

SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL

EDITADO POR

Aristeu da Silveira Neto

UFU - Faculdade de Engenharia Mecânica

Francisco A. Romero Gesualdo

UFU - Faculdade de Engenharia Civil

Sezimária de Fátima Pereira Saramago

UFU - Faculdade de Matemática e Física

Valder Steffen Jr

UFU - Faculdade de Engenharia Mecânica

Editora da Universidade Federal de Uberlândia

Uberlândia – MG - Brasil

SIMPÓSIO MINEIRO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL

EDITADO POR

Aristeu da Silveira Neto

UFU - Faculdade de Engenharia Mecânica

Francisco A. Romero Gesualdo

UFU - Faculdade de Engenharia Civil

Sezimária de Fátima Pereira Saramago

UFU - Faculdade de Matemática e Física

Valder Steffen Jr

UFU - Faculdade de Engenharia Mecânica

Editora da Universidade Federal de Uberlândia

Uberlândia – MG - Brasil

UMA ADAPTAÇÃO DO PRÉ-CONDICIONADOR ADVINDO DA DECOMPOSIÇÃO INCOMPLETA DE CHOLESKY APLICADO A PROBLEMAS DO MEF EM MULTICOMPUTADORES

Valério S. Almeida[#], João Batista de Paiva[#]
[#]Escola de Engenharia de São Carlos - USP
Departamento de Engenharia de Estruturas
13560-250 – São Carlos SP
e-mail: valerio@sc.usp.br, paiva@sc.usp.br

RESUMO

A cada dia o uso computação paralela tem-se mostrado como uma adequada ferramenta computacional para a resolução de problemas estruturais. Em virtude das características de arquitetura deste tipo de máquina, muitos procedimentos numéricos já consagrados pelos métodos convencionais se tornaram pontos de estudo frente a este novo paradigma computacional. Neste âmbito, convém ressaltar que o ponto de maior “gargalo” para a otimização do método dos elementos finitos é na resolução do sistema linear.

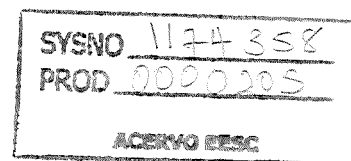
Assim, nos últimos tempos os métodos iterativos vem-se se destacando como uma boa opção em comparação aos métodos diretos. Então, apresenta-se neste trabalho um método iterativo que tem sido utilizado para a resolução de sistemas lineares em paralelo: *o método dos gradientes conjugados (MGC)*. Para melhorar o desempenho desta técnica é comum o emprego de otimizadores chamados de pré-condicionadores. Neste trabalho foi aperfeiçoado um pré-condicionador conhecido como Decomposição Incompleta de Cholesky. Desta maneira, mostra-se exemplos - analisados pelo MEF - de placa e de treliça espacial, respectivamente em computação sequencial e paralela comparando-os com os obtidos pelo emprego da técnica de pré-condicionamento convencional.

1. INTRODUÇÃO

A crescente aplicação dos métodos numéricos discretos para análise de estruturas no campo da engenharia tem sido feita já há algumas décadas. As modelagens até então feita experimentalmente tem sido, a cada dia, substituídas por modelos numéricos teorizados e calibrados adequadamente.

Esse uso volumoso dos métodos numéricos, destacando o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método dos Elementos de Contorno (MEC), tem-se dado, principalmente, pelo impacto tecnológico dos computadores junto com a facilidade – em geral - que tais métodos apresentam para a sua sistematização em códigos computacionais.

Por outro lado, com a sofisticação dos modelos estruturais e com a preocupação de se considerar todos os elementos estruturais pertencentes ao fenômeno em análise, estes efeitos, em conjunto ou mesmo independentemente, tem exigido uma taxa de crescimento dos equipamentos computacionais ilimitado, quer em velocidade, quer em capacidade de



armazenamento de dados. Assim, tem surgido a idéia de se acoplar fisicamente sistemas computacionais, formando assim a computação paralela.

