich společnou výhodou je, kromě jiného, znalost hodnotí lokálních matic tuhostí. Odpadá tak problém se stanovováním prahu pro nulové módy při jejich faktorizaci. Se znalostí řešené úlohy toto sice nepředstavuje praktický problém, pro jednu implementovanou metodu ale škýtá obecně výhodu.

■ 3.2.1 Lagrangeovy multiplikátory

Princip Lagrangeových multiplikátorů představuje jádro duálních metod doménové dekompozice, jeho použití ale nemusí být zcela intuitivní. Proto je zde uvedeno odvození metody Lagrangeových multiplikátorů včetně případu s výskytem potenciálně redundantních podmínek, které se v těchto metodách nezřídka záměrně vyskytují.

Uvažujme nyní úlohu, kdy hledáme lokální vázaný extrém funkce $F : D_F \rightarrow \mathbb{R}$, $D_F \subset \mathbb{R}^n$, na množině $M \subset D_F$

$$M = \{x \in \mathbb{R}^n; G(x) = 0\},$$

kde $G(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $G(x) = (G_1(x), \dots, G_l(x))^T$. Bez újmy na obecnosti uvažujme, že $\tilde{G}(x) = (G_1(x), \dots, G_m(x))^T$ tvoří lineárně nezávislý set omezujících podmínek pro vhodně řazené $G_i(x)$. Zjevně platí, že $l = m$ v případě zavedení neredundantních podmínek. Dále předpokládáme, že F a G mají spojitě své parciální derivace v okolí množiny M .

Věta 3.1. *Nechť F má lokální vázaný extrém na M v bodě $\hat{x} \in M$ a nechť Jacobiho matice subbloku $\tilde{G}(x)$*

$$B = \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial x_{n-m+1}} & \cdots & \frac{\partial G_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial G_m}{\partial x_{n-m+1}} & \cdots & \frac{\partial G_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

je regulární. Potom existuje vektor $\tilde{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m, \dots, \lambda_l)^T$ takový, že [Bub06]

$$\nabla F(\hat{x}) = \nabla G(\hat{x}) \tilde{\lambda}. \quad (3.10)$$

Důkaz. Body $x = (x_1, \dots, x_n) \in M$ splňují

$$G_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad \text{pro } i = 1, 2, \dots, m.$$

Platí-li, že matice derivací B je v bodě $\hat{x} = (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n)$ regulární, existují podle věty o implicitní funkci [dO12] funkce $g_1, \dots, g_m$ takové, že v okolí bodu $\hat{z} = (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{n-m})$ platí

pro body $x \in M$

$$\begin{aligned} x_{n-m+1} &= g_1(x_1, \dots, x_{n-m}) \\ &\vdots \\ x_n &= g_m(x_1, \dots, x_{n-m}). \end{aligned}$$

Potom lze pro $x \in M$ psát

$$F(x) = F(x_1, \dots, x_{n-m}, g_1(x_1, \dots, x_{n-m}), \dots, g_m(x_1, \dots, x_{n-m}))$$

$$F(x) =: H(x_1, \dots, x_{n-m})$$

a pro $i = 1, 2, \dots, m$ také

$$G_i(x_1, \dots, x_{n-m}, g_1(x_1, \dots, x_{n-m}), \dots, g_m(x_1, \dots, x_{n-m})) = 0.$$

Derivováním těchto složených funkcí podle x_j , $j = 1, \dots, n-m$, získáme

$$\frac{\partial G_i}{\partial x_j}(x) + \frac{\partial G_i}{\partial x_{n-m+1}} \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(z) + \dots + \frac{\partial G_i}{\partial x_n} \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(z) = 0, \quad i = 1, \dots, m,$$

kde jsme označili $z = (x_1, \dots, x_{n-m})$. Zapsáním předchozího vztahu pro bod extrému $x = \hat{x}$ získáme

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_j} \hat{z} \\ \vdots \\ \frac{\partial g_m}{\partial x_j} \hat{z} \end{bmatrix} = -\mathbf{B}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial x_j} \hat{x} \\ \vdots \\ \frac{\partial G_m}{\partial x_j} \hat{x} \end{bmatrix}.$$

kde $\hat{z} = (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{n-m})$ je bodem lokálního extrému funkce $(n-m)$ proměnných H . Dle předpokladu hladkosti F je také H diferencovatelná. Potom lze pro $j = 1, \dots, n-m$ psát

$$\frac{\partial H}{\partial x_j}(\hat{z}) = \frac{\partial F}{\partial x_j}(\hat{x}) + \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_j}(\hat{z}) & \dots & \frac{\partial g_m}{\partial x_j}(\hat{z}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{x}) & \dots & \frac{\partial F}{\partial x_n}(\hat{x}) \end{bmatrix}^T = 0,$$

neboli

$$\frac{\partial F}{\partial x_j}(\hat{x}) - \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial x_j}(\hat{x}) & \dots & \frac{\partial G_m}{\partial x_j}(\hat{x}) \end{bmatrix} \mathbf{B}^{-T} \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{z}) & \dots & \frac{\partial F}{\partial x_n}(\hat{z}) \end{bmatrix}^T = 0.$$

Označením

$$\lambda = \mathbf{B}^{-T} \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{z}) & \dots & \frac{\partial F}{\partial x_n}(\hat{z}) \end{bmatrix}^T \quad (3.11)$$

dostáváme pro $j = 1, \dots, n-m$

$$\frac{\partial F}{\partial x_j}(\hat{x}) = \frac{\partial G_1}{\partial x_j}(\hat{x}) \lambda_1 + \dots + \frac{\partial G_m}{\partial x_j}(\hat{x}) \lambda_m. \quad (3.12)$$

Z rov. (3.11) lze vyjádřit

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_n}(\hat{x}) \end{bmatrix} = \mathbf{B}^\top \lambda = \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{x}) & \dots & \frac{\partial G_m}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial G_1}{\partial x_n}(\hat{x}) & \dots & \frac{\partial G_m}{\partial x_n}(\hat{x}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_m \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

Z rovností (3.12, 3.13) dostáváme tvrzení věty

$$\nabla F(\hat{x}) = \nabla \tilde{G}(\hat{x}) \lambda, \quad \lambda \in \mathbb{R}^m \quad (3.14)$$

pro neredundantní set podmínek $\tilde{\mathbf{G}}$.

Potom musí také existovat řešení ve tvaru $\tilde{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m, \dots, \lambda_l)^\top$, $\tilde{\lambda} \in \mathbb{R}^l$,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_n}(\hat{x}) \end{bmatrix} = \mathbf{B}^\top \tilde{\lambda} = \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{x}) & \dots & \frac{\partial G_l}{\partial x_{n-m+1}}(\hat{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial G_1}{\partial x_n}(\hat{x}) & \dots & \frac{\partial G_l}{\partial x_n}(\hat{x}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_l \end{bmatrix},$$

neboť např. volbou $\lambda_{n-m+1} = 0, \dots, \lambda_l = 0$ je rovnost splněna. Tím získáme znění věty (3.10).

Kapitola 4

Total-FETI

Metoda Total-FETI (T-FETI), představená v [DHK06, KVM⁺13] je duální metodou doménové dekompozice, která je úzce spjatá s původní metodou FETI [FR91]. Hlavní rozdíl je v zavedení Dirichletových okrajových podmínek (OP), které jsou vynucovány podobně jako kontinuita v poli posunů mezi jednotlivými subdoménami pomocí Lagrangeových multiplikátorů.

4.1 Formulace T-FETI

Uvažujme úlohu lineární pružnosti na doméně Ω v podobě rovnice (3.1). Primární forma problému vede na úlohu kvadratického programování (QP) ve formě

$$\min_{\mathbf{u}} \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} - \mathbf{f}^T \mathbf{u} \quad \text{za podmínky} \quad \mathbf{B} \mathbf{u} = \mathbf{c}, \quad (4.1)$$

kde

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}^{(1)} & & & \\ & \mathbf{K}^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{K}^{(N_s)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{(1)} \\ \mathbf{u}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{u}^{(N_s)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}^{(1)} \\ \mathbf{f}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{f}^{(N_s)} \end{bmatrix}$$

značí postupně blokově diagonální symetrickou pozitivně semidefinitní matici tuhosti řádu n , vektor posunutí a vektor zatížení odpovídající příslušnému číslování uzlů v provedené dekompozici a

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}^{(1)} & \mathbf{B}^{(2)} & \dots & \mathbf{B}^{(N_s)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}^{(j)} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{\text{cont}}^{(j)} \\ \mathbf{B}_{\text{pres}}^{(j)} \end{bmatrix}, \quad \forall 1 \leq j \leq N_s,$$

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}^{(1)T} & \mathbf{c}^{(2)T} & \dots & \mathbf{c}^{(N_s)T} \end{bmatrix}^T, \quad \mathbf{c}^{(j)} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{c}_{\text{pres}}^{(j)} \end{bmatrix}, \quad \forall 1 \leq j \leq N_s$$

tak, aby platilo

$$\sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{u}^{(s)} = \mathbf{B} \mathbf{u} = \mathbf{c}. \quad (4.2)$$

$\mathbf{B}$ značí matici vazeb rozměru $(m_{\text{cont}} + m_{\text{pres}}) \times n$, která definuje spojitost napříč jednotlivými subdoménami, kde symbol m_{cont} označuje počet vazeb definovaných pro uzly svazující sousední

subdomény a m_{pres} počet vazeb vynucujících Dirichletovy okrajové podmínky, jejichž hodnoty jsou určeny příslušnou hodnotou vektoru c . Řádky matice B obsahují nuly na všech pozicích vyjma těch, které odpovídají stupňům volnosti dotčených příslušnou vazbou. Běžně je vazba definována mezi dvěma subdoménami a určena hodnotami $\{1, -1\}$, ale může být použit i jiný přístup splňující rovnici (4.2). Např. mohou být vazby předem definovány tak, aby B měla ortonormální řádky, což může být výhodné. Diskuze nad možnými podobami B je provedena v sekci 4.3.

Zdůrazněme, že na rozdíl od standardní metody FETI je pravá strana rovnice (4.2), tj. vektor c , obecně netriviální. V důsledku takto definovaných Dirichletových OP jsou matice tuhostí všech subdomén pozitivně semidefinitní a počet energeticky nulových módů je závislý pouze na charakteru úlohy, např. pro dvourozměrné úlohy mechaniky jsou nulové módy tři, ve třech dimenzích pak šest. V případě lineární elasticity navíc tyto módy představují pohyby subdomén jako tuhých celků. To nese výpočetní úsporu při regularizaci matic tuhostí [KVM⁺13, část 5] jednotlivých subdomén, a zejména pak při opakovaném výskytu jednoho typu modulu v konstrukci, neboť regularizace a následná faktorizace může být pro jeden modul provedena pouze jednou a následně recyklována na všechny subdomény stejného typu bez ohledu na skutečný způsob podepření.

Lagrangian spojený s problémem (4.1) má podobu

$$\mathcal{L}(\bar{u}, \bar{\lambda}) = \frac{1}{2} \bar{u}^T K \bar{u} - f^T \bar{u} + \bar{\lambda}^T (B \bar{u} - c) \quad (4.3)$$

s řešením (u, λ) sedlobodové úlohy

$$\mathcal{L}(u, \lambda) = \max_{\bar{\lambda}} \min_{\bar{u}} \mathcal{L}(\bar{u}, \bar{\lambda}) = \min_{\bar{u}} \max_{\bar{\lambda}} \mathcal{L}(\bar{u}, \bar{\lambda}).$$

Z podmínky stacionarity vyplývá

$$\left. \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{u}, \bar{\lambda})}{\partial \bar{u}^{(s)}} \right|_{\bar{u}=u, \bar{\lambda}=\lambda} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad K^{(s)} u^{(s)} + B^{(s)T} \lambda^{(s)} = f^{(s)} \quad (4.4)$$

$$\left. \frac{\partial \mathcal{L}(\bar{u}, \bar{\lambda})}{\partial \bar{\lambda}} \right|_{\bar{u}=u, \bar{\lambda}=\lambda} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_{s=1}^{N_s} B^{(s)} u^{(s)} = c, \quad (4.5)$$

což je v kompaktním zápisu

$$\begin{bmatrix} K & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ c \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

Podmínka řešitelnosti první rovnice systému (4.6) zní

$$f - B^T \lambda \in \text{Im}(K) \quad \Longleftrightarrow \quad f - B^T \lambda \perp \text{Ker}(K).$$

Zavedením matice R , jejíž sloupce tvoří bázi $\text{Ker}(K)$, lze předchozí podmínku přeformulovat na vztah

$$R^T (f - B^T \lambda) = 0. \quad (4.7)$$

Fyzikálně lze rovnici výše interpretovat jako podmínku rovnováhy jednotlivých subdomén.

Hlavní výhodou Total-FETI je, že lze matici R sestavit přímo pouze se znalostí geometrie řešené úlohy. V úlohách mechaniky (lineární elasticity) je její podoba dána vektory přemístění

subdomén jako tuhých celků, tedy příslušnými energeticky nulovými posuvy a pootočeními jako

$$R^{(s)} = \begin{cases} \mathbb{R}^2 : \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ -y_1^{(s)} & x_1^{(s)} & \dots & -y_j^{(s)} & x_j^{(s)} & \dots & -y_{n_s}^{(s)} & x_{n_s}^{(s)} \end{bmatrix}^T \\ \mathbb{R}^3 : \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ -y_1^{(s)} & x_1^{(s)} & 0 & \dots & -y_j^{(s)} & x_j^{(s)} & 0 & \dots & -y_{n_s}^{(s)} & x_{n_s}^{(s)} & 0 \\ 0 & -z_1^{(s)} & y_1^{(s)} & \dots & 0 & -z_j^{(s)} & y_j^{(s)} & \dots & 0 & -z_{n_s}^{(s)} & y_{n_s}^{(s)} \\ z_1^{(s)} & 0 & -x_1^{(s)} & \dots & z_j^{(s)} & 0 & -x_j^{(s)} & \dots & z_{n_s}^{(s)} & 0 & -x_{n_s}^{(s)} \end{bmatrix}^T \end{cases}, \quad (4.8)$$

kde $*_j^{(s)}$ značí hodnotu souřadnice $*$ j -tého uzlu na s -té subdoméně.

Neznámé hodnoty výsledných posunů lze unikátně stanovit v závislosti na duálních veličinách

$$u = K^\dagger(f - B^T \lambda) + R\alpha \quad (4.9)$$

kde symbol † označuje libovolnou zobecněnou inverzi matice 1 a zavedený vektor α představuje amplitudy energeticky nulových módů.

Dosazením vztahu (4.9) do druhé rovnice (4.6) a zavedením podmínek rovnováhy subdomén v podobě rovnice (4.7) získáme plně duální formulaci

$$\begin{bmatrix} BK^\dagger B^T & -BR \\ -R^T B^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} BK^\dagger f - c \\ -R^T f \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

S pomocným přeznačením 2

$$\begin{aligned} F &= BK^\dagger B^T, & d &= BK^\dagger f - c, \\ G &= -BR, & e &= -R^T f \end{aligned}$$

získáváme Karushův-Kuhnův-Tuckerův (KKT) problém [NW06, Kapitola 16]

$$\begin{bmatrix} F & G \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d \\ e \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

který má opět sedlobodový charakter. Takto odkondenzovaný problém má zpravidla výrazně menší počet neznámých než původní úloha. Tento systém by šlo samozřejmě řešit přímo, ale v takovém případě by bylo využití poněkud umělé. Přímočařejším a na implementaci

¹Zobecněnou inverzí se označuje každá matice $K^\dagger$ splňující vztah $KK^\dagger K = K$.

²Matice G je zde zadefinována jinak než v původním článku [DHK06], kde platí $G = -R^T B^T$. Úprava je motivována snahou docílit v práci jednotného značení.

jednodušším řešením by představovalo odkondenzování původně rozsáhlého problému pomocí Schurových doplňků a následné lokální stanovení hledaných posunů.

Aby byla zajištěna platnost systému (4.11), využívá FETI strategie v literatuře označované jako *initialization - projection*, neboli hledáním řešení ve speciálním tvaru

$$\lambda = \lambda_0 + P\tilde{\lambda}, \quad (4.12)$$

kde λ_0 je vhodně vybraný vektor splňující druhou rovnici v (4.11), obecně hledaný v podobě

$$\lambda_0 = QG \left[G^T QG \right]^{-1} e, \quad (4.13)$$

tedy $\lambda_0 \in \text{Im}(QG)$, kde Q je vhodně zvolená symetrická pozitivně definitní matice. Pro homogenní úlohy je možné volit $Q = I$, pro vnitřně heterogenní se doporučuje volba předpokládavače $Q = M^{-1}$ nebo vhodná diagonální matice [RF99]. Zbylou část řešení záměrně hledáme řešením první rovnice (4.11) na komplementárním prostoru $\text{Ker}(G^T)$, čímž se eliminuje příspěvek α , jelikož $P^T G = 0$ (více v příloze A.8).

Zbývá tedy vyřešit **hraniční úlohu** (*Interface problem*)

$$\text{Nalezni } \tilde{\lambda} \in \text{Im}(P) = \text{Ker}(G^T) : \quad P^T F P \tilde{\lambda} = P^T (d - F \lambda_0), \quad (4.14)$$

kde P v rovnicích (4.12) a (4.14) představuje projekci

$$P(Q) = I - QG \left[G^T QG \right]^{-1} G^T, \quad (4.15)$$

pro kterou platí $G^T P = 0$.

Za předpokladu $\text{Ker}(B^T) = \emptyset$ je i matice $P^T F$ pozitivně definitní na $\text{Im}(P)$ [Pec14]. Pokud nejsou vazebné podmínky v B zavedeny tak, aby $(\text{Ker } B^T) = \emptyset$, postačí, aby matice $P^T F$ byla pozitivně definitní na $\text{Im}(P) \setminus \text{Ker}(B^T)$, nicméně řešení λ pak není určeno jednoznačně. Neznámá část řešení $\tilde{\lambda}$ se v obou případech může hledat iterativně pomocí metody projektovaných předpokláděných sdružených gradientů (PPCG).

Testování jednotlivých inkrementů řešení pomocí projekce P zajišťuje zachování platnosti podmínky $G^T \lambda = e$ v každém iteračním kroku k , neboť pro 2. rovnici v (4.11) platí

$$G^T(\lambda_0 + P\tilde{\lambda}) = G^T \left(QG \left[G^T QG \right]^{-1} e + (I - QG \left[G^T QG \right]^{-1} G^T) \tilde{\lambda} \right) = e$$

Poté, co známe přesné λ , lze stanovit koeficienty translačních a rotačních přemístění subdomén jako tuhých celků z první rovnice (4.11)

$$\alpha = \left[G^T QG \right]^{-1} G^T Q(d - F\lambda). \quad (4.16)$$

a následně stanovit hledané posuny z rovnice (4.9), což je opět snadno paralelizovatelná operace.

Algoritmus 1: Standardní PPCG [KVM⁺13]
 Vyřeš $\mathbf{P} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{F} \tilde{\lambda} = \mathbf{P} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{P}^T (\mathbf{d} - \mathbf{F} \lambda_0)$

```

1  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{d} - \mathbf{F} \lambda_0$ 
2  $i \leftarrow 0$ 
3 while Convergence criterion not satisfied do
4    $\mathbf{w}_i = \mathbf{P}^T \mathbf{r}_i$ 
5    $\mathbf{z}_i = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{w}_i$ 
6    $\mathbf{y}_i = \mathbf{P} \mathbf{z}_i$ 
7    $\beta_i = \frac{\mathbf{y}_i^T \mathbf{w}_i}{\mathbf{y}_{i-1}^T \mathbf{w}_{i-1}}, \quad (\beta_0 = 0)$ 
8    $\mathbf{p}_i = \mathbf{y}_i + \beta_i \mathbf{p}_{i-1}, \quad (\mathbf{p}_0 = \mathbf{y}_0)$ 
9    $\alpha_i = \frac{\mathbf{y}_i^T \mathbf{w}_i}{\mathbf{p}_i^T \mathbf{F} \mathbf{p}_i}$ 
10   $\tilde{\lambda}_{i+1} = \tilde{\lambda}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$ 
11   $\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{F} \mathbf{p}_i$ 
12   $i \leftarrow i + 1$ 
13  $\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}_i$ 

```

4.2 Předpomínění

S ohledem na aditivní strukturu matice $\mathbf{F}$ je v metodě FETI inverze součtu příspěvků $\mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)\dagger} \mathbf{B}^{(s)T}$ aproximována váženým součtem (aproximovaných) lokálních inverzí, tedy předpodmiňovač má podobu

$$\mathbf{M}_*^{-1} = \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{\mathbf{B}}^{(s)} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\mathbf{S}}^{(s)} \end{bmatrix} (\tilde{\mathbf{B}}^{(s)})^T,$$

kde člen $\tilde{\mathbf{S}}^{(s)}$ představuje buď

- Schurův doplněk $\mathbf{S}^{(s)} = \mathbf{K}_{bb}^{(s)} - \mathbf{K}_{bi}^{(s)} (\mathbf{K}_{ii}^{(s)})^{-1} \mathbf{K}_{ib}^{(s)}$ pokud je využit optimální Dirichletův³ předpodmiňovač $\mathbf{M}_D^{-1}$, nebo
- $\tilde{\mathbf{S}}^{(s)} = \mathbf{K}_{bb}^{(s)}$ nebo $\tilde{\mathbf{S}}^{(s)} = \text{diag}(\mathbf{K}_{bb}^{(s)})$, levnější varianty $\mathbf{S}^{(s)}$ přezdívané *lumped* ($\mathbf{M}_L^{-1}$), respektive *super-lumped* ($\mathbf{M}_{SL}^{-1}$),

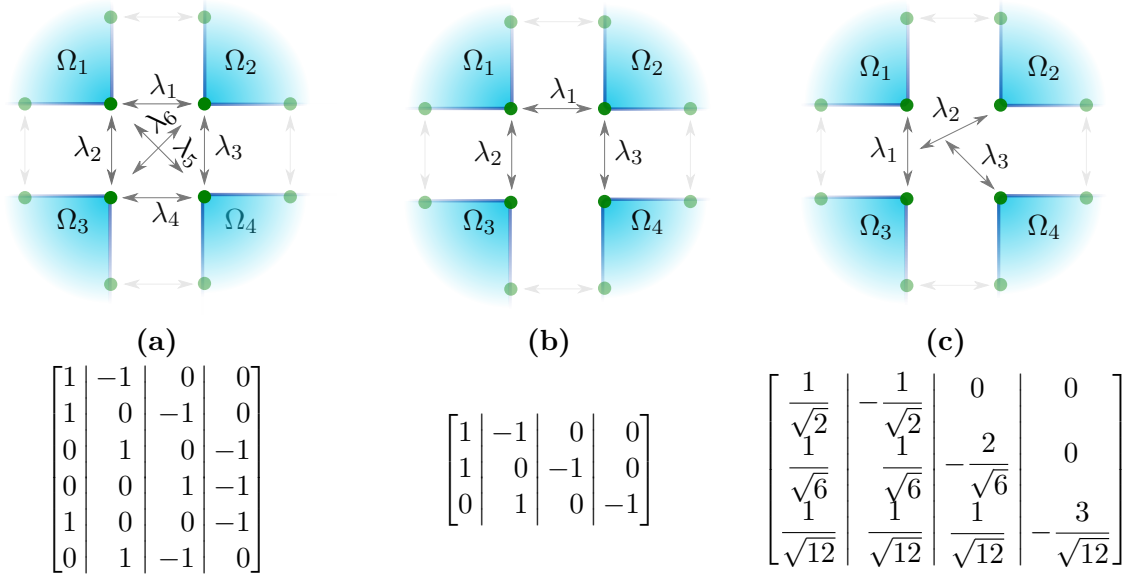
kde $\text{diag}(\bullet)$ označuje pouze diagonální prvky $\bullet$ a $\tilde{\mathbf{B}}^{(s)}$ označují přeškálované verze definované v sekci 4.4.

4.3 Zavedení vazeb v operátoru $\mathbf{B}$

V kapitole 4.1 jsme zmínili fakt, že matice $\mathbf{B}$ není jednoznačně určená, a může tedy mít různou podobu. Pokud uzel j leží na hranici m_j subdomén, stačilo by předepsat celkem $(m_j - 1)$ podmínek pro každý stupeň volnosti na tomto uzlu. Zavedení vazeb z $\{-1, 0, 1\}$ výhradně mezi dvěma stupni volnosti, které je implementačně jednoduché a přímočaré, ovšem nemusí být

³Dirichletův, neboť slouží k vyřešení N_s Dirichletových problémů v každé iteraci [TW05]

nejvýhodnější z pohledu fyzikálního chování představeného problému. Možností je zavedení všech možných podmínek, kdy je stupňům volnosti na rohovém uzlu j přiřazeno celkem $\binom{m_j}{2}$ řádků v $\mathbf{B}$, což vede ke vzniku lineárně závislých řádků (redundantních vazeb) v $\mathbf{B}$. Touto volbou sice vědomě zvětšujeme rozměr hraniční úlohy (4.14), ale umožňuje přímočaře sestavit mechanicky konzistentní rozložení Lagrangeových multiplikátorů v každém iteračním kroku. Přestože v případě redundantních podmínek není vektor λ unikátně určený, výsledná přemístění u ale zůstávají jednoznačně stanovitelné. V případě znalosti multiplicity m_j každého uzlu na hranici Γ je možností také přímé sestavení $\mathbf{B}$ s ortonormálními řádky. Při takové volbě není třeba sestavovat škálované verze této matice.



Obrázek 4.1: Rohový uzel na styku čtyř subdomén a podoba příslušných řádků $[\mathbf{B}^{(1)}|\mathbf{B}^{(2)}|\mathbf{B}^{(3)}|\mathbf{B}^{(4)}]$:
a) Plně redundantní set vazeb, b) Jedna z možností s minimálním počtem vazeb, c) Ortonormální vazby

4.4 Škálované verze $\tilde{\mathbf{B}}$

Vhodným škálováním matic $\mathbf{B}$ lze docílit levného a velmi efektivního zlepšení konvergence. Pro snazší pochopení učiníme krátkou odbočku k mechanické interpretaci metod založených na FETI přístupu.

4.4.1 Interpretace algoritmu

Kostra algoritmického postupu všech řešičů z rodiny FETI je z mechanického pohledu velmi intuitivně uchopitelná. Již jsme zmínili, že vektor λ má fyzikální význam diskrétně působících sil mezi jednotlivými subdoménami, které je navzájem zpětně váží k sobě tak, aby jednotlivé části hranice byly kompatibilní. Důležitým poznatkem je také fakt, že residuum projektované na podprostor $\text{Ker}(\mathbf{G}^T)$, viz řádek 4 algoritmu 1, má význam nespojitosti v poli posunů v

aktuálním kroku iterace k [RF99], neboť platí

$$\begin{aligned}
w_k &= P^T r_k \\
&= P^T (d - F\lambda_0 - F\tilde{\lambda}_k) \\
&= I(d - F\lambda_0 - F\tilde{\lambda}_k) - (I - P^T)(d - F\lambda_0 - F\tilde{\lambda}_k) \\
&= d - F\lambda_0 - F\tilde{\lambda}_k - G \left[G^T Q G \right]^{-1} G^T Q (d - F\lambda_0 - F\tilde{\lambda}_k) \\
&= d - F(\lambda_0 + \tilde{\lambda}_k) - G\alpha_k \\
&= \sum_{s=1}^{N_s} B^{(s)} u_k^{(s)}.
\end{aligned} \tag{4.17}$$

(1) - Dekompozice domény. Uzly jsou definovány a číslovány pouze lokálně. Uzly na hranici Γ jsou u duálních metod tedy zavedeny vícekrát než jednou.

(2) Stanovení vektoru λ_0 , neboli nalezení takových vzájemně vyvážených sil na hranicích jednotlivých subdomén, které zachovávají všechny domény v rovnováze s působícím zatížením. Následně jsou pro lokálně vyvážené ale nekompatibilní domény iterativně stanovovány korekce těchto sil tak, aby byla zajištěna spojitost na hranách.

Opakuj, dokud není řešení dostatečně přesné

(3.1) - Rozdělení a přiřazení nespojitosti jednotlivým doménám podle zvoleného škálování.

V prvním kroku spočívá aplikace předpodmiňovače ve stanovení očekávaných oprav v posunech

$$\begin{aligned}
\Delta u_k^{(s)} &= -(\tilde{B}^{(s)})^T w_k, \\
&= \tilde{u}_k^{(s)} - u_k^{(s)},
\end{aligned}$$

(3.2) - Vyřešení N_s lokálních Dirichletových problémů, tedy nalezení lokální silové odezvy na zatížení odhadovanými deformačními korekcemi,

$$\Delta f_k^{(s)} = \tilde{S}^{(s)} \Delta u_k^{(s)}.$$

V případě skutečných Schurových doplňků se jedná o přesné síly, *lumped* předpodmiňovač odpovídá silám na doméně se zafixovanými vnitřními (vazbami nedotčenými) uzly.

(3.3) - Lokální Neumannovy problémy, tedy stanovení opravného vektoru z rozdělení příspěvků (v případě vhodného škálování) kompatibilních ale nevyvážených (pokud není dosaženo konvergence) žádaných silových korekcí $\Delta f_k^{(s)}$ pomocí stejného škálování jako v (4.18)

$$z = \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{B}^{(s)} \Delta f_k^{(s)} \tag{4.18}$$

$$= \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{B}^{(s)} \tilde{S}^{(s)} (\tilde{B}^{(s)})^T w_k \tag{4.19}$$

(3.4) - **Aktualizace** λ minimalizací energie kvadratické formy spojené s PPCG problémem.

(4) - **Lokální dopočetní hodnoty posunů** po stanovení amplitud pootočení a posuvů domén.

V nejjednodušším případě lze předpodmiňovač v rovnici (4.2) sestavit pomocí matic B , s užitím vztahu o reziduu (4.17) ale zjistíme, že taková volba nemůže být v případě vazeb typu boolean v souladu s předpokládaným zajištěním kompatibility nového odhadu $\tilde{u}$. Jinými slovy lze tedy říci, že hodnoty vymáhaných nových přemístění na hranici Γ^{pq} sousedících subdomén p a q jsou rozdílné a tedy nová oprava již z podstaty nesměruje ke splnění podmínek spojitosti.

Proto se využívá škálování, které tyto vlastnosti zajišťuje a je tedy v jistém smyslu konzistentní.

Mechanicky konzistentní předpodmiňovač spočívá v (volně převzato z [RF99])

1. Stanovení mechanicky konzistentních inkrementů $\Delta u^{(s)}$ tak, aby platilo

$$\sum_{s=1}^{N_s} B^{(s)} \tilde{u}_k^{(s)} = \sum_{s=1}^{N_s} B^{(s)} (u_k^{(s)} + \Delta u_k^{(s)}) = 0 \quad (4.20)$$

2. a mechanicky konzistentních korekcí z v Alg.1, ř. 5

$$\begin{aligned} B^{(s)T} z &= \Delta f^{(s)} \\ \text{pokud} \\ \sum_{s=1}^{N_s} \Delta f^{(s)} &= 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

Přípustné podoby mechanicky konzistentních škálování jsou uvedeny níže.

4.4.2 Pro redundantní vazby

Na základě úvah o předpokládaném fyzikálním chování konstrukce lze v k -tém iteračním kroku stanovit $\tilde{u}_k$ jako vhodně vážený průměr aktuálních u_k . V případě vnitřně homogenní konstrukce lze očekávat, že prostý průměr aktuálně stanovených hodnot posunů bude představovat věrný odhad $\tilde{u}_k$. Takové škálování, označované jako **multiplicitní**, lze stanovit pouze se znalostí počtu subdomén, které mají na své hranici vybraný uzel. V [RF99] byla představena podoba škálování vedoucí k mechanicky konzistentnímu rozdělení sil pro plně redundantní zavedení vazeb jako

$$\tilde{B}^{(s)} = \tilde{D}^{(s)} B^{(s)}, \quad (4.22)$$

s diagonální maticí $\tilde{D}^{(s)}$ stanovenou níže.

4.4.2.1 Multiplicitní škálování

Označme $\mathcal{N}_{x,j}$ množinu indexů všech subdomén, které mají na své hranici uzel dotčený j -tou vazbou v $\mathbf{B}$, a $\#\mathcal{N}_{x,j}$ kardinalitu této množiny. Potom lze diagonální prvky matice $\tilde{\mathbf{D}}^{(p)}$ stanovit jako

$$\tilde{D}_{ii}^{(p)} = \begin{cases} \frac{1}{\#\mathcal{N}_{x,j}} & \text{pokud } \mathbf{B}_{j,i}^{(p)} \neq 0 \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases} \quad (4.23)$$

4.4.2.2 Tuhostní škálování (k – scaling)

V případě, že různě tuhé části konstrukce sledují hranici Γ^{pq} , je možné také levně stanovit efektivnější variantu škálování. Lze očekávat, že přesnější odhad $\tilde{u}_k$ bude takový, který se bude více blížit doméně s vyšší tuhostí.

Analogicky jako v předchozím případě označme $\mathcal{N}_{x,j}$ množinu indexů všech subdomén na kterých se nachází uzel stanovený příslušným nenulovým prvkem v j -tém řádku $\mathbf{B}$. Bez újmy na obecnosti navíc pro zjednodušení zápisu předpokládejme, že stupně volnosti dotčené j -tou vazbou mezi $\Omega^{(p)}$ a $\Omega^{(q)}$ (a tedy všech subdomén $r \in \mathcal{N}_{x,j}$) jsou řazeny totožně. Potom lze diagonální prvky matice $\tilde{\mathbf{D}}^{(p)}$ stanovit jako

$$\tilde{D}_{ii}^{(p)} = \begin{cases} \frac{K_{ii}^{(q)}}{\sum_{r \in \mathcal{N}_{x,j}} K_{ii}^{(r)}} & \text{pokud } \mathbf{B}_{j,i}^{(p)} \neq 0 \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases} \quad (4.24)$$

Tuhosti na jednotlivých stupních volnosti na Γ jsou tedy reprezentovány příslušnými diagonálními prvky matic tuhostí.

4.4.3 Libovolné vazby

Zobecněním lze výše představeného škálování docílit pro libovolnou podobu vazeb následovně [Spi]

$$\tilde{\mathbf{B}}^{(s)} = \left(\sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(j)} (\mathbf{D}^{(j)})^{-1} \mathbf{B}^{(j)\top} \right)^\dagger \mathbf{B}^{(s)} (\mathbf{D}^{(s)})^{-1}, \quad (4.25)$$

kde

$$\mathbf{D}^{(p)} = \begin{cases} \text{diag}(\mathbf{K}^{(p)}) & \dots \text{ v případě } \mathbf{tuhostního} \text{ škálování} \\ \mathbf{I} & \dots \text{ v případě } \mathbf{multiplicitního} \text{ škálování.} \end{cases}$$

Člen $(\sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(j)} (\mathbf{D}^{(j)})^{-1} \mathbf{B}^{(j)\top})$ na pravé straně rov. (4.25) má blokově diagonální strukturu, přičemž velikost bloků, které stačí (pseudo)invertovat, odpovídá počtu vazeb zavedených na stupni volnosti každého uzlu. V případě, že $\mathbf{B}$ má plnou řádkovou hodnotu, je tento člen dobře definovaný a jeho skutečná inverze nepředstavuje výpočetně drahou operaci.

Volně řečeno, v případě škálování zachovávajícího skoky v posunech, tedy takového, pro které platí vztah

$$\sum_{s=1}^{N_s} \left(\mathbf{B}^s (\tilde{\mathbf{B}}^s)^\top \right) \mathbf{B}^j = \mathbf{B}^j, \quad (4.26)$$

již nemá způsob zavedení vazeb (podkapitola 4.3) vliv na rychlost konvergence metody a je tak spíše otázkou chuti při implementaci.

Připomeňme, že ortonormální vazby představují speciální případ konzistentního zavedení, kde se spokojíme s *a priori* danou opravou. Může tedy být variantou pro výpočetně jednoduché homogenní úlohy.

4.5 Volba projekce

Nechť $m < n$ a $\mathbf{G}$ je pro tuto chvíli $\mathbb{R}^{n \times m}$ matice s plnou sloupcovou hodnotí, $\mathbf{F}$ je symetrická pozitivně definitní matice. Řešme systém

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^\top & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix}. \quad (4.27)$$

Přesné řešení označme $\hat{\lambda}$, $\hat{\alpha}$.

Řešení na $\text{Ker}(\mathbf{G}^\top)$

Řešme pro tuto chvíli první rovnici (4.27) ve tvaru

$$\mathbf{F}\lambda = \mathbf{d} - \mathbf{G}\alpha \quad (4.28)$$

na $\text{Ker}(\mathbf{G}^\top)$. S využitím principu Lagrangeových multiplikátorů hledáme řešení

$$\hat{\lambda}_1 = \arg \min_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^n \\ \mathbf{G}^\top \lambda = 0}} \frac{1}{2} \lambda^\top \mathbf{F} \lambda - (\mathbf{d} - \mathbf{G}\alpha)^\top \lambda, \quad (4.29)$$

řešený opět v podobě KKT systému

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^\top & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda \\ \gamma \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{d} - \mathbf{G}\alpha \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (4.30)$$

Odkondenzováním problému na duální neznámé γ ve smyslu Schurových doplňků dostáváme

$$\mathbf{G}^\top \mathbf{F}^{-1} \mathbf{G} \gamma = \mathbf{G}^\top \mathbf{F}^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{G}\alpha). \quad (4.31)$$

Potom

$$\gamma = \left[\mathbf{G}^\top \mathbf{F}^{-1} \mathbf{G} \right]^{-1} \mathbf{G}^\top \mathbf{F}^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{G}\alpha) \quad (4.32)$$

a z (4.30, 4.32)

$$\hat{\lambda}_1 = \mathbf{F}^{-1} (\tilde{\mathbf{d}} - \mathbf{G}\alpha) - \mathbf{F}^{-1} \mathbf{G} \gamma = \overbrace{(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-1} \mathbf{G} [\mathbf{G}^\top \mathbf{F}^{-1} \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^\top)}^{\mathbf{P}_{\mathbf{F}, \perp \mathbf{G}}} \mathbf{F}^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{G}\alpha). \quad (4.33)$$

Jelikož $P_{F,\perp G} F^{-1} G = 0$ (viz příloha A.1, vztah A.8), výše hledané řešení není závislé na α . Lze tedy také psát

$$\hat{\lambda}_1 = P_{F,\perp G} F^{-1} (d - G\hat{\alpha}) = P_{F,\perp G} \hat{\lambda}, \quad (4.34)$$

čímž získáváme podle očekávání $\hat{\lambda}_1$ jako F -kolmou projekci řešení rovnice (4.27) na $\text{Ker}(G^T)$.

Řešení na $\text{range}(G)$

Řešme nyní (4.28) na prostoru $\text{Im}(G)$. Předpokládejme, že známe $\hat{\alpha}$. Získáme

$$G^T F G v = G^T (d - G\hat{\alpha}) \quad (4.35)$$

s řešením

$$\hat{\lambda}_2 = Gv = G \left[G^T F G \right]^{-1} G^T (d - G\hat{\alpha}) = \overbrace{G \left[G^T F G \right]^{-1} G^T F}^{P_{F,G}} \hat{\lambda}. \quad (4.36)$$

Jinými slovy lze $\hat{\lambda}_2$ stanovit opět jako F -ortogonální projekci označenou $P_{F,G}$ přesného řešení (4.27) na $\text{Im}(G)$.

Jak vidno, při řešení (4.27) na zadaných podprostorech se přirozeně vyskytuje F -kolmá projekce. Tu ale v praxi nejsme ochotni pro iterační řešič uvažovat, neboť by bylo třeba stanovit inverzi F a v takovém případě by bylo možné řešení snadno stanovit vyřešením úlohy (4.27) odkondenzované na α a přímým dopočítáním λ .

Řešení na $\text{Ker}(G^T)$ II

Řešme znovu (4.27) na jádru G^T , tentokrát ve tvaru jako v metodě FETI

$$\underbrace{P_{M,\perp G}^T F P_{M,\perp G}}_H \lambda = P_{M,\perp G}^T d, \quad P_{M,\perp G} = I - M^{-1} G \left[G^T M^{-1} G \right]^{-1} G^T \quad (4.37)$$

s maticí M^{-1} vhodně aproximující F^{-1} . V limitním případě můžeme uvažovat $M^{-1} = F^{-1}$, potom platí

$$P_{F,\perp G}^T F P_{F,\perp G} v = P_{F,\perp G}^T b. \quad (4.38)$$

Systémovou matici (4.38) pak lze zjednodušit

$$\begin{aligned} H &= (I - F^{-1} G \left[G^T F^{-1} G \right]^{-1} G^T)^T F (I - F^{-1} G \left[G^T F^{-1} G \right]^{-1} G^T) \\ &= F - G(G^T F^{-1} G)^{-1} G^T. \end{aligned}$$

Předpodmíněním H limitní volbou F^{-1} bychom získali

$$F^{-1} H = P_{F,\perp G} = I - F^{-1} G (G^T F^{-1} G)^{-1} G^T,$$

což je matice projekce se spektrem obsahujícím právě m nulových a $n-m$ vlastních čísel rovných 1.

Volba projekce má určující vliv na efektivitu duálních metod FETI. Dle porovnání níže je ale zjevné, že pro úlohy s větším rozptylem v koeficientech může i diagonální škálování výrazně zlepšit podmíněnost.

Číslo podmíněnosti $\kappa\left(\mathbf{PM}_*^{-1}\mathbf{P}^T\mathbf{F} \mid \text{range}(\mathbf{P})\right)$					
MTO: Iterace 05					
	$\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{I}$	$\mathbf{M}_{SL}^{-1}$	$\mathbf{M}_L^{-1}$	$\mathbf{M}_D^{-1}$	$\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{F}^{-1}$
P(I)	5.802×10^5	1.390×10^4	6.817×10^3	2.001×10^3	7.657×10^2
P($\mathbf{M}_{SL}^{-1}$)	7.755×10^5	1.634×10^2	7.479×10^1	2.018×10^1	2.068×10^0
P($\mathbf{M}_L^{-1}$)	8.405×10^5	2.082×10^2	6.867×10^1	1.551×10^1	1.687×10^0
P($\mathbf{M}_D^{-1}$)	4.945×10^6	7.835×10^2	4.435×10^2	1.155×10^1	6.001×10^0
P($\mathbf{F}^{-1}$)	1.505×10^6	5.353×10^2	1.340×10^2	6.211×10^1	1.000×10^0
MTO: Iterace 10					
	$\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{I}$	$\mathbf{M}_{SL}^{-1}$	$\mathbf{M}_L^{-1}$	$\mathbf{M}_D^{-1}$	$\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{F}^{-1}$
P(I)	1.822×10^{10}	6.672×10^8	3.518×10^8	1.103×10^8	2.374×10^7
P($\mathbf{M}_{SL}^{-1}$)	3.704×10^{11}	8.497×10^4	3.820×10^4	8.801×10^3	1.993×10^1
P($\mathbf{M}_L^{-1}$)	3.240×10^{11}	1.005×10^5	3.098×10^4	5.674×10^3	1.938×10^1
P($\mathbf{M}_D^{-1}$)	6.898×10^{11}	8.478×10^6	4.658×10^6	2.068×10^2	3.307×10^1
P($\mathbf{F}^{-1}$)	2.836×10^{10}	5.587×10^8	1.447×10^8	5.343×10^7	1.000×10^0
MTO: Iterace 50					
	$\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{I}$	$\mathbf{M}_{SL}^{-1}$	$\mathbf{M}_L^{-1}$	$\mathbf{M}_D^{-1}$	$\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{F}^{-1}$
P(I)	2.310×10^{10}	1.254×10^9	6.848×10^8	1.913×10^8	4.607×10^7
P($\mathbf{M}_{SL}^{-1}$)	3.154×10^{10}	1.356×10^4	6.025×10^3	2.665×10^3	5.793×10^1
P($\mathbf{M}_L^{-1}$)	3.307×10^{10}	1.656×10^4	5.099×10^3	1.931×10^3	4.634×10^1
P($\mathbf{M}_D^{-1}$)	1.157×10^{11}	3.635×10^4	1.474×10^4	6.931×10^2	3.956×10^1
P($\mathbf{F}^{-1}$)	3.197×10^{10}	1.573×10^9	4.194×10^8	1.605×10^8	1.000×10^0

Tabulka 4.1: Čísla podmíněnosti iterativně řešeného problému pro různé volby projekce a předpodmínění s tuhostním škálováním, získané na úlohách se sítí 10×10

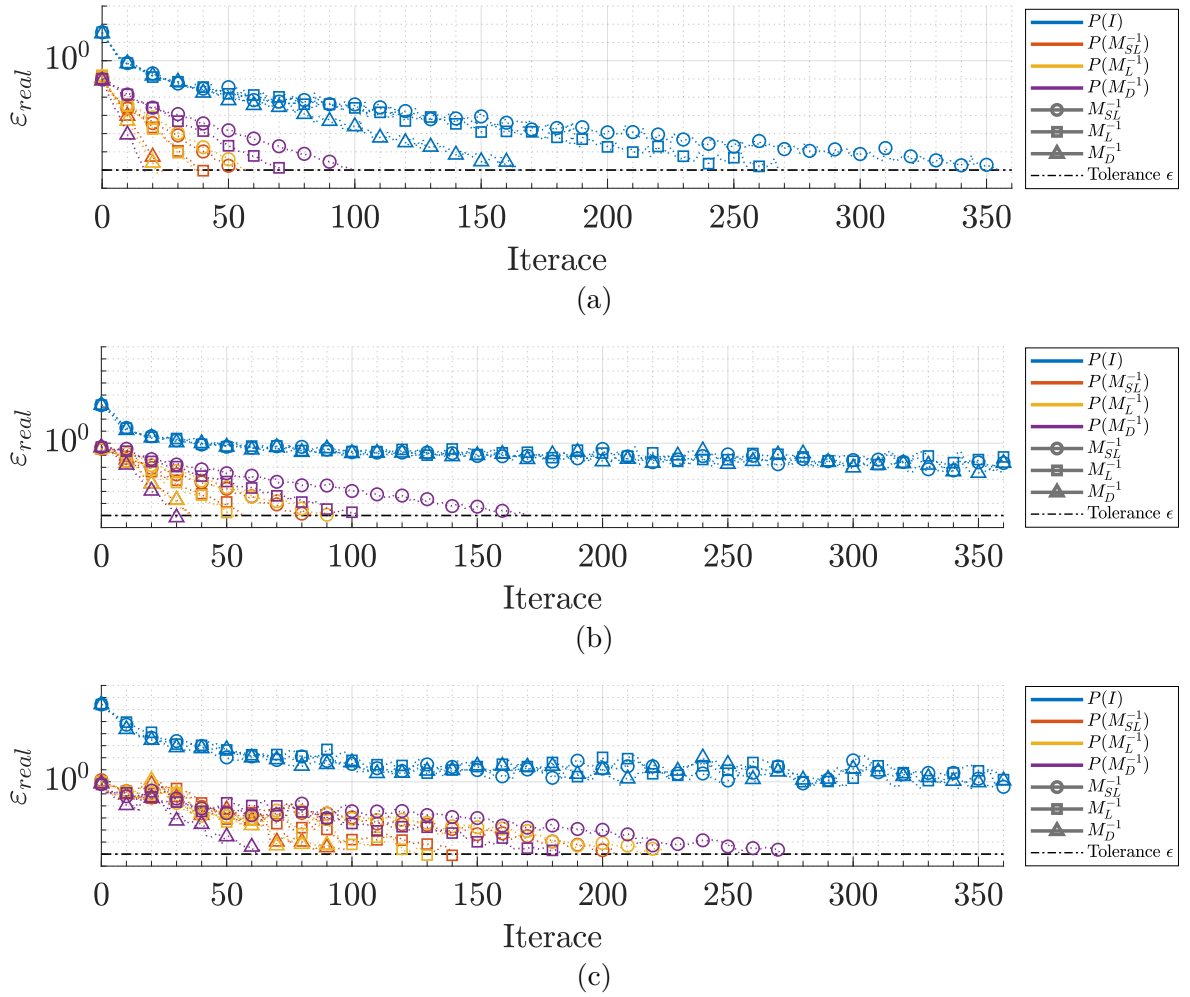
Jak lze sledovat z tab. 4.1, s dražším předpodmíněním číslo podmíněnosti obecně klesá, což je v souladu s očekáváním. V případě volby F-kolmé projekce spojené se skutečnou inverzí $\mathbf{F}$ v předpodmínění bylo numericky ověřeno, že systém má v takovém případě vlastní čísla pouze $\{0,1\}$ a řešení je získatelné na jednu iteraci. Zajímavým poznatkem je vzájemná neslučitelnost F-kolmé projekce s jinými (reálně aplikovatelnými) volbami $\mathbf{M}_*^{-1}$. Obecně lze z tabulky předpovídat, že pro jeden typ $\mathbf{M}^{-1}$ v předpodmiňovacím kroku není výhodné aplikovat dražší volbu $\mathbf{M}^{-1}$ pro definování projekce. Toto pozorování může být závislé na charakteru problému a předchozí poznatek nemusí platit dogmaticky, neboť konvergence bude záviset na celém rozložení spektra. Nicméně dle obr. 4.2, ve kterém je znázorněna závislost počtu

iterací a průběhu měřené chyby invariantní na hodnotě počátečního odhadu, se toto sledování potvrzuje.

Zde, pro zajištění porovnatelnosti, měříme chybu v realitvní euklidovské normě

$$\varepsilon_{real} = \frac{\|u_{direct} - u_{T-FETI}\|}{\|u_{direct}\|},$$

s řešením u_{direct} získaném přímo z (3.1), které je tímto prohlášené za referenční, a u_{T-FETI} je sestavené z lokálních příspěvků stanovených podle kapitoly 4. Zastavovací kritérium je stanoveno na $\varepsilon_{real} \leq 1 \times 10^{-6}$.



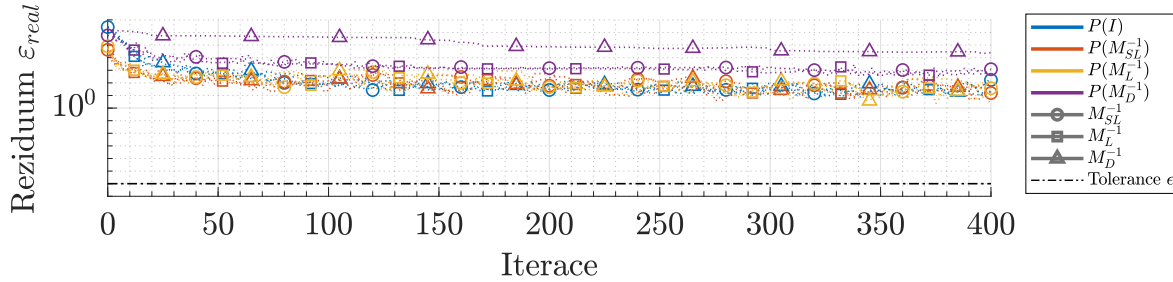
Obrázek 4.2: Průběh měřené chyby ε_{real} v průběhu iterací metody T-FETI s tuhostním škálováním a) 5. iterace v MTO, b) 10. iterace, c) 50. iterace MBB nosníku.

Optikou rychlostí konvergence měřenou počtem iterací se jako nejúčinnější podle očekávání jeví kombinace Dirichletova předpodmínění použitého taktéž k zavedení projekce (fialovou barvou). Ve srovnání s ostatními poskytuje solidní výsledky také diagonální škálování (oranžově). Jelikož je aplikace projektoru jednou z kritických částí metody, neboť není přirozeně paralelizovatelná, diagonální škálování je vítané, neboť nijak neovlivňuje řídkost hrubé úlohy

a s tím spojenou komunikací napříč doménami. Konzistentní volby pro definování projekce a následného předpodmínění vykazují obecně dobré výsledky ve srovnání s nejbližšími variantami, což je praktické. Použití ortogonálního projektoru (označen modrou barvou) se jeví jako nevhodné. Již v pátém iteračním kroku pro relativně homogenní rozložení materiálu (viz Obr. 2.1) je rychlost konvergence zřetelně pomalejší než v jiných případech, později již neposkytuje požadovanou přesnost a ustaluje se. Navíc je s ním spojená řádově vyšší hodnota počáteční chyby.

Počáteční odhad vstupující do algoritmu (určený rovnicí (4.13)) velmi názorně ilustruje míru informace o řešené úloze nesenou zvolenou ortogonalitou projekce, což potvrzují také schémata v Obr. 4.4. Je zřetelné, že v případě nejlepšího dosažitelného, t.j. $(M_D^{-1})^{-1}$ -kolmého projektoru představuje přímo získaná počáteční část řešení velmi věrný odhad toho skutečného. Naopak v případě pouhého euklidovsky kolmého projektoru nemá počáteční odhad žádné informace o rozložení tuhosti v konstrukci a relativní rozložení sil tak odpovídá spíše působení na prostém, materiálově homogenním nosníku. Je třeba zdůraznit, že ve všech schématech se jedná o totožnou úlohu. Působící síly jsou pro účely schémat různě škálované, což je patrné při pohledu na reakce v krajních uzlech na dolní hranici domény. S vědomím toho vyzní nepřesnost případu 4.4(c) o to zřetelněji.

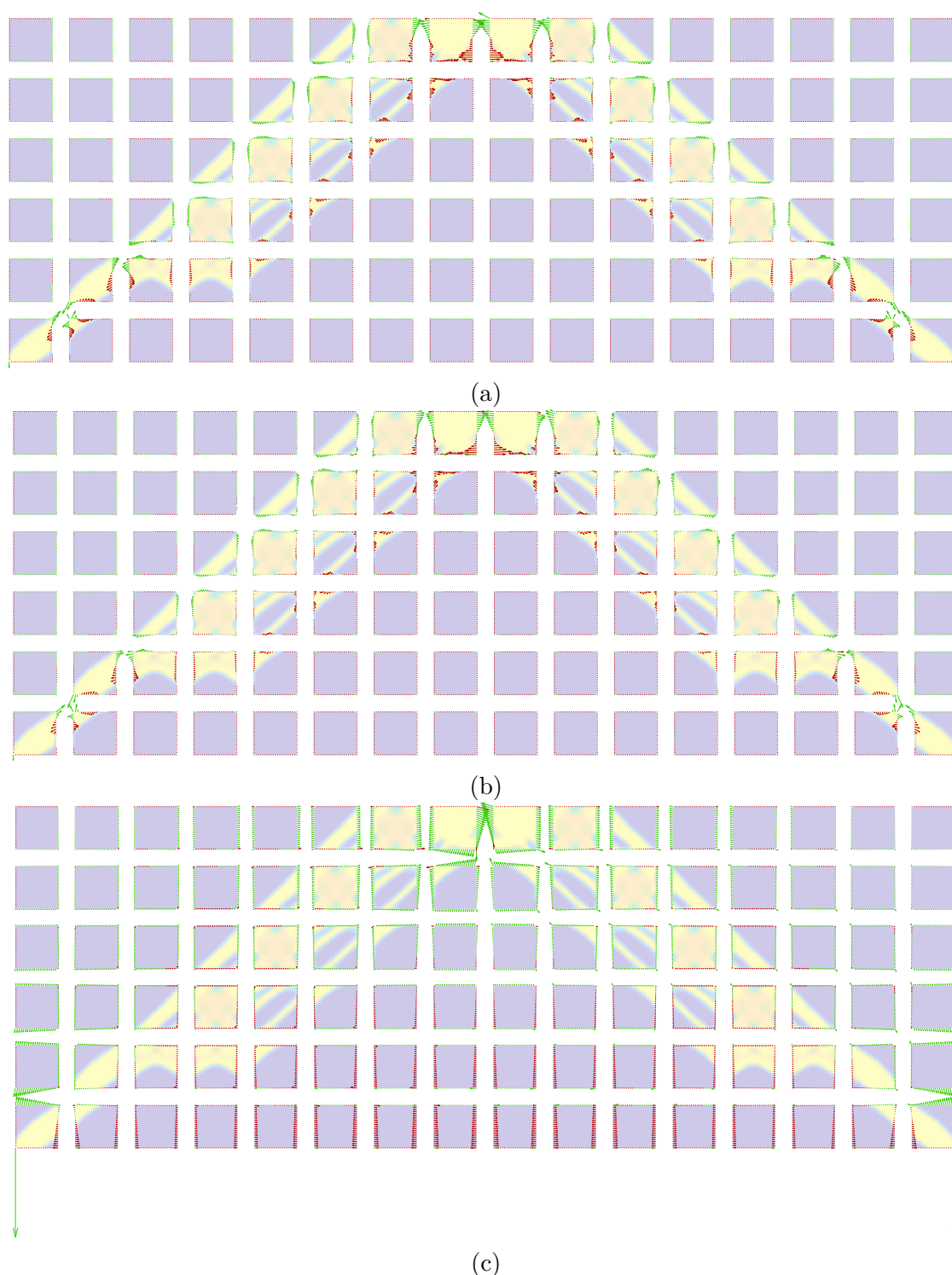
Z porovnání 4.2 a 4.3 je patrný stěžejní vliv použitého škálování. S výskytem rozdílů tuhostí napříč hranicemi sousedících subdomén je špatný odhad rozdělení nespojitosti u multiplicitního škálování zásadně omezující, společně s vysokým počátečním odhadem se pro nehomogenní problémy jeví jako prakticky nepoužitelné.



Obrázek 4.3: Průběh měřené chyby ε_{real} v průběhu iterací metody T-FETI s multiplicitním škálováním v 5. iteraci MTO

S přihlédnutím na obtížnost úloh vycházejících z MTO se pro další výpočty spokojíme se dvěma zdánlivě nejvhodnějšími variantami: (i) s projektorem $P(M_D^{-1})$ a (ii) úspornějším $P(M_{SL}^{-1})$; pro obě možnosti byl využit Dirichletův předpodmiňovač M_D^{-1} a k -scaling.

Výsledky jsou v souladu se závěry v [GRR03].



Obrázek 4.4: Ilustrativní vykreslení „lepících“ sil $(B^{(s)})^T \lambda$ (rov.4.9) ve 30. kroku TO. Zelená barva postihuje tlakové působení, červená tlakové. **a)** Skutečné rozložení v dokonvergovaném stavu **b)** Část řešení získaná na prostoru $\text{range}(M_D^{-1}G)$ **c)** Část řešení získaná na $\text{range}(G)$

Kapitola 5

FETI Dual-Primal

FETI Dual Primal (FETI-DP), představená poprvé v [FLL⁺01], je upravenou verzí původní FETI. Podstatou se velmi liší od Total-FETI, která zavedením Dirichletových okrajových podmínek pomocí Lagrangeových multiplikátorů zachovává „levitující“ charakter všech subdomén, které pak mají známá jádra semidefinitních matic tuhostí, což umožňuje jejich snadnou regularizaci. Přístup FETI-DP je naprosto opačný. Po vzoru FETI-2 je v celém průběhu iteračního řešení problému vynucována spojitost některých částí pole posunů. Ta je ale zavedena na globální úrovni v primárních neznámých, tedy je vhodné je zavést tak, aby byly veškeré domény dostatečně podepřené na to, aby bylo zabráněno výskytu energeticky nulových módů. Tím je zabráněno nutnosti sestavování pseudoinverzí.

5.1 Formulace FETI-DP

Uvažujme problém (3.1) a jeho dekompozici provedenou v kapitole 3. Na jednotlivých subdoménách rozlišujeme

1. **Vnitřní uzly** odpovídají u_I v dekompozici představené v 3.3

2. **Uzly na hranici**

- **Primární** Π jsou definovány unikátně na globální úrovni tak, aby předcházely nutnosti pseudoinvertovat lokální matice tuhostí. Zpravidla jsou do Π voleny koncové uzly jednotlivých hran na Γ (nebo rohové uzly).
- **Duální** Λ na hranici Γ , mezi kterými je iterativně vynucována spojitost.
- **Zbylé** B_r uzly na $(\bigcup_{s=1}^{N_s} \partial\Omega^{(s)}) \setminus \Gamma$.

Pro zpřehlednění zápisu předpokládáme, že stupně volnosti na hranici subdomény $\partial\Omega^{(s)}$ jsou řazeny tak, že platí

$$u_B^s = \begin{bmatrix} u_{B_r}^s \\ u_{\Lambda}^s \\ u_{\Pi}^s \end{bmatrix}, \quad K_{BB}^s = \begin{bmatrix} K_{B_r B_r}^s & K_{B_r \Lambda}^s & K_{B_r \Pi}^s \\ K_{\Lambda B_r}^s & K_{\Lambda \Lambda}^s & K_{\Lambda \Pi}^s \\ K_{\Pi B_r}^s & K_{\Pi \Lambda}^s & K_{\Pi \Pi}^s \end{bmatrix}, \quad \text{a} \quad f_{BB}^s = \begin{bmatrix} f_{B_r}^s \\ f_{\Lambda}^s \\ f_{\Pi}^s \end{bmatrix}. \quad (5.1)$$

a sloučením „nehraničních“ stupňů volnosti

$$u_{\mathcal{I}} = \begin{bmatrix} u_I \\ u_{B_r} \end{bmatrix}, \quad K_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^s = \begin{bmatrix} K_{II}^s & K_{IB_r}^s \\ K_{B_r I}^s & K_{B_r B_r}^s \end{bmatrix}, \quad \text{a} \quad f_{\mathcal{I}}^s = \begin{bmatrix} f_I^s \\ f_{B_r}^s \end{bmatrix}. \quad (5.2)$$

získáme pro naše účely vhodně přeznačené veličiny

$$\mathbf{u}^s = \begin{bmatrix} u_{\mathcal{I}}^s \\ u_{\Lambda}^s \\ u_{\Pi}^s \end{bmatrix}, \mathbf{K}^s = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\mathcal{II}}^s & \mathbf{K}_{\mathcal{I}\Lambda}^s & \mathbf{K}_{\mathcal{I}\Pi}^s \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathcal{I}}^s & \mathbf{K}_{\Lambda\Lambda}^s & \mathbf{K}_{\Lambda\Pi}^s \\ \mathbf{K}_{\Pi\mathcal{I}}^s & \mathbf{K}_{\Pi\Lambda}^s & \mathbf{K}_{\Pi\Pi}^s \end{bmatrix}, \text{ a } \mathbf{f}^s = \begin{bmatrix} f_{\mathcal{I}}^s \\ f_{\Lambda}^s \\ f_{\Pi}^s \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

FETI-DP obchází problém se semidefinitními maticemi zajištěním kontinuity v poli posunů primárních neznámých Π přímo při sestavení rovnic na globální úrovni. Označme množinu stupňů volnosti všech primárních uzlů jako

$$\mathbf{u}_{\Pi} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\Pi}^{(1)\top} & \dots & \mathbf{u}_{\Pi}^{(j)\top} & \dots & \mathbf{u}_{\Pi}^{(N_{\Pi})\top} \end{bmatrix}^{\top} \quad (5.4)$$

kde $u_{\Pi}^{(j)}$ představuje všechny stupně volnosti j -tého z celkem N_{Π} primárních uzlů. Potom podobně jako v rov. (4.2) zavedeme pro každou subdoménu matice tak, aby platilo

$$B_{\Lambda}^{(s)} u_{\Lambda}^{(s)} = \pm u_{\Lambda}^{(s)}, \quad \sum_{j=1}^{N_s} B_{\Lambda}^{(j)} u_{\Lambda}^{(j)} = 0, \quad (5.5)$$

$$B_{\Pi}^{(s)} u_{\Pi} = u_{\Pi}^{(s)}. \quad (5.6)$$

S využitím vztahů (5.3) až (5.6) získáme, opět v souladu s principem Lagrangeových multiplikátorů, finální tvar soustavy lineárních rovnic v podobě

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^{(1)} & \mathbf{K}_{\mathcal{I}\Lambda}^{(1)} & & & & \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathcal{I}}^{(1)} & \mathbf{K}_{\Lambda\Lambda}^{(1)} & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \mathbf{K}_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^{(N_s)} & \mathbf{K}_{\mathcal{I}\Lambda}^{(N_s)} \\ & & & & \mathbf{K}_{\Lambda\mathcal{I}}^{(N_s)} & \mathbf{K}_{\Lambda\Lambda}^{(N_s)} \\ & & & & & \mathbf{B}_{\Pi}^{(N_s)\top} \mathbf{K}_{\Pi\mathcal{I}}^{(N_s)} \\ & & & & & \mathbf{B}_{\Pi}^{(N_s)\top} \mathbf{K}_{\Pi\Lambda}^{(N_s)} \\ \mathbf{B}_{\Pi}^{(1)\top} \mathbf{K}_{\Pi\mathcal{I}}^{(1)} & \mathbf{B}_{\Pi}^{(1)\top} \mathbf{K}_{\Pi\Lambda}^{(1)} & \dots & \dots & \mathbf{B}_{\Pi}^{(N_s)\top} \mathbf{K}_{\Pi\mathcal{I}}^{(N_s)} & \mathbf{B}_{\Pi}^{(N_s)\top} \mathbf{K}_{\Pi\Lambda}^{(N_s)} \\ 0 & \mathbf{B}_{\Lambda}^{(1)} & \dots & \dots & 0 & \mathbf{B}_{\Lambda}^{(N_s)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\mathcal{I}\Pi}^{(1)} \mathbf{B}_{\Pi}^{(1)} & 0 \\ \mathbf{K}_{\Lambda\Pi}^{(1)} \mathbf{B}_{\Pi}^{(1)} & \mathbf{B}_{\Lambda}^{(1)\top} \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{K}_{\mathcal{I}\Pi}^{(N_s)} \mathbf{B}_{\Pi}^{(N_s)} & 0 \\ \mathbf{K}_{\Lambda\Pi}^{(N_s)} \mathbf{B}_{\Pi}^{(N_s)} & \mathbf{B}_{\Lambda}^{(N_s)\top} \\ \mathbf{K}_{\Pi\Pi} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\mathcal{I}}^{(1)} \\ \mathbf{u}_{\Lambda}^{(1)} \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{\mathcal{I}}^{(N_s)} \\ \mathbf{u}_{\Lambda}^{(N_s)} \\ \mathbf{u}_{\Pi} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{\mathcal{I}}^{(1)} \\ \mathbf{f}_{\Lambda}^{(1)} \\ \vdots \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{\mathcal{I}}^{(N_s)} \\ \mathbf{f}_{\Lambda}^{(N_s)} \\ \mathbf{f}_{\Pi} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.7)$$

kde jsme označili

$$\mathbf{K}_{\text{III}} = \sum_{s=1}^{N_s} (\mathbf{B}_{\text{II}}^{(s)})^T \mathbf{K}_{\text{III}}^{(s)} \mathbf{B}_{\text{II}}^{(s)}$$

a

$$\mathbf{f}_{\Pi} = \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}_{\Pi}^{(s)} \mathbf{f}_{\Pi}^{(s)}$$

představuje sestavenou pravou stranu.

Rovnice (5.7) je strukturou velmi podobná (3.4) s tím rozdílem, že zde je zavedena duální veličina λ . Proto se FETI také označuje jako metoda duálního Schurova doplňku. Pomocným sjednocením vnitřních a duálně definovaných uzlů

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_R^{(s)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{\mathcal{I}}^{(s)} \\ \mathbf{u}_{\Lambda}^{(s)} \end{bmatrix}, & \mathbf{K}_{RR}^{(s)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^{(s)} & \mathbf{K}_{\mathcal{I}\Lambda}^{(s)} \\ \mathbf{K}_{\Lambda\mathcal{I}}^{(s)} & \mathbf{K}_{\Lambda\Lambda}^{(s)} \end{bmatrix}, & \mathbf{f}_R^{(s)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{\mathcal{I}}^{(s)} \\ \mathbf{f}_{\Lambda}^{(s)} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{B}_R^{(s)} &= \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{B}_{\Lambda}^{(s)} \end{bmatrix}, & \mathbf{K}_{\Pi R}^{(s)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\Pi\mathcal{I}}^{(s)} & \mathbf{K}_{\Pi\Lambda}^{(s)} \end{bmatrix}, & \mathbf{K}_{R\Pi}^{(s)} &= \mathbf{K}_{\Pi R}^{(s)\top} \end{aligned} \quad (5.8)$$

lze po vzoru 3.1.1 z rov. (5.7) vyjádřit zbylé stupně volnosti jako

$$\mathbf{u}_R^{(s)} = (\mathbf{K}_{RR}^{(s)})^{-1} (\mathbf{f}_R^{(s)} - \mathbf{B}_R^{(s)\top} \lambda - \mathbf{K}_{R\Pi}^{(s)} \mathbf{B}_\Pi^{(s)} \mathbf{u}_\Pi), \quad (5.9)$$

neboť množina primárních uzlů Π je záměrně volena tak, aby submatice $\mathbf{K}_{RR}^{(s)}$ byly regulární. Zbylé stupně volnosti lze následně odkondenzovat dosazením rov. (5.9) do rov. (5.7), čímž dostaneme sedlobodovou úlohu v primárně-duální formulaci

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_{RR} & \mathbf{F}_{R\Pi} \\ \mathbf{F}_{\Pi R} & -\bar{\mathbf{K}}_{\Pi\Pi} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda \\ \mathbf{u}_\Pi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{d}_R \\ -\bar{\mathbf{f}}_\Pi \end{Bmatrix}, \quad (5.10)$$

kde jsme zavedli

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{RR} &= \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}_R^{(s)} (\mathbf{K}_{RR}^{(s)})^{-1} (\mathbf{B}_R^{(s)})^\top, \\ \mathbf{F}_{\Pi R}^\top = \mathbf{F}_{R\Pi} &= \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}_R^{(s)} (\mathbf{K}_{RR}^{(s)})^{-1} \mathbf{K}_{R\Pi}^{(s)} \mathbf{B}_\Pi^{(s)}, \\ \bar{\mathbf{K}}_{\Pi\Pi} &= \mathbf{K}_{\Pi\Pi} - \sum_{s=1}^{N_s} (\mathbf{K}_{R\Pi}^{(s)} \mathbf{B}_\Pi^{(s)})^\top (\mathbf{K}_{RR}^{(s)})^{-1} (\mathbf{K}_{R\Pi}^{(s)} \mathbf{B}_\Pi^{(s)}), \\ \mathbf{d}_R &= \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}_R^{(s)} (\mathbf{K}_{RR}^{(s)})^{-1} \mathbf{f}_R^{(s)}, \\ \bar{\mathbf{f}}_\Pi &= \mathbf{f}_\Pi - \sum_{s=1}^{N_s} (\mathbf{K}_{R\Pi}^{(s)} \mathbf{B}_\Pi^{(s)})^\top (\mathbf{K}_{RR}^{(s)})^{-1} \mathbf{f}_R^{(s)}. \end{aligned}$$

Opětovnou eliminací, tentokrát primárních přemístění $\mathbf{u}_\Pi$, dostáváme pro numerické iterační řešení výhodnější formulaci

$$(\mathbf{F}_{RR} + \mathbf{F}_{R\Pi} (\bar{\mathbf{K}}_{\Pi\Pi})^{-1} \mathbf{F}_{\Pi R}) \lambda = \mathbf{d}_R - \mathbf{F}_{R\Pi} (\bar{\mathbf{K}}_{\Pi\Pi})^{-1} \bar{\mathbf{f}}_\Pi, \quad (5.11)$$

neboť levá strana je tentokrát symetrická a pozitivně definitní a opět může být řešena metodami využívající Krylovovy prostory, např. předpodmíněnými sdruženými gradienty jako v Alg. 1 se zanedbáním projekcí (formálním stanovením $\mathbf{P} = \mathbf{I}$, zastavovací podmínka je pak stanovena shodně s T-FETI jako $\sqrt{\mathbf{w}^\top \mathbf{z}}$). Předpodmínění je sestaveno ve obdobném duchu jako v podsece 4.2, pouze (aproximovaný) Schurův doplněk je tvořen z množiny $\mathcal{I}$ a Λ , neboť příspěvky Π jsou řešeny přímo.

Poté, co je stanoven vektor λ , lze sestavit $\mathbf{u}_\Pi$ z druhé rovnice v (5.10) a zbylá přemístění jednoduše z (5.9).

Kapitola 6

Zlepšující varianty

Jelikož jsou z literatury známé problémy s konvergencí metod založených na FETI přístupu, zejména v případě (i) vysokého rozptylu v koeficientech, (ii) zazubených hran, (iii) domén s nevhodným poměrem stran (obojí problém zejména u algoritmů dělení oblasti) a (iv) výskytu heterogenit napříč jednotlivými doménami, byla snaha mnoha autorů tuto metodu vylepšit. Některé přístupy se soustředí na efektivnější řešení jinak nepozměněných vstupních vztahů např. za pomoci využití blokových variant sdružených gradientů: buď samostatným uvážením příspěvků jednotlivých subdomén do pravé strany (Block FETI) nebo využitím lokálních příspěvků v předpodmiňovači separátně k urychlení konvergence (S-FETI) [GRRS15]. Jiné se soustředí na postihnutí problematické části hraniční úlohy pomocí deflačních strategií nebo *projector preconditioning*. Tyto přístupy adaptivně reagují na špatně podmíněný systém tím, že část řešení zodpovědnou za pomalou konvergenci předřeší přímo a pouze zbylou řeší sdruženými gradienty. Taková pomoc je ale výpočetně drahá, neboť potřebujeme mít k dispozici bázi vhodně zvoleného podprostoru ($\text{Ker}(\mathbf{G}^T)$ u ryze duální FETI), kterého lze docílit např. řešením lokálních zobecněných problémů vlastních čísel. Jelikož potřebujeme pouze vektory příslušející několika nejmenším vlastním číslům, může být takový problém řešen iteračně. Taková operace je ale v každém případě výpočetně velmi drahá.

Pro naše porovnání jsme vybrali z literatury známé a efektivní vylepšení pro rozsáhlé a špatně podmíněné soustavy rovnic. Nejdříve jsme využili metodu předpodmiňovaných (projektovaných) gradientů s plnou reortogonalizací směrových vektorů, dále simultánní FETI s více využitými směry v jednom iteračním kroku. Pro testovací účely byla naimplementována dvouúrovňová metoda FETI-2, která je ve srovnání obohacena o GenEO hrubý prostor. Z pozorování efektivity těchto vylepšení je následně ozkoušen vliv přidání nových primárně definovaných uzlů v pravidelných intervalech u metody FETI-DP, jehož slibné výsledky motivovaly naše snahy o vhodnější adaptivní výběr. V závěru kapitoly je navrženo vlastní jednoduché kritérium pro tuto možnost, které samo o sobě představuje minimální navýšení výpočetního času.

6.1 Plná reortogonalizace

V algoritmu 1 předpokládáme, že směrové vektory zůstávají konjugované, tedy v iteračním kroku i platí

$$\mathbf{p}_j^T \mathbf{F} \mathbf{p}_k = 0 \quad \forall j \neq k, \quad j, k < i.$$

Za tohoto předpokladu využíváme známého vztahu [Kru06] $\beta_i = \frac{\mathbf{y}_i^T \mathbf{w}_i}{\mathbf{y}_{i-1}^T \mathbf{w}_{i-1}}$ pro stanovení nového směru ve tvaru $\mathbf{p}_i = \mathbf{y}_i + \beta_i \mathbf{p}_{i-1}$.

To platí v přesné aritmetice, nicméně s rostoucím počtem kroků se výrazněji projevují numerické chyby. Proto se pro reálné inženýrské problémy využívá plně reortogonalizace [FPL00, GR06].

Nový směr se vyhledává ve tvaru

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{w}_i - \sum_{l=0}^{i-1} \phi_{il} \mathbf{p}_l,$$

přičemž ϕ_{il} se stanoví pro všechna $l < i$ z podmínky F-ortogonality směrových vektorů

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_l^T \mathbf{F} \mathbf{p}_i &= \mathbf{p}_l^T \mathbf{F} \mathbf{y}_i - \sum_{k=0}^{i-1} \phi_{ik} \mathbf{p}_k^T \mathbf{F} \mathbf{p}_i \\ 0 &= \mathbf{p}_l^T \mathbf{F} \mathbf{y}_i - \phi_{il} \mathbf{p}_l^T \mathbf{F} \mathbf{p}_l \\ \phi_{il} &= \frac{\mathbf{p}_l^T \mathbf{F} \mathbf{y}_i}{\mathbf{p}_l^T \mathbf{F} \mathbf{p}_l} \end{aligned}$$

Namísto výše nastíněného klasického Gramova-Schmidtova procesu se k reortogonalizaci běžněji využívá numericky stabilnější sekvenční modifikovaný Gramův-Schmidtův algoritmus (vizte řádky 14 až 16 v Alg. 3)

6.2 Simultaneous-FETI

Standardně je metoda FETI závislá na kvalitě předpodmínění. V jeho standardní podobě jsou ovšem i přes lokálně optimální příspěvky a užívaná škálování vytraceny informace na globální úrovni úlohy a řešení tak nekonverguje dostatečně rychle, případně vůbec. Pro případ heterogenit bylo vyvinuto Simultaneous-FETI [GRRS15], které poodkrývá aditivní charakter předpodmínění.

Namísto uvažování pouze jednoho směrového vektoru $\mathbf{p}$ je v každé iteraci u Simultaneous FETI (S-FETI) využito k minimalizaci energie všech N_s lokálních příspěvků $\tilde{\mathbf{B}}^{(s)} \tilde{\mathbf{S}}^{(s)} (\tilde{\mathbf{B}}^{(s)})^T$ jakožto nových „směrů“, každý náležící jedné ze subdomén. Nové směry jsou dány příslušnými sloupci v $\mathbb{P}$, přičemž pro původní konjugovaný směrový vektor platí $\mathbf{p} = \mathbb{P} \mathbf{1}$, kde $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^{N_s}$.

Důsledkem toho je tentokrát nutné v každé iteraci i řešit systém $N_s \times N_s$ rovnic spojených s minimalizací funkcionálu a konjugací vektorů. Pro řešení modulárních konstrukcí se nejvíce osvědčila adaptace s procedurou kontrolující hodnotu Δ_i taktéž popsaná v [GRRS15], která pomocí Choleského faktorizace s pivotací [HHL07] extrahuje lineárně závislé směry v případě, že je Δ_i pouze semidefinitní. Namísto nutnosti pseudoinvertovat tuto matici pak lze následně F-ortonormalizovat zbylé, lineárně nezávislé směry.

Algoritmus 2: Rank-Revealing Simultaneous FETI [GRRS15]

```

1  $r_0 = d - F\lambda_0$ 
2  $w_0 = P^T r_0$ 
3  $Z_0 = [\dots, \tilde{B}^{(s)} \tilde{S}^{(s)} (\tilde{B}^{(s)})^T w_0, \dots], \forall s \in \{1, \dots, N_s\}$ 
4  $\mathbb{P}_0 = P Z_0$ 
5  $\tilde{\lambda}_0 = 0$ 
6  $i \leftarrow 0$ 
7 while  $\sqrt{w_i^T Z_i} 1 > \epsilon$  do
8    $Q_i = F \mathbb{P}_i$ 
9    $\Delta_i = Q_i^T P_i$ 
10  Faktorizuj  $N \Delta_i N^T = L L^T$  tak, aby  $L = \begin{bmatrix} \tilde{L} & 0 \\ \times & 0 \end{bmatrix}$ 
11   $\mathbb{P}_i \leftarrow \mathbb{P}_i N^T \begin{bmatrix} \tilde{L}^{-T} \\ 0 \end{bmatrix}$ 
12   $Q_i \leftarrow Q_i N^T \begin{bmatrix} \tilde{L}^{-T} \\ 0 \end{bmatrix}$ 
13   $\Delta_i \leftarrow I$ 
14   $\gamma_i = \mathbb{P}_i^T w_i$ 
15   $\tilde{\lambda}_{i+1} = \tilde{\lambda}_i + \mathbb{P}_i^T \gamma_i$ 
16   $w_{i+1} = w_i - P^T Q_i \gamma_i$ 
17   $Z_{i+1} = [\dots, \tilde{B}^s \tilde{S}^s (\tilde{B}^s)^T w_{i+1}, \dots]$ 
18   $\mathbb{P}_{i+1} = P Z_{i+1}$ 
19  for  $0 \leq j \leq i$  do
20     $\Psi_j = Q_j^T \mathbb{P}_{i+1}$ 
21     $\mathbb{P}_{i+1} \leftarrow \mathbb{P}_{i+1} - \mathbb{P}_j \Psi_j$ 
22   $i \leftarrow i + 1$ 

```

6.3 FETI-2

V předchozích kapitolách jsme se přesvědčili, že výběr hrubého prostoru a zajištění spojitosti části řešení (FETI-DP) má stěžejní dopad na zajištění a rychlost konvergence. Pokud bychom byli schopni určit část prostoru řešení zodpovědnou za problémy s konvergencí, mohli bychom obohatit přímo stanovené řešení o část získanou na tomto podprostoru a následně iterativně vyhledávat na zbylém, již méně problémovém podprostoru. Toto je myšlenka dvouúrovňové metody FETI, také nazývané FETI-2, představené v [FM98, FCMR98].

Zavedením druhé úrovně řešení lze, podobně jako v (4.12) pomocí stanovení částečného řešení a testováním inkrementů pomocí projekce, v každém iteračním kroku vynutit volitelnou podmínku v podobě $C^T w = 0$, kde w je projektované residuum (Alg. 1, 3¹). Matice C tvoří bázi vhodně vybraného podprostoru $\text{Im}(P)$ a její podoba může být volena různě. Například stanovením sloupce v C s nulovými prvky a n -tým prvkem rovným 1 (případně jakékoli

¹Značení neznámých se oproti literatuře liší z důvodu snazšího srovnání s alg. 1

nenulové konstantě) lze po vzoru FETI-DP docílit platnosti podmínky představené n -tým řádkem matice B .

Algoritmus 3: FETI-2 s plnou reortogonalizací [GRRS15]

Vyřeš $PM^{-1}P^T F \lambda = PM^{-1}P^T (d - F \lambda_0)$

```

1  $\tilde{\lambda}_0 = C (C^T F C)^{-1} C^T (d - F \lambda_0)$ 
2  $P_C = I - C (C^T F C)^{-1} C^T F$ 
3  $r_0 = d - F \lambda_0$ 
4  $w_0 = P^T P_C^T r_0$ 
5  $z_0 = M^{-1} w_0$ 
6  $p_0 = P z_0$ 
7  $i \leftarrow 0, \quad \hat{\lambda}_0 \leftarrow 0$ 
8 while  $\sqrt{p_i^T z_i} > \epsilon$  do
9    $\alpha_i = \frac{p_i^T z_i}{p_i^T F P_C p_i}$ 
10   $\hat{\lambda}_{i+1} = \hat{\lambda}_i + \alpha_i p_i$ 
11   $w_{i+1} = w_i - \alpha_i P^T P_C^T F p_i$ 
12   $z_i = M^{-1} w_i$ 
13   $p_{i+1} = P z_{i+1}$ 
14  for  $0 \leq j \leq i$  do
15     $\phi_{i,j} = p_i^T F P_C p_{i+1}$ 
16     $p_{i+1} \leftarrow p_{i+1} - \frac{\phi_{i,j}}{p_j^T F P_C p_j} p_j$ 
17   $i \leftarrow i + 1$ 
18  $\lambda = \lambda_0 + \tilde{\lambda}_0 + P_C \hat{\lambda}_i$ 
```

Symbolem ϵ je označena dostatečně nízká tolerance energetické chyby.

6.3.1 FETI GenEO

Sofistikovanější způsob, který pomocí řešení zobecněných úloh vlastních čísel adaptivně vybírá primární neznámé v metodě FETI-DP, navrhl Mandel a Sousedík v [MS07]. V článku [SDH⁺13] byla představena dvouúrovňová varianta FETI se spektrem systémové matice *a priori* ohraničeným v závislosti na zadaném prahu.

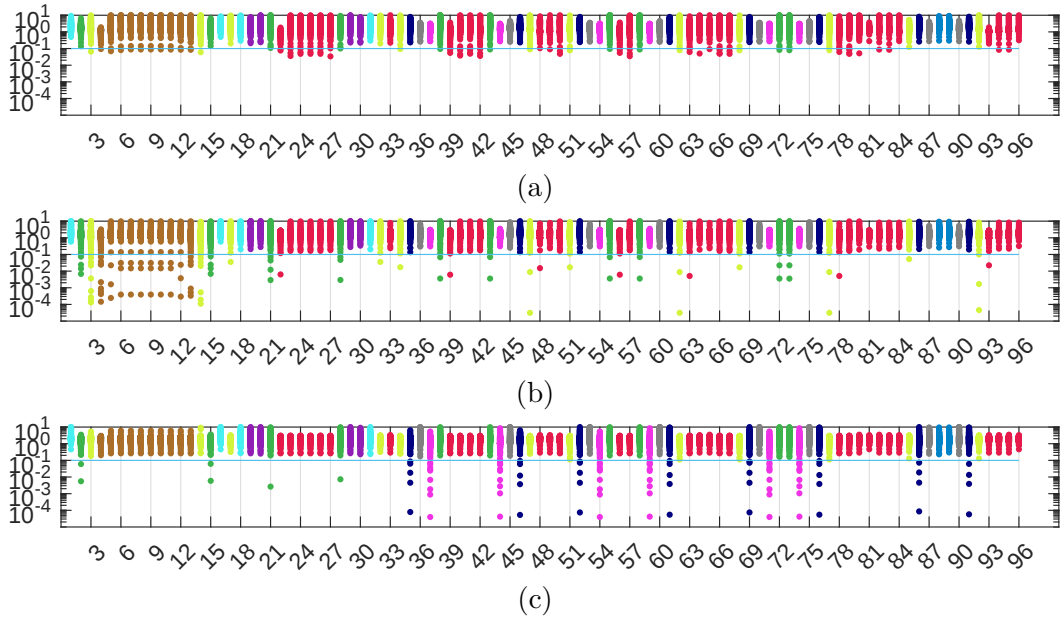
Tato varianta spočívá v nalezení (aproximovaných) vlastních vektorů odpovídajících nejmenším nenulovým vlastním číslům N_s zobecněných problémů vlastních čísel na úrovni subdomén [SDH⁺13]

$$S^{(s)} v_k^{(s)} - \mu_k^{(s)} B^{(s)T} \left(\sum_{p \in \mathcal{N}^s} \tilde{B}^{(p)} \tilde{S}^{(p)} \tilde{B}^{(p)T} \right) B^{(s)} v_k^{(s)} = 0, \quad (6.1)$$

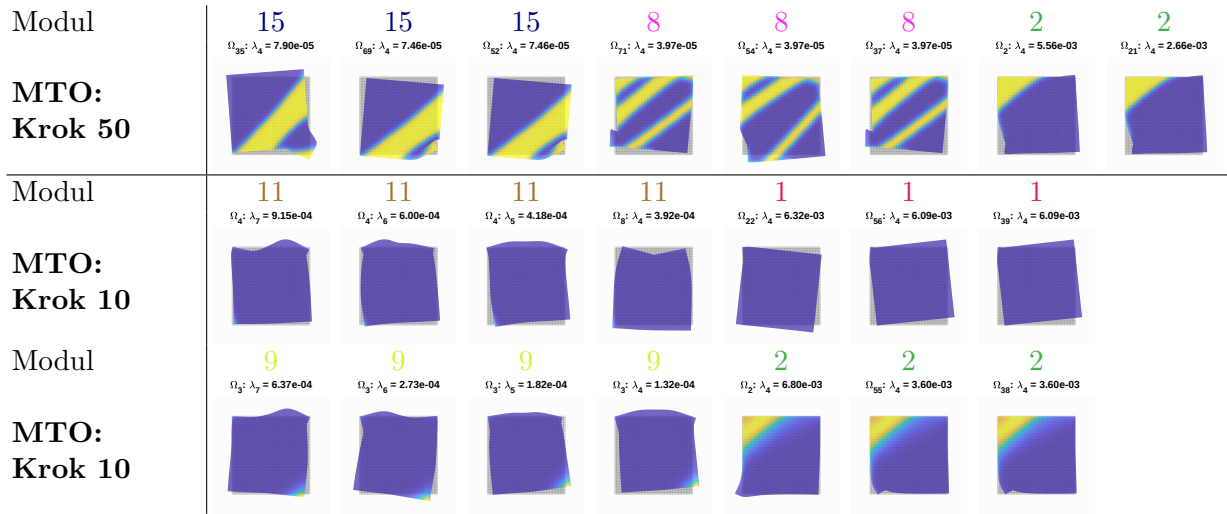
kde $\mathcal{N}^s = \{p \in \{1 \dots N_s\}, p \neq s, \overline{\Omega^{(s)}} \cap \overline{\Omega^{(p)}} \neq \emptyset\}$, a následným stanovením sloupců C jako $\{P \tilde{S} B^{(s)T} v_k^{(s)} : 0 \leq \mu_k^{(s)} \leq \tau\}$ pro každou doménu s a zvolený práh τ .

Ačkoli lze tyto problémy řešit paralelně a zavedená modularita umožňuje recyklovat příspěvky v (6.1), ve kterých se opakuje výskyt stejných bloků subdomény a jejích sousedů tvořených stejnými moduly nehledě na umístění v konstrukci, takové řešení představuje enormní výpočetní zátěž.

S pomocí této metody bylo možné alespoň nepřímo validovat správnost implementace. V grafech 6.1 je v semilogaritmickém měřítku znázorněno rozložení části nejmenších vlastních čísel (svislá osa) na jednotlivých subdoménách (vodorovná osa), barvou jsou odlišeny jednotlivé moduly (viz 2.1). V závěrečném porovnání (kapitola 7) se potvrzuje, že obohacením hrubého prostoru o relativně nízký počet vlastních vektorů odpovídajících odlehlým malým vlastním číslům postačí k velmi znatelnému snížení potřebných iteračních kroků.



Obrázek 6.1: Nejmenší vlastní čísla odpovídající „špatným“ módům na jednotlivých subdoménách. Typ modulu je představen jednou z 8 barev. Získané na síti 50×50 a) 5. iterace, b) 10. iterace a c) 50. iterace v MTO



Obrázek 6.2: Vybrané vlastní vektory zodpovědné za špatnou podmíněnost

6.4 FETI-DP s adaptivně obohaceným setem Π

V sekci 6.3.1 byla zmíněna robustní verze metody FETI. Kromě enormní výpočetní náročnosti se ale velké množství náročně získaných bazových módů vyskytuje předvídatelně na hranách s místní nespojitostí v tuhostech, viz příklady některých vlastních módů zobrazené s vyznačenými typy modulů na Obr. 6.2. Při letmém srovnání 2.1 a 6.1 je patrné, že nejvíce kritické nízkenergetické módy se zdůvodnitelně koncentrují u domén, které mají lokální nižší tuhosti než odpovídající část na sousední doméně.

Lze očekávat, že rozšiřování množiny primárních neznámých o nové uzly bude u hybridní FETI-DP představovat postupný odklon duálního charakteru metody k primárnímu, a bude tím posílena robustnost. Pro ověření jsme přidali prostřední bod každé hrany na Γ do množiny Π . Z porovnání v tabulce 6.1 vyplývá, že transformací prostředního uzlu na každé hraně, tj. postupem, který budeme značit (FETI-DP⁺¹), je obnovena konvergence a počet iterací je nízký i ve srovnání s nejlepší verzí T-FETI. Ve stejném duchu lze přidávat další uzly do třetin (značeno FETI-DP⁺²), čtvrtin, atp. jednotlivých hran. Další přidávání se ale již neprojevuje významnou úsporou v dosaženém počtu iterací.

MTO: Porovnání na síti 50×50			
	it. 5	it. 10	it. 50
FETI-DP	45	900	—
FETI-DP ⁺¹	32	516	120
FETI-DP ⁺²	28	166	74
T-FETI — $P(M_D^{-1}), M_D^{-1}$	55	1624	2000+

Tabulka 6.1: Počet iterací do splnění $\varepsilon_{rz} < 10^{-6}$ FETI-DP, k – scaling

Ač je přidání p pravidelně rozmístěných nových primárních uzlů na všechny hrany na

Γ nápomocné, vede ovšem na přibližně p -násobné zvětšení rozměru primárního problému. Motivováni těmito uspokojivými výsledky se můžeme snažit nalézt vhodnější postup pro stanovení dodatečných primárních uzlů. Třeba by bylo možné nalézt heuristické kritérium pro selekci transformovaných uzlů a jejich umístění. V ideálním případě by heuristické kritérium (i) mělo reflektovat tuhost v okolí uzlu, neboť „měkké“ oblasti nemají stabilizující účinek v globálním měřítku úlohy, (ii) mělo přihlídnout k poloze již existujících primárních uzlů, tj. nemělo by definovat nové body v blízkosti jiných primárních uzlů, a (iii) nemělo generovat nové uzly tam, kde je konstrukce napříč dvěma doménami lokálně homogenní.

Jako kritický prvek pro iterační řešiče se v modulární topologické optimalizaci jeví častý výskyt různých tuhých částí konstrukce, které navíc vlivem modularity sledují hranici jednotlivých domén. Proto se osvědčilo jednoduché vzájemné testování rozdílu diagonálních prvků matice tuhosti vůči zadanému prahu θ , který určuje míru tolerance pro vznik nových uzlů. V rámci této práce bylo vytvořeno následující heuristické kritérium. Prvně definujme restrikcí tuhosti na hranici dvou domén p a q

$$\rho^{s,(pq)} = \text{diag}(\mathbf{K}_{(pq)}^s) \quad \text{pro } s \in \{p, q\},$$

kde $\mathbf{K}_{(pq)}^s$ je submatice $\mathbf{K}^s$ odpovídající všem n_{pq} stupňům volnosti, které přísluší N_{pq} uzlům na $\overline{\Omega^{(p)}} \cap \overline{\Omega^{(q)}}$. Předpokládejme bez ztráty na obecnosti, že každému uzlu přísluší d stupňů volnosti, tedy $n_{pq} = dN_{pq}$, a tyto jsou na obou doménách řazeny totožně po uzlech. Pro zjednodušení zápisu lze pomocně označit $\rho_{a,b}^{s,(pq)}$ prvek vektoru $\rho^{s,(pq)}$ na pozici $(a-1)d + b$ odpovídající hodnotě na b -tého stupně volnosti a -tého uzlu.

Rozhodnutí, zda se daný stupeň volnosti b bodu a na rozhraní zahrne do množiny stupňů volnosti $\mathcal{Q}$ určených k potenciálnímu přidání do primárních neznámých u FETI-DP, je založen na porovnání hodnot $\rho_{a,b}^{p,(pq)}$ a $\rho_{a,b}^{q,(pq)}$ a předem stanoveném prahu θ . Navržený algoritmus postupně prochází všechna rozhraní domén. V případě, že je rozdíl tuhostí na daném uzlu i hranice větší v absolutní hodnotě než zvolený práh θ pro libovolný ze stupňů volnosti j příslušných danému uzlu je tento uzel přidán mezi potenciální kandidáty. Po té, co algoritmus zkontroluje všechny uzly na jednom rozhraní (vyjma koncových), vybere z potenciálních kandidátů uložených v $\mathcal{Q}$ prostřední uzel a všechny stupně volnosti příslušné tomuto uzlu přidá mezi primární neznámé. Postup je shrnutý v Algoritmu 4. Body přidávané mezi primární uzly pro naši testovací úlohu a zvolený práh $\theta = 1 \times 10^2$ jsou vykresleny na obrázku 6.3.

Algoritmus 4: Adaptivní transformace neznámých

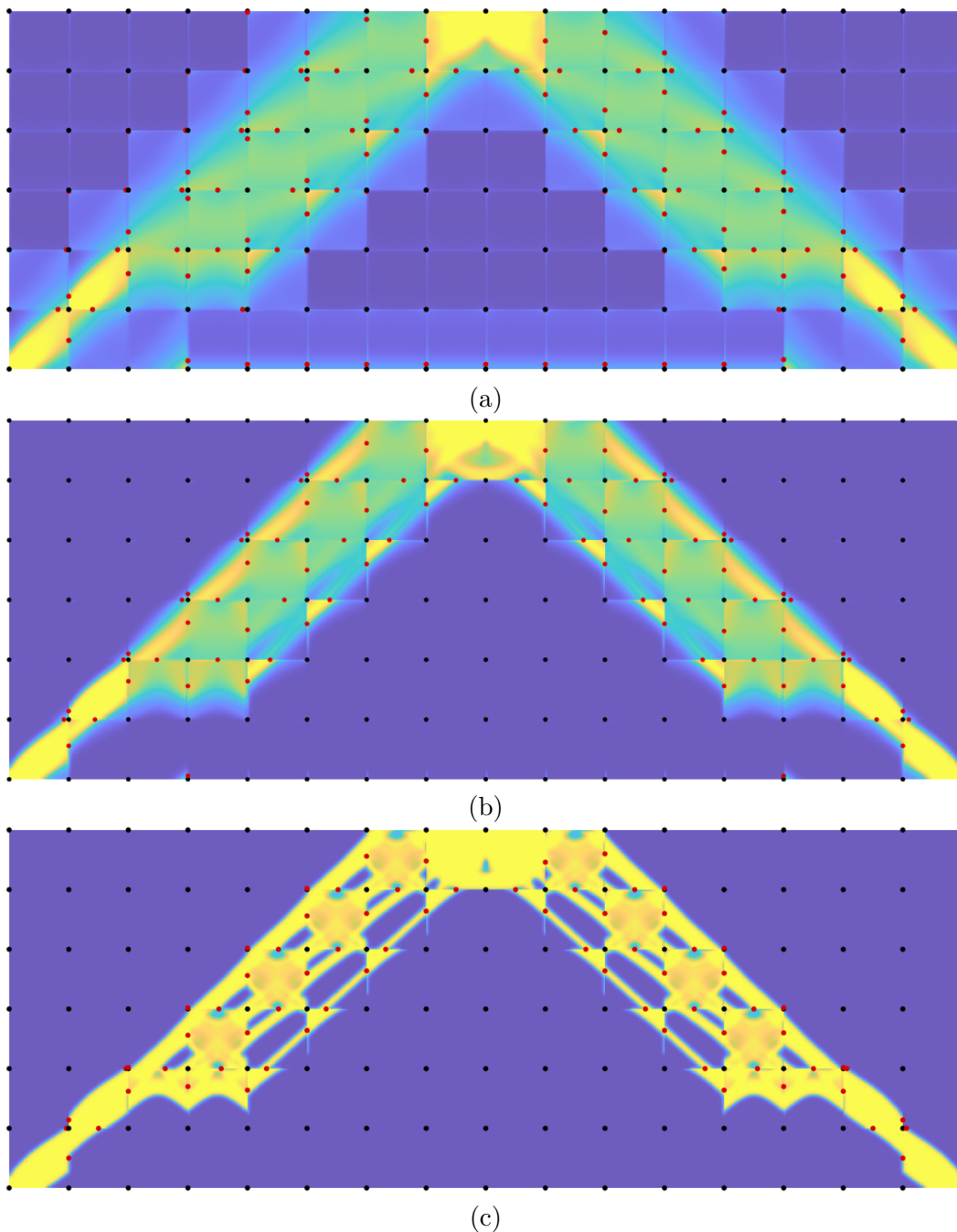
```

1 for  $\forall p, q : \{p, q \in \{1, 2, \dots, N_s\}, \overline{\Omega^{(p)}} \cap \overline{\Omega^{(q)}} \neq \emptyset\}$  do
2    $\rho^{s,(pq)} = \text{diag}(\mathbf{K}_{(pq)}^s)$  for  $s \in \{p, q\}$ 
3    $\mathcal{Q} \leftarrow \emptyset$ 
4   for  $i = 2, 3, \dots, N_{pq} - 1$  do
5     if  $\exists j \in \{1 \dots d\} : |\rho_{ij}^{p,(pq)} - \rho_{ij}^{q,(pq)}| \geq \theta$  then
6        $\mathcal{Q} \leftarrow \mathcal{Q} \cup i$ 
7    $N = \#\mathcal{Q}$ 
8   Add  $\mathcal{Q}(\lceil N/2 \rceil)$  to  $\Pi$ 

```

Je vhodné zdůraznit, že stejně jako tuhostní škálování je i toto kritérium zcela závislé na uzlových tuhostech na hranici aproximovanými příslušným diagonálním prvkem matice

tuhosti. Dalo by se očekávat, že sofistikovanější kritéria, např. s přesahem alespoň jedné vrstvy, by byla účinnější. Nicméně výhoda našho přístupu je, že výběr primárních uzlů může probíhat adaptivně „za chodu“ během stanovování tuhostně škálovaných koeficientů s minimem dodatečného úsilí.



Obrázek 6.3: Příklad původních (černě) a adaptivně vybraných (červeně) primárních uzlů pro $\theta = 1 \times 10^2$ pro testovací úlohu: a) 5. iterace, b) 10. iterace a c) 50. iterace v modulární topologické optimalizaci

Kapitola 7

Numerické porovnání

Jak již bylo zmíněno v kapitole 2, výše představené algoritmy byly testovány na třech výstupech z iterací modulárně topologické optimalizace, které jsou vykresleny na obrázku 2.2. Pro porovnání byla zvolena diskretizace jednotlivých modulů taková, že výsledná úloha obsahovala 300×800 bilineárních čtvercových prvků.

Tabulky 7.1 až 7.3 shrnují porovnání metod a možných přístupů k jejich řešení. Zastavovací kritérium bylo nastaveno jako $\epsilon = \sqrt{\mathbf{w}^T \mathbf{z}} \leq 1 \times 10^{-6}$. V případě ustálení měřené energetické chyby je iterace, ve které došlo k pozastavení jejího poklesu, doplněna o symbol * a odpovídající hodnotu ϵ . Obdobně symbol $\square$ označuje případ, ve kterém nebylo dosaženo testovacího kritéria před maximálním počtem iterací. θ označuje stanovený práh u adaptivních přístupů, N_Λ rozměr hrubého problému, analogicky N_Π počet stupňů volnosti na uzlech definovaných na primární úrovni, u N_Π^{new} nově přidaných.

Pro vzájemné srovnání je uvedena také relativní L_2 norma chyby řešení

$$\varepsilon_{L_2} = \frac{\|\mathbf{u}_{\text{direct}} - \mathbf{u}_{\text{method}}\|}{\|\mathbf{u}_{\text{direct}}\|}$$

vůči referenčnímu řešení získanému přímým řešičem.

Potvrdilo se, že základní metody jsou náchylné na výskyt heterogenity. V prvním sledovaném kroku dosáhnou řešení i neupravené metody s ohledem na jemně nepravidelné rozložení tuhosti v uspokojivě nízkém počtu iterací. Platí, že Dirichletovo předpokládání s méně výpočetně náročným diagonálním škálováním může být výhodnější variantou z pohledu časového trvání výpočtu. Samotná plná reortogonalizace při nízkém počtu iterací nemá na řešení významný vliv. FETI-DP oproti Total-FETI dosáhlo řešení v nižším počtu iterací a dosáhlo menší relativní chyby vůči referenčnímu přímému řešení. Výrazné snížení počtu iterací poskytlo u obou metod simultánní FETI, naopak adaptivní metody nepřinesly významnou úsporu. FETI GenEO neidentifikuje v pátém iteračním kroku prakticky žádné výrazně odlehle nízkoenergetické módy a tak z jeho využití neplyne zásadní výhoda. Přidané uzly ve FETI-DP mají pozitivní účinek, ale heuristika je citlivá na velikosti zadaného prahu.

V druhé testované iteraci dosahovaly standardní podoby metod vysokého počtu iterací. Velmi výrazný vliv opětovného vynucování konjugace směrových vektorů se na počtu iterací projevil u FETI-DP. Na druhou stranu u T-FETI výrazněji nepomohlo. FETI GenEO pro zvolený práh eliminovalo přibližně 0,5 až 1 % rozměru hrubého prostoru a s 32, respektive 17 iteracemi reprezentuje možnosti adaptivních způsobů řešení. Slepé přidávání nových vrcholů bylo opět pomocné, ale heuristika s výrazně menším primárním rozměrem a nižšími dosaženými iteracemi reflektuje důležitost výběru pozice nově přidaných uzlů. Svůj účel velmi dobře plní

S-FETI ve spojení s FETI-DP, jež samo konverguje rychle a jeho spojení s heuristikou přineslo v nepatrně menším počtu iterací výsledek s menší chybou vůči referenčnímu řešení.

V posledním sledovaném kroku na konci optimalizačního procesu již kompletně selhává FETI-DP. Ve variantě se samostatnou reortogonalizací zřejmě vlivem nahromadění numerických chyb ztrácí stabilitu, ve zbývajících dvou případech PPCG a RR-SFETI nedokonverguje. Tento optimalizační krok je obecně problematický a jedině Total-FETI s GenEO a FETI-DP s obohaceným setem dokonvergují v přijatelném počtu iterací. V této iteraci se již naplno projeví síla adaptivně obohaceného setu primárních veličin Π , především pak v kombinaci s S-FETI. Heuristika se osvědčila, když při téměř třetinovém počtu transformovaných uzlů a ve stejném počtu iterací dosáhla o řád menší normy chyby vůči přímému řešení. Za zmínku stojí také fakt, že se již tak nízký počet iterací dále nesnižuje se zvýšením prahu, tj. s přidáním dodatečných uzlů do primárního setu. Rozšíření části přímo stanovovaného řešení se ve velmi náročných úlohách jeví jako klíčové.

Numerické porovnání - MTO: Krok 05				
Přístup			Počet iterací	ε_{L_2}
Total-FETI				
	Proj.	N_Λ		
PCPG	$P(M_{SL}^{-1})$	17193	83	$5,15 \times 10^{-10}$
PCPG-FO			80	$5,21 \times 10^{-10}$
RR S-FETI			18	$5,11 \times 10^{-10}$
PCPG	$P(M_D^{-1})$	17193	55	$5,08 \times 10^{-10}$
PCPG-FO			54	$5,15 \times 10^{-10}$
RR S-FETI			16	$5,15 \times 10^{-10}$
FETI-DP				
	N_Π	N_Λ		
PCGM	238	16660	45	$8,14 \times 10^{-11}$
PCGM-FO	238	16660	44	$6,84 \times 10^{-11}$
RR S-FETI	238	16660	17	$6,51 \times 10^{-11}$
Total-FETI s GenEO hrubým prostorem				
	τ	N_Λ^{modes}	N_Λ	
PCPG-FO	0,1	75	17193	$5,08 \times 10^{-10}$
PCPG-FO	0,5	475	17193	$5,18 \times 10^{-10}$
FETI-DP s (adaptivně) obohaceným setem Π				
	θ	N_Π^{new}	N_Λ	
PCGM ⁺¹	—	340	16320	$3,58 \times 10^{-11}$
PCGM ⁺²	—	680	15980	$4,23 \times 10^{-11}$
PCGM	10^1	52	16608	$3,58 \times 10^{-11}$
RR S-FETI	10^1	52	16608	$3,91 \times 10^{-11}$
PCGM	10^2	214	16446	$2,21 \times 10^{-11}$
RR S-FETI	10^2	214	16446	$1,12 \times 10^{-11}$

Tabulka 7.1: Porovnání zkoumaných iteračních metod pro testovací úlohu z 5. iterace modulární topologické optimalizace. Ve všech metodách byl použit Dirichletův předpokládav a tuhostní škálování.

Numerické porovnání - MTO: Krok 10				
Přístup			Počet iterací	ε_{L_2}
Total-FETI				
	Proj.	N_Λ		
PCPG	$P(M_{SL}^{-1})$	17193	691	$1,02 \times 10^{-7}$
PCPG-FO			$500^\square$	$3,97 \times 10^{-7}$
RR S-FETI			$150^\square_{(1.61 \times 10^{-4})}$	$3,71 \times 10^{-7}$
PCPG	$P(M_D^{-1})$	17193	$\approx 520^*_{(1.1 \times 10^{-6})}$	$6,36 \times 10^{-8}$
PCPG-FO			401	$6,39 \times 10^{-8}$
RR S-FETI			$150^\square_{(5,5 \times 10^{-5})}$	$2,10 \times 10^{-7}$
FETI-DP				
	N_Π	N_Λ		
PCGM	238	16660	900	$1,54 \times 10^{-6}$
PCGM-FO	238	16660	101	$1,55 \times 10^{-6}$
RR S-FETI	238	16660	22	$3,08 \times 10^{-7}$
Total-FETI s GenEO hrubým prostorem				
	τ	N_Λ^{modes}	N_Λ	
PCPG-FO	0,1	107	17193	$2,49 \times 10^{-7}$
PCPG-FO	0,3	299	17193	$3,08 \times 10^{-7}$
FETI-DP s (adaptivně) obohaceným setem Π				
	θ	N_Π^{new}	N_Λ	
PCGM ⁺¹	—	340	16320	$1,04 \times 10^{-8}$
PCGM ⁺²	—	680	15980	$8,02 \times 10^{-9}$
PCGM	10^1	114	16546	$1,52 \times 10^{-8}$
RR S-FETI	10^1	114	16546	$1,49 \times 10^{-8}$
PCGM	10^2	156	16504	$1,70 \times 10^{-8}$
RR S-FETI	10^2	156	16504	$1,85 \times 10^{-8}$

Tabulka 7.2: Porovnání zkoumaných iteračních metod pro testovací úlohu z 10. iterace modulární topologické optimalizace. Ve všech metodách byl použit Dirichletův předpodmíňovač a tuhostní škálování.

Numerické porovnání - MTO: Krok 50					
Přístup				Počet iterací	ε_{L_2}
Total-FETI					
		Proj.	N_Λ		
PCPG		$P(M_{SL}^{-1})$	17193	753	$4,35 \times 10^{-7}$
PCPG-FO				$500^\square$	$1,31 \times 10^{-6}$
RR S-FETI				$146^*(3.651 \times 10^{-4})$	$6,57 \times 10^{-7}$
PCPG		$P(M_D^{-1})$	17193	$1000^\square(1,295 \times 10^{-4})$	$1,60 \times 10^{-2}$
PCPG-FO				486	$4,91 \times 10^{-7}$
RR S-FETI				$150^\square(2.906 \times 10^{-4})$	$6,66 \times 10^{-7}$
FETI-DP					
		N_Π	N_Λ		
PCGM		238	16660	Nekonverguje	—
PCGM-FO		238	16660	Diverguje	—
RR S-FETI		238	16660	Nekonverguje	—
Total-FETI s GenEO hrubým prostorem					
	τ	N_Λ^{modes}	N_Λ		
PCPG-FO	0,1	98	17193	28	$5,08 \times 10^{-7}$
PCPG-FO	0,4	16	17193	385	$5,34 \times 10^{-7}$
FETI-DP s (adaptivně) obohaceným setem Π					
	θ	N_Π^{new}	N_Λ		
PCGM ⁺¹	—	340	16320	120	$2,85 \times 10^{-8}$
PCGM ⁺²	—	680	15980	74	$2,96 \times 10^{-9}$
PCGM	10^1	124	16536	120	1.31×10^{-8}
RR S-FETI	10^1	124	16536	21	$1,10 \times 10^{-8}$
PCGM	10^2	140	16520	102	$7,07 \times 10^{-9}$
RR S-FETI	10^2	140	16520	21	$8,07 \times 10^{-9}$

Tabulka 7.3: Porovnání zkoumaných iteračních metod pro testovací úlohu z 50. iterace modulární topologické optimalizace. Ve všech metodách byl použit Dirichletův předpodmiňovač a tuhostní škálování.

Kapitola 8

Závěr

Tato práce se zabývala vhodností iteračních duálních metod dělení oblasti/doménové dekompozice pro řešení soustav rovnic v úlohách modulární topologické optimalizace. Byly implementovány dvě z užívaných odnoží duálních metod DD, jmenovitě Total-FETI a FETI Dual-Primal. V rámci práce bylo implementováno a kriticky zhodnoceno několik možností pro zlepšení konvergence těchto metod. V první řadě byl řešen vliv zavedení podmínek spojitosti a jejich škálování. Dále byla řešena otázka volby předpodmiňovače pro samotnou úlohu i pro projekci, která se standardně používá v metodách FETI. Následně bylo představeno několik variant původních formulací, které umožňují zlepšit robustnost a urychlit konvergenci. Nakonec byl představen nový heuristický postup jak vybírat body řešené jako primární v metodě FETI-DP, který byl navržen pro úlohy modulární topologické optimalizace.

Z výsledků lze vyvodit následující závěry pro využití těchto metod v úlohách modulární topologické optimalizace:

- Volba přirozeného hrubého prostoru v čistě duálních variantách FETI je určující nejen pro rychlost konvergence, ale i pro dosažitelnou přesnost. Varianta eukleidovsly kolmé projekce je v případě výskytu materiálových heterogenit prakticky nepoužitelná.
- Standardní podoby řešičů nejsou dostatečně robustní pro takto náročné úlohy.
- U čistě duálních metod je nezbytně nutné zavedení škálování splňující rovnice (4.26). V případě vazeb výhradně mezi dvěma doménami představuje tato podmínka v případě multiplicitního škálování pouze normování užitečné k relevantnějšímu odhadu měřené energetické chyby.
- Tuhostní škálování by mělo představovat jedinou volbu, pokud není užito lepší (např. *deluxe-scaling* [KRR14]). Nepatrně vyšší výpočetní náročnost je více než kompenzována ušetřenými iteracemi.
- Obě metody vykazovaly vesměs podobnou robustnost. Ani nejlepší volba předpodmínění a projekce nedocílila dostatečně přesného řešení. V pokročilejších fázích optimalizace poskytovala T-FETI v tomto případě ale obecně lepší řešení než její hybridní protějšek.
- Volba uzlů primárního charakteru ve FETI-DP může mít významný vliv na účinnost metody a levné, heuristicky stanovené svázání několika uzlů na primární úrovni může zajistit určující výhodu.

- Lze potvrdit, že se rychlost konvergence u FETI výrazně zhoršuje za přítomnosti heterogenity vyskytující se přes jednotlivé hranice. Jelikož provedené rozdělení domény na moduly představuje pouze nejhrubší možné dělení, možností by bylo dále moduly rozložit tak, aby hranice sledovaly rozložení materiálu. S ohledem na charakter TO by však toto opatření bylo relativně komplikované a vyžadovalo by adaptivní změnu dělení v rámci jednotlivých iterací topologické optimalizace. Navíc by pravděpodobně přineslo problémy spojené s nevhodným tvarem takto vzniklých oblastí.



Literatura

- [AALS17] Niels Aage, Erik Andreassen, Boyan S. Lazarov, and Ole Sigmund, *Giga-voxel computational morphogenesis for structural design*, Nature **550** (2017), no. 7674, 84–86 (en).
- [BS04] Martin P. Bendsøe and Ole Sigmund, *Topology Optimization*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004 (en).
- [Bub06] František Bubeník, *Matematika 2*, Nakladatelství ČVUT, České vysoké učení technické v Praze, Stavební fakulta, Praha, 2006 (Czech), OCLC: 85715684.
- [DHK06] Zdeněk Dostál, David Horák, and Radek Kučera, *Total FETI-an easier implementable variant of the FETI method for numerical solution of elliptic PDE*, Communications in Numerical Methods in Engineering **22** (2006), no. 12, 1155–1162 (en).
- [dO12] Oswaldo Rio Branco de Oliveira, *The Implicit and the Inverse Function theorems: easy proofs*, Publisher: arXiv Version Number: 1.
- [FCMR98] Charbel Farhat, Po-Shu Chen, Jan Mandel, and Francois Xavier Roux, *The two-level FETI method Part II: Extension to shell problems, parallel implementation and performance results*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **155** (1998), no. 1-2, 153–179 (en).
- [FLL⁺01] Charbel Farhat, Michel Lesoinne, Patrick LeTallec, Kendall Pierson, and Daniel Rixen, *FETI-DP: a dual-primal unified FETI method part I: A faster alternative to the two-level FETI method*, International Journal for Numerical Methods in Engineering **50** (2001), no. 7, 1523–1544 (en).
- [FM98] Charbel Farhat and Jan Mandel, *The two-level FETI method for static and dynamic plate problems Part I: An optimal iterative solver for biharmonic systems*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **155** (1998), no. 1-2, 129–151 (en).
- [FPL00] Charbel Farhat, Kendall Pierson, and Michel Lesoinne, *The second generation FETI methods and their application to the parallel solution of large-scale linear and geometrically non-linear structural analysis problems*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **184** (2000), no. 2-4, 333–374 (en).

- [FR91] Charbel Farhat and Francois-Xavier Roux, *A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm*, International Journal for Numerical Methods in Engineering **32** (1991), no. 6, 1205–1227 (en).
- [GR06] Pierre Gosselet and Christian Rey, *Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics*, Archives of Computational Methods in Engineering **13** (2006), no. 4, 515–572 (en).
- [GRR03] Pierre Gosselet, Christian Rey, and Daniel J Rixen, *On the initial estimate of interface forces in FETI methods*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **192** (2003), no. 25, 2749–2764 (en).
- [GRRS15] Pierre Gosselet, Daniel Rixen, François-Xavier Roux, and Nicole Spillane, *Simultaneous FETI and block FETI: Robust domain decomposition with multiple search directions: SIMULTANEOUS FETI AND BLOCK FETI*, International Journal for Numerical Methods in Engineering **104** (2015), no. 10, 905–927 (en).
- [HHL07] Sven Hammarling, Nicholas J. Higham, and Craig Lucas, *LAPACK-Style Codes for Pivoted Cholesky and QR Updating*, Applied Parallel Computing. State of the Art in Scientific Computing (Bo Kågström, Erik Elmroth, Jack Dongarra, and Jerzy Waśniewski, eds.), vol. 4699, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007, Series Title: Lecture Notes in Computer Science, pp. 137–146 (en).
- [KRR14] Axel Klawonn, Patrick Radtke, and Oliver Rheinbach, *FETI-DP with different scalings for adaptive coarse spaces: FETI-DP with different scalings for adaptive coarse spaces*, PAMM **14** (2014), no. 1, 835–836 (en).
- [KRR15] ———, *FETI-DP Methods with an Adaptive Coarse Space*, SIAM Journal on Numerical Analysis **53** (2015), no. 1, 297–320 (en).
- [Kru06] Jaroslav Kruis, *Domain decomposition methods for distributed computing*, Saxe-Coburg publications on computational engineering, Saxe-Coburg Publications, Stirling, Scotland, 2006, OCLC: ocn133042333.
- [KVM⁺13] Tomáš Kozubek, Vít Vondrák, Martin Menšík, David Horák, Zdeněk Dostál, V. Hapla, P. Kabelíková, and M. Čermák, *Total FETI domain decomposition method and its massively parallel implementation*, Advances in Engineering Software **60–61** (2013), 14–22 (en).
- [Man93] Jan Mandel, *Balancing domain decomposition*, Communications in Numerical Methods in Engineering **9** (1993), no. 3, 233–241 (en).
- [MAT21] MATLAB, *9.10.0.1710957 (R2021a) Update 4*, 2021.
- [MS07] Jan Mandel and Bedřich Sousedík, *Adaptive selection of face coarse degrees of freedom in the BDDC and the FETI-DP iterative substructuring methods*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **196** (2007), no. 8, 1389–1399 (en).
- [NW06] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright, *Numerical optimization*, 2nd ed ed., Springer series in operations research and financial engineering, Springer, New York, 2006 (eng).

- [Pec14] Clemens Pechstein, *On Iterative Substructuring Methods for Multiscale Problems*, Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XXI (Jocelyne Erhel, Martin J. Gander, Laurence Halpern, Géraldine Pichot, Taoufik Sassi, and Olof Widlund, eds.), vol. 98, Springer International Publishing, Cham, 2014, Series Title: Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pp. 85–98.
- [RF99] Daniel J. Rixen and Charbel Farhat, *A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering **44** (1999), no. 4, 489–516 (en).
- [SDH⁺13] Nicole Spillane, Victorita Dolean, Patrice Hauret, Frédéric Nataf, and Daniel J. Rixen, *Solving generalized eigenvalue problems on the interfaces to build a robust two-level FETI method*, Comptes Rendus Mathématique **351** (2013), no. 5-6, 197–201 (en).
- [Spi] Nicole Spillane, *Nicole Spillane - Robust Domain Decomposition Methods for Symmetric Positive Definite Problems (Ph.D. thesis)*.
- [SR13] N. Spillane and D.J. Rixen, *Automatic spectral coarse spaces for robust finite element tearing and interconnecting and balanced domain decomposition algorithms: AUTOMATIC SPECTRAL COARSE SPACES FOR ROBUST FETI AND BDD ALGORITHMS*, International Journal for Numerical Methods in Engineering **95** (2013), no. 11, 953–990 (en).
- [TDZK22] Marek Tyburec, Martin Doškář, Jan Zeman, and Martin Kružík, *Modular-topology optimization of structures and mechanisms with free material design and clustering*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **395** (2022), 114977 (en).
- [TW05] Andrea Toselli and Olof B. Widlund, *Domain Decomposition Methods — Algorithms and Theory*, Springer Series in Computational Mathematics, vol. 34, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005 (en).
- [TZD⁺21] Marek Tyburec, Jan Zeman, Martin Doškář, Martin Kružík, and Matěj Lepš, *Modular-topology optimization with Wang tilings: an application to truss structures*, Structural and Multidisciplinary Optimization **63** (2021), no. 3, 1099–1117 (en).
- [Wan61] Hao Wang, *Proving Theorems by Pattern Recognition - II*, Bell System Technical Journal **40** (1961), no. 1, 1–41 (en).

Příloha A

Appendix

A.1 Ortogonální projekční matice

Uvažujme matici $G \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $n > m$, plné sloupkové hodnoty, jejíž sloupce tvoří m -dimenzionální bázi prostoru $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^n$. Dále uvažujme symetrickou pozitivně definitní matici A řádu n a libovolný sloupkový vektor $v \in \mathbb{R}^n$. Naším cílem je rozložit vektor v do dvou složek — $v_G \in \mathcal{G}$ a $v_{G^\perp} \in \mathcal{G}^\perp$ — tak, aby tyto vektory byly zároveň vzájemně A -ortogonální.

Musí tedy platit

$$v_G \perp_A v_{G^\perp}, \quad v = v_G + v_{G^\perp}, \quad (\text{A.1})$$

$$\mathcal{G} \cap \mathcal{G}^\perp = \{0\}, \quad \mathcal{G} \oplus \mathcal{G}^\perp = \mathbb{R}^n, \quad (\text{A.2})$$

neboli

$$\langle v_G, v_{G^\perp} \rangle_A = 0, \quad (\text{A.3})$$

kde $\langle v_G, v_{G^\perp} \rangle_A := \langle Av_G, v_{G^\perp} \rangle$ označuje vážený skalární součin.

První vztah v (A.2) implikuje

$$g_i^T A v_{G^\perp} = 0, \quad \forall 1 \leq i \leq m, \quad (\text{A.4})$$

kde g_i označuje i -tý sloupec G .

Jelikož v_G hledáme na $\mathcal{G}$, zjevně existuje $\hat{\zeta} \in \mathbb{R}^m$: $v_G = G\hat{\zeta}$, tedy v_G lze stanovit jako lineární kombinaci sloupců G .

Vyjádřením $v_{G^\perp} = v - v_G$ a využitím vztahu (A.4) lze zapsat podmínku A -ortogonality též jako

$$G^T A v_{G^\perp} = G^T A (v - v_G) = 0 \quad (\text{A.5})$$

$$G^T A v = G^T A G \hat{\zeta} \quad (\text{A.6})$$

$$\hat{\zeta} = [G^T A G]^{-1} G^T A v \quad (\text{A.7})$$

a tedy $v_G = G\hat{\zeta} = G \overbrace{[G^T A G]^{-1} G^T A}^{\text{Projektor } Q_G} v = Q_G v$.

Je-li Q_G A -ortogonální projekční matice na prostor $\mathcal{G}$, platí, že $P_G = I - Q_G$ je také maticí projekce, a sice do komplementárního doplňku $\mathcal{G}^\perp$.

Analogicky lze ověřit, že $P_G^\top$ a $Q_G^\top$ jsou A^{-1} –ortogonálními maticemi projekce na $\text{Ker}(G^\top)$ a jeho komplementární doplněk.

Pro snadnější orientaci jsou výše zmíněné poznatky shrnuty v následující tabulce

Projektor	Podoba	Obraz	Prostor	Kolmost
Q_G	$G \left[G^\top A G \right]^{-1} G^\top A$	$\mathcal{C}(G)$	$\mathcal{G}$	A
P_G	$I - G \left[G^\top A G \right]^{-1} G^\top A$	$\mathcal{N}(G^\top A)$	$\mathcal{G}^{\perp_A}$	A
$Q_G^\top$	$A G \left[G^\top A G \right]^{-1} G^\top$	$\mathcal{C}(A G)$	$(\mathcal{G}^\perp)^{\perp_{A^{-1}}}$	A^{-1}
$P_G^\top$	$I - A G \left[G^\top A G \right]^{-1} G^\top$	$\mathcal{N}(G^\top)$	$\mathcal{G}^\perp$	A^{-1}

a platí tyto rovnosti

$$\begin{aligned}
 G^\top P^\top &= 0, & P^\top A G &= 0, \\
 P G &= 0, & G^\top A P &= 0.
 \end{aligned} \tag{A.8}$$