

MATSOL LIBRARY FOR SOLUTION OF CONTACT PROBLEMS

A. Markopoulos*, T. Brzobohatý*, T. Kozubek*, V. Vondrák*, P. Ferfecki*

Summary: *This paper deals with MatSol, the new library based on Parallel Matlab environment. This software is developed at the VSB-Technical University of Ostrava and nowadays it is possible to solve both coercive and semi-coercive contact problems using domain decomposition techniques such as FETI and BETI methods.*

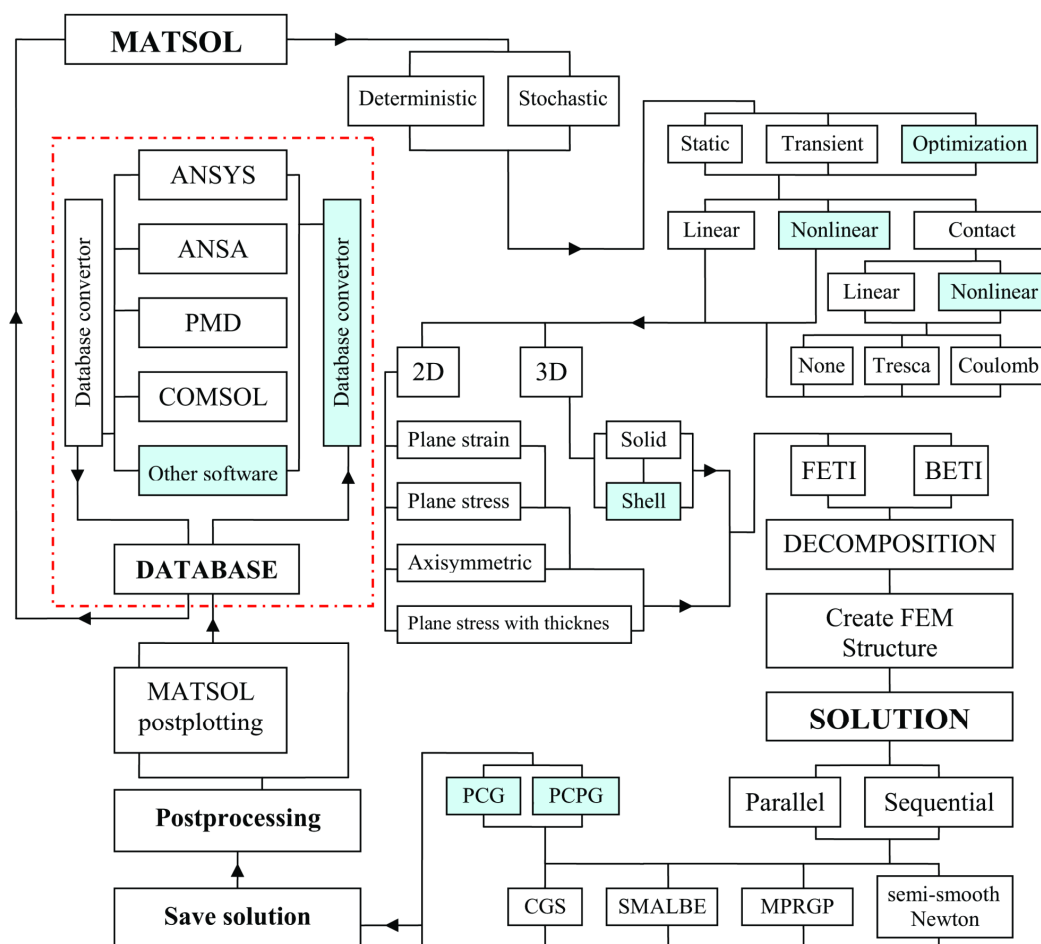
1. Úvod

Během posledních několika let se tým katedry aplikované matematiky VŠB-TU Ostrava zabývá vývojem škálovatelných algoritmů pro kontaktní úlohy a tvarovou optimalizaci. Algoritmy jsou založeny na FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting) metodě, původně navržené Farhatem a Rouxem [1], a pro lineární úlohy byla prokázána její paralelní a numerická škálovatelnost [2]. Tyto algoritmy byly rozšířeny i na kontaktní úlohy [4] a byly implementovány do knihovny OOSol (ObjecOrientedSOLver) [6]. Tato knihovna založená na objektově orientované technologii jazyka C++ těží ze své modularity a možnosti dalšího rozšiřování. Bohužel není vybavena běžnými pomocnými algoritmy, jejichž absence při vývoji ztěžuje situaci. Proto vývojový tým začal s přepisováním knihovny do prostředí programu Matlab s názvem MatSol (MATlab SOLver) [5]. Před několika lety společnost Mathwork představila Matlab Distributed Computing Engine, díky němuž je možné implementovat části kódů i v paralelním prostředí. MatSol tím převzal veškeré paralelní výhody knihovny OOSol a navíc prostředí programu Matlab dává k dispozici širokou škálu pomocných funkcí, které hrají ve vývoji knihovny nezanedbatelnou roli. V naší práci je poukázáno na schopnost knihovny MatSol řešit reálné kontaktní úlohy mechaniky s milióny stupňů volnosti se splněním předpokladů paralelní a numerické škálovatelnosti metody Total FETI, která byla prvně představena Dostálem a kol. v [3]. Propojením s programy ANSYS, či COMSOL [9, 10], získává knihovna MatSol možnost řešení reálných úloh inženýrské praxe. Knihovna je však otevřena i pro další komerční programy.

2. Struktura knihovny MatSol