A computação paralela tem trazido ao campo da mecânica computacional a possibilidade de se resolver problemas que eram impossíveis de serem tratados. Cita-se JIANG *et al.* (1997) que analisou um extrusor em elementos finitos que necessitava de 8 Gigabytes de memória. Entretanto, os procedimentos numéricos empregados tanto no MEF quanto no MEC, ver ALMEIDA (1999), tiveram que ser readaptados para que pudessem ser melhor explorados para este novo tipo de arquitetura computacional.

Dentre estes novos procedimentos que devem ser reavaliados sob a concepção do processamento paralelo, o que tem maior peso para a busca de melhor performance é a escolha do método de resolução do sistema linear. Apresenta-se, então, neste trabalho um método que tem se destacado para a resolução do sistema em paralelo: o método dos gradientes conjugados (MGC). Entretanto, tal método é instável em relação ao número de condição da matriz do sistema. Para diminuir este empecilho, é comum o emprego de pré-condicionadores que transformam o sistema em análise em um outro melhor condicionado.

Na literatura existem centenas de pré-condicionadores que podem ser empregados, citando-se o advindo da série truncada de Neumann, a fatorização elemento por elemento, pré-condicionador de Dirichlet, o pré-condicionador da diagonal e as diversas variantes da decomposição incompleta de Cholesky, dentre outros. Entretanto um pré-condicionador que tem mostrado destaque para a análise em processamento paralelo pela sua facilidade em paralelização e pela sua ótima taxa de convergência é a decomposição incompleta de Cholesky. Desta forma apresenta-se a seguir o MGC com a utilização da técnica de pré-condicionamento citada junto com uma adaptação realizada sobre ela que tem trazido melhores resultados frente a técnica incompleta convencional.

2. PRÉ-CONDICIONAMENTO DO MGC

A técnica de pré-condicionamento consiste em transformar a matriz $[K]$ do sistema

$$[K] \cdot \{U\} = \{F\} \quad (1)$$

em uma matriz $[\tilde{K}]$ que seja a mais próxima da matriz identidade $[I]$ e, desta forma, bem condicionada. Ou seja, do sistema inicial dado pela equação (1), pré-multiplica-se pela inversa da matriz pré-condicionadora:

$$([M]^{-1} \cdot [K]) \cdot \{U\} = [M]^{-1} \cdot \{F\} \quad (2)$$

de modo que quanto mais $[M]^{-1}$ se aproxime de $[K]^{-1}$, tem-se a relação

$$\kappa(\tilde{K}) \ll \kappa(K) \text{ e } \kappa(\tilde{K}) \rightarrow 1 \quad (3)$$

fica-se, então, no limite, quando $[M]^{-1} = [K]^{-1}$, a convergência do método se torna direta e a iteração (*ite*) é imediata, ou seja, na representação em forma de limite:

$$\lim_{M^{-1} \rightarrow K^{-1}} \kappa(\tilde{K}) = 1 \quad \text{ou} \quad \lim_{M^{-1} \rightarrow K^{-1}} \text{ite} = 1 \quad (4)$$

esquemáticamente, resume-se a equação (4) na figura (1).

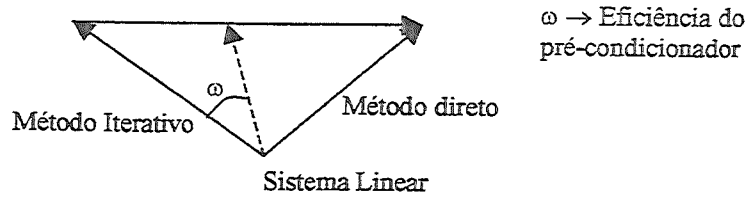


FIGURA 1 –Eficiência do pré-condicionamento sobre o sistema

Mas para se obter a matriz inversa exata de $[K]$ tem-se um esforço computacional muito maior que o necessário para se resolver o sistema sem o uso de pré-condicionador. Assim, a estratégia numérica buscada no estudo destes pré-condicionadores é a obtenção de uma matriz especial que seja a mais próxima possível da inversa de $[K]$, contudo, com um reduzido esforço computacional para a sua montagem e a garantia da eficácia para a convergência do sistema equivalente.

A adaptação do pseudoalgoritmo do MGC puro, considerando-se o efeito do pré-condicionamento, pode ser feita de modo que, ao invés de se aplicar o pré-condicionador diretamente na matriz de rigidez, realiza-se a contribuição da matriz pré-condicionadora ao vetor resíduo $\{r_p\}$, ou seja:

$$\{\tilde{r}_p\} = [M]^{-1} \cdot \{F\} - [M]^{-1} \cdot [K] \cdot \{U\} \quad (5)$$

Este procedimento é também conhecido na literatura como método implícito dos gradientes conjugados. Assim, a figura (2) apresenta o pseudoalgoritmo implícito para a implementação com um pré-condicionador genérico.

3. DECOMPOSIÇÃO INCOMPLETA DE CHOLESKY

O método da decomposição incompleta de Cholesky parte da idéia de se obter a matriz pré-condicionadora pela fatorização de $[K]$ em uma decomposição de Cholesky, ou seja, fatorando a matriz $[K]$ sob a forma:

$$[K] = [L] \cdot [L^T] \quad (6)$$

$\rightarrow r_0 = F - K U_0$
 \rightarrow montar $[M]^{-1} \rightarrow z_0 = [M]^{-1} \cdot r_0$
 $\rightarrow p_0 = z_0 / j = 0$
 \rightarrow Enquanto (algum critério de parada)

$\rightarrow \alpha_j = \frac{r_j^T \cdot z_j}{p_j^T \cdot K \cdot p_j}$

$\rightarrow U_{j+1} = U_j + \alpha_j p_j$
 $\rightarrow r_{j+1} = r_j - \alpha_j K p_j$
 $\rightarrow z_{j+1} = [M]^{-1} \cdot r_{j+1}$

$\rightarrow \beta_j = \frac{r_{j+1}^T \cdot z_{j+1}}{r_j^T \cdot z_j}$

$\rightarrow p_{j+1} = z_{j+1} + \beta_{j+1} p_j$
 $\rightarrow j = j + 1$
 \rightarrow Fim Enquanto

FIGURA 2 – pseudoalgoritmo do método GC com pré-condicionador

Porém, fatorar a matriz $[K]$ em $[L]$ faz com que esta matriz triangular não seja tão esparsa quanto a matriz $[K]$. Desta forma, perante este “gargalo”, o método da decomposição *incompleta* se baseia em se fazer uma fatorização de $[L]$, de maneira que *alguns elementos são negligenciados* nas matrizes $[L]$ em *posições apropriadas*. Por isso, o método é denominado de *decomposição incompleta de Cholesky*.

Nesta matriz triangular, os valores negligenciados podem ocorrer em lugares arbitrários¹ (mas fora da diagonal principal) e as posições (i,j) não nulas serão indicadas por um conjunto P que é descrito a seguir:

$$P \subset P_N \equiv \{ (i, j) \mid i \neq j, 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq n \} \quad (7)$$

onde P_N contém todos os pares de índices de entradas da matriz.

Desta forma, pode-se escolher um campo de preenchimento das matrizes $[L]$, indicado por P , onde o par (i,j) indicará as posições de todos os valores diferentes de zero.

3.1. Variações dos espectros sobre L

Para o presente trabalho, desenvolveu-se um algoritmo em que o espectro de influência sobre as posições não nulas na matriz $[L]$ são variáveis de entrada do problema. Pode ser escolhido o comprimento de influência das diagonais a partir da diagonal principal, como também a partir da última diagonal não nula, conforme figura (3). Esta generalização da técnica foi realizada com o intuito de melhorar a aproximação da inversa de $[K]$, ampliando o espectro sobre os graus de liberdade que tenham influencia secundária – mas significativa - sobre as diagonais principais.

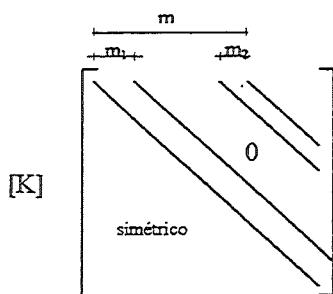


FIGURA 3 – Espectro de influência de m_1 e m_2 sobre $[K]$

Como os valores de m_1 e m_2 podem não ser iguais, neste trabalho não poderia ser utilizado a abreviatura apresentada em MEIJERINK & van der VORST (1977). Por isso, criou-se uma referência específica para a abreviação do método para se incluir os parâmetros m_1 e m_2 . Como exemplo, considere um campo de P tal que $m_1 = 4$ e $m_2 = 3$. Assim, o conjunto P será denominado de $P_{m_1}^{m_2}$ e será dado por:

$$P_4^3 \equiv \{ (i, j) \mid |i - j| \neq 0, 1, 2, 3, m-3, m-2, m-1 \} \quad (8)$$

¹ Não tão arbitrários assim, pois dependendo da escolha destas posições, a matriz incompleta $[L]$ pode não ser positiva-definida.

A notação para a utilização do MGC com este pré-condicionador com influência genérica, será indicada por ICCG(m_1, m_2) e, para este último exemplo, tem-se ICCG(4,3).

3.2. Paralelização do método

Para a paralelização do MGC pré-condicionado utilizou-se o paradigma conhecido como computação cheia (*crowd computing*) que é uma coleção de processadores interrelacionados e que tipicamente executam o mesmo código, geralmente envolvendo a constante troca de resultados intermediários, quer escalares, vetores ou matrizes, sendo que o modelo utilizado foi o de mestre-escravo.

Desta forma, os códigos advindos do MEF foram paralelizados a partir da montagem da matriz de rigidez sendo que foi dividido os graus de liberdade entre os diversos processadores e a técnica empregada para esta divisão sem a geração de conflitos foi a proposta por REZENDE (1995).

4. EXEMPLOS NUMÉRICOS

4.1. Placa quadrada simplesmente apoiada

Para mostrar a eficácia da adaptação realizada sobre a técnica convencional, é apresentado neste item o exemplo de um modelo de placa em que se comparam os pré-condicionadores usuais (ICCG(3,0) e ICCG(3,3)) com os generalizados neste trabalho em *processamento seqüencial*, assim, a figura 5 retrata as diferenças entre os tempos. As características geométricas do material e o tipo de carregamento é apresentado a seguir. Também tem-se os resultados para o sistema sem o uso de pré-condicionadores, considerando a matriz identidade como pré-condicionador.

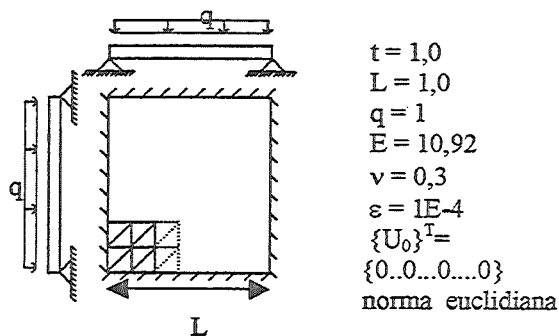


FIGURA 4 – Esquema da placa, sua orientação e parâmetros de geometria e do material

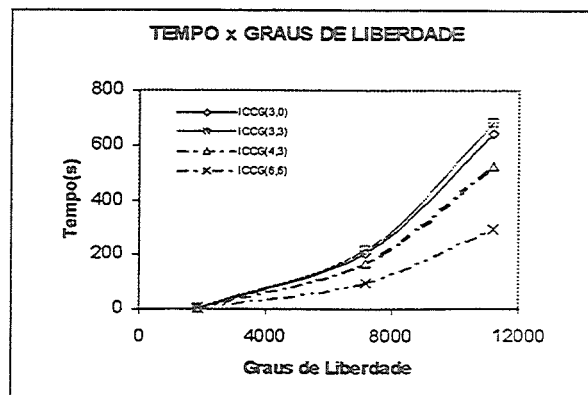


FIGURA 5 – Curva (Tempo x Graus de Liberdade) para a placa

4.2. Treliça Tridimensional

Apresenta-se a seguir o exemplo de uma treliça tridimensional, ver figura 6, submetida a uma força concentrada no nó central do banzo superior. Os resultados são obtidos na máquina do CISC localizado no campus da USP em São Carlos, sendo um computador com arquitetura paralela do tipo IBM 9900/SP com 3 processadores com 256 Mbytes por nó, ver TUTORIAL do IBM (1998) e TUTORIAIS do CISC (1998).

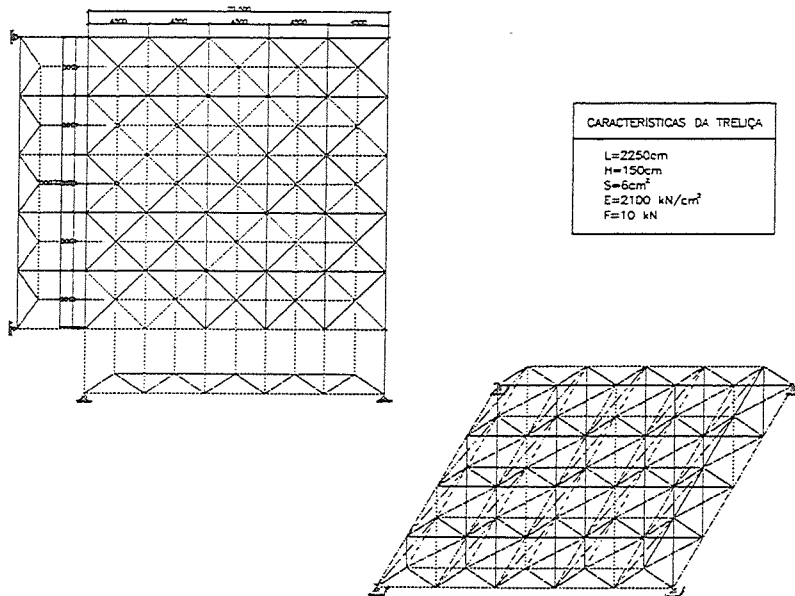


FIGURA 6- Planta e perspectiva do modelo de treliça

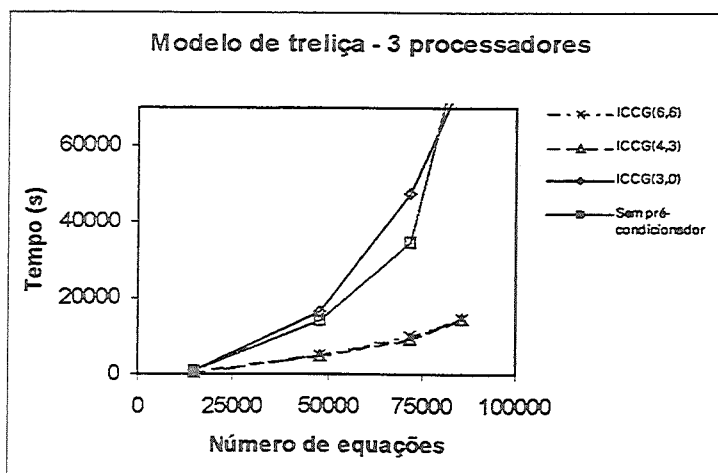


FIGURA 7 – Convergência em termos de tempo da rede com 95048 elementos - 71943 equações

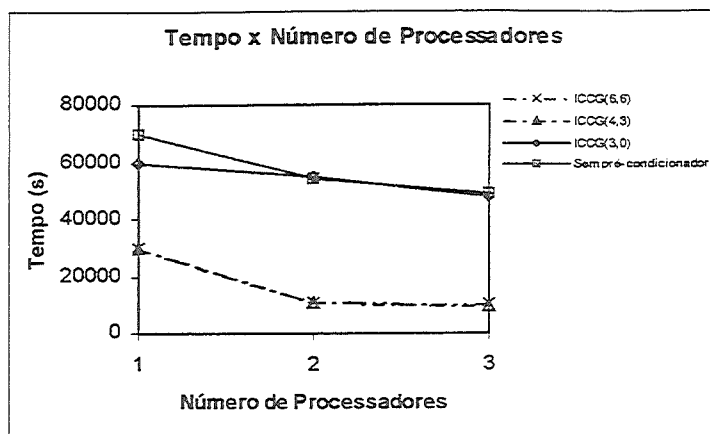


FIGURA 8 - Curva (Tempo x Graus de Liberdade) para a treliça

5. CONCLUSÕES

O presente trabalho teve o intuito de apresentar uma adaptação do pré-condicionador advindo da decomposição incompleta de Cholesky aplicado aos problemas advindos do MEF. Esta alteração incorpora a generalização de influência das colunas da matriz do sistema que não são negligenciadas na montagem da matriz triangular L. Isto, de modo geral, aprimora a convergência do pré-condicionador na resolução do sistema, pois leva a obtenção de um número de condição do sistema mais próximo do valor unitário.

Então para o caso do modelo de placa, a técnica incompleta de Cholesky pré-condicionada considerando apenas as 6 primeiras e últimas colunas (ICCG(6,6)) obtêm-se uma melhoria de tempo de aproximadamente 55% em relação ao tempo obtido pela técnica convencional que utiliza um espectro de influencia menor: ICCG(3,0) ou ICCG(3,3).

Para o caso do exemplo da treliça em paralelo, tal pré-condicionador também mostrou ser bem mais adequado levando a um ganho de 80% em tempo comparando-se o ICCG(3,0) com o ICCG(6,6). E isto corrobora a utilização desta nova técnica aqui apresentada, principalmente para ambiente paralelo, pois em função da necessidade de se ter que triangularizar uma matriz com mais colunas, isto causa uma maior ociosidade dos processadores. Mas em virtude da melhoria do condicionamento que tal técnica adaptada traz em comparação a já tradicional, a taxa de convergência conseguida supera o tempo perdido pela maior ociosidade desta nova técnica apresentada.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CIMERMAN, Marcia. (1996). *Resolução de Sistemas Lineares Via Métodos Iterativos com Pré-Condicionadores – Aplicação em Problemas de Engenharia de estruturas*. São Paulo. 111p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- CUNHA, Rudnei D.; HOPKINS, Tim (1998). *PIM 1.1: The Parallel Iterative Methods package for Systems of Linear Equations User's Guide (Fortran 77 version)*. Computing Laboratory, University of Kent at Canterbury, United Kingdom.
- DUBOIS, P. F., GREENBAUM, A., RODRIGUE, G. H. (1977). Approximating the Inverse of a Matrix for Use in Iterative Algorithms on Vector Processors. *Computing*, v.22, p. 257-268.

- JIANG, Y. et al. (1997). *Parallel Computation of Polymer Melt Flow through an extruder*. Polyflow, s.a., Place de l'Université 16, B-1348 Louvain-la-Neuve, Belgium.
- MANTEUFFEL, T. A. (1980). An incomplete factorization MELJERINK, J. A. ; VORST, H. A van der (1977). An iterative solution method for linear systems of wich the coefficient matrix is a symmetric M-matrix. *Mat. Comp.*, v.31 (137), p.148-162.
- MELJERINK, J. A. ; VORST, H. A van der (1977). *An iterative solution method for linear systems of wich the coefficient matrixis a symmetric M-matrix*. *Mat. Comp.*, v.31 (137), p.148-162.
- REZENDE, Marcelo Novaes (1995). *Processamento paralelo em análise estrutural*. São Carlos. 112p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.
- SCHMIT, L. A. Jr. ; LAI, Y. C. (1994). *Structural optimization based on preconditioned conjugate gradient analysis methods*. *International Journal for numerical methods in engineering*, v. 37, p. 943-964.
- TOPPING, B. H. V. , KHAN, A I. (1996). *Parallel Finite Element Computations*. 1^a ed., Saxe-Coburg Publications, Edinburgh.
- TUTORIAL do IBM SP. <http://www.cisc.sc.usp.br/servicos/sp2.html> (30 Julho/1998).
- TUTORIAIS do CISC (1998). <http://www.cisc.sc.usp.br/tutoriais/> (1 Agosto)
- ALMEIDA, Valério S. (1999). *Uma adaptação do MEF para análise em multicomputadores: aplicações em alguns modelos estruturais*, São Carlos. 126p. Dissertação (Mestrado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.