Struktura knihovny byla navržena tak, aby svou logikou odpovídala standardnímu postupu při řešení úloh popisovanými soustavami variačních rovnic a nerovnic, tak jak je používají jiné komerční i nekomerční výpočetní balíky. Aktuální podoba průběhu výpočetního procesu je zachycena na struktuře v obr. 1.

*Ing. Alexandros Markopoulos, Ing. Tomáš Brzobohatý, Doc. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D, Doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D, Ing. Petr Ferfecki, Ph.D.: VŠB-TU Ostrava, 17. listopadu 15; 708 33 Ostrava-Poruba; tel.: +420 597 325 752; fax: +420 597 321 287; e-mail: alexandros.markopoulos.fs@vsb.cz



Obrázek 1. Struktura knihovny MatSol.

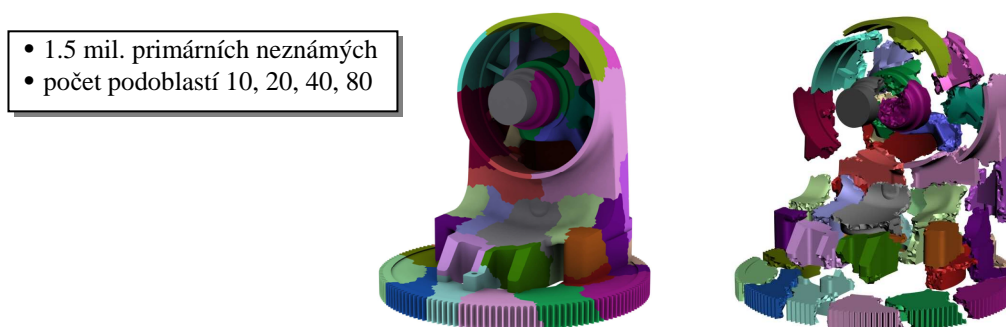
Výpočetní proces začíná načtením modelu, který je buď v databázi, nebo je získán z některých z komerčních programů jako ANSA, ANSYS, COMSOL, PMD [8, 9, 10, 11]. Výčet možností není nijak limitován. Pro jakýkoliv další software je pouze nutné sepsat potřebný konvertor, který upraví informace o modelu do požadovaného tvaru. Proces dále pokračuje k výběru deterministického či stochastického chování některých ze vstupních parametrů. Dále se vybírá z možností statické analýzy, transientní analýzy nebo úlohy optimálního návrhu. Následuje výběr z možností: lineární, nelineární pružnost, či kontaktní problém. Další chod programu se odvíjí od dimenze úlohy. Pro rovinné úlohy je na výběr rovinná deformace, rovinná napjatost a axisymetrie. K sestavení numerického modelu lze použít konečné nebo hraniční prvky, které lze upravit pro paralelní výpočet. V rámci preprocessingu se vytvoří tzv. fem struktura, která obsahuje všechna podstatná data pro výpočet. V případě použití algoritmů založených na doménové dekompozici se vytvoří i tzv. struktura pfem, která má maticovou strukturu a obsahuje informace o jednotlivých podoblastech. Samotný výpočet je možné provést sekvenčně, pokud je to z hlediska rozsáhlosti úlohy možné, nebo paralelně. K dispozici je řada řešičů (sdružené gradienty, SMALBE, MPRGP, semihladká Newtonova metoda, atd). Knihovna MatSol disponuje i vlastním nástrojem pro postprocessing. Popisovaná struktura MatSol je nástrojem k řešení i takových úloh, které jsou pro běžné komerční balíky neprůchozí. Jedná se o úlohy semikoercivní, tzn. staticky neurčitě úlohy kdy tělesa v úloze mají volné některé z tuhých pohybů.

3. Ukázka řešených problémů

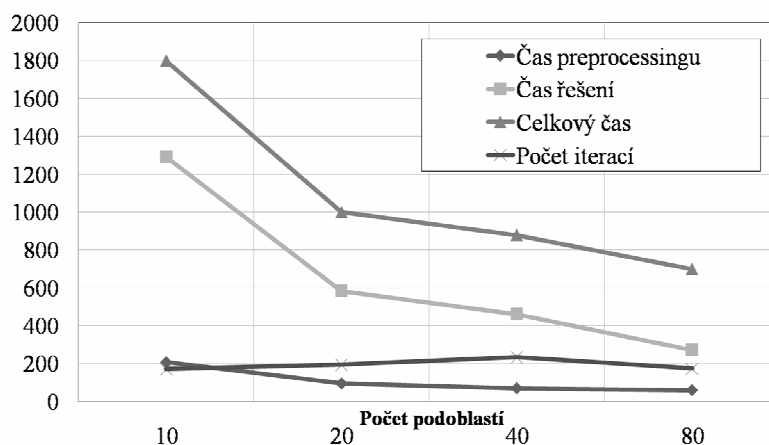
V současné době je spočtena řada úloh, u kterých bylo nezbytné použít doménovou dekompozici. Pro tyto účely máme k dispozici výpočetní klastř HP BLc7000 s devíti uzly. Každý uzel je vybaven dvoujádrovým procesorem AMD Opteron a 8GB RAM a propojen s infiniband network. Na tomto klastřu je nainstalováno 24 licencí Matlab distributed computing engine pro paralelní výpočty.

a) Část otočného zařízení vysokozdvížného vozíku

Jako první je vybrána úloha lineární pružnosti ve 3D. Jedná se o část otočného zařízení vysokozdvížného vozíku. Konečnoprvkový model sestával z 0,5 mil. uzlů a 1,5 mil. stupňů volnosti. Model byl rozdělen na 10, 20, 40 a 80 podoblastí. Pohled na geometrii před a po dekompozici je na obr. 2. Vybrané parametry jsou k nahlédnutí na obr. 3. Počet iterací se se vzrůstajícím počtem domén příliš neliší, což potvrzuje numerickou škálovatelnost. Paralelní škálovatelnost je naznačena celkovým časem. Snížení času mezi deseti a dvaceti podoblastmi je téměř o polovinu původního což je ideální případ paralelní škálovatelnosti. Následná změna charakteru křivky je způsobena omezeným počtem použitých procesorů, který je závislý na počtu licencí. Nicméně i přesto má křivka nadále sestupný charakter.



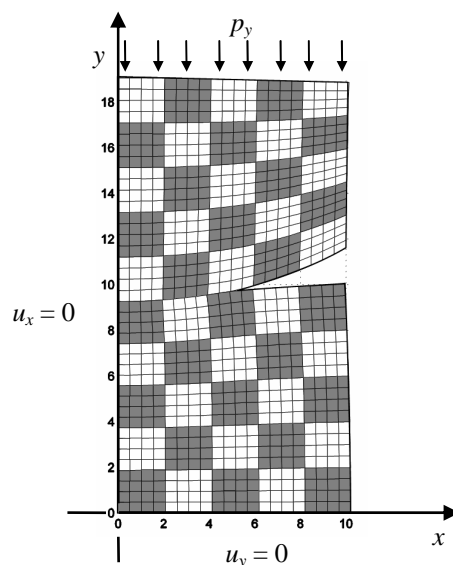
Obrázek 2. Úloha lineární pružnosti, těleso před a po dekompozici.



Obrázek 3. Vývoj vybraných parametrů s rostoucím počtem podoblastí.

b) Hertzova úloha ve 2D

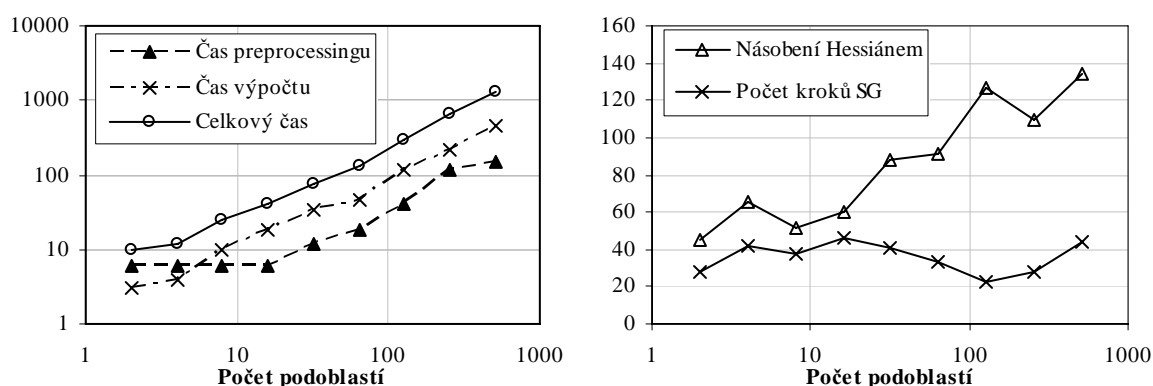
Další testovací úlohou, byl případ Hertzovy kontaktní úlohy v rovinné pružnosti. Uzlům, jež mají souřadnici x rovnu 0, jsou odebrány posuvy ve směru osy x , uzlům s $y = 0$ naopak posuvy ve směru osy y . Z původní úlohy se řeší polovina (osa y je osou symetrie). Přímou na deformované geometrii jsou naznačeny podoblasti. Horní těleso, zatížené tlakem p_y , má volný tuhý pohyb ve směru osy y . Úloha je tedy semikoercivní. První varianta předpokládá vrchní a spodní těleso jako samostatné podoblasti (každá s 10000 uzlů). Následně se obě tělesa rozdělí na 4 podoblasti (podoblasti si zachovávají počet uzlů). Podrobné shrnutí výkonnosti algoritmu pro řešení této úlohy je k dispozici v tab. 1.



Obrázek 4. Hertzova úloha, rovinná pružnost.

Tabulka 1. Hertzova úloha, rovinná pružnost.

Počet podoblastí	2	4	8	16	32	64	128	256	512
Primární proměnné	$40 \cdot 10^3$	$80 \cdot 10^3$	$160 \cdot 10^3$	$320 \cdot 10^3$	$640 \cdot 10^3$	$1.28 \cdot 10^6$	$2.56 \cdot 10^6$	$5.1 \cdot 10^6$	$10.2 \cdot 10^6$
Duální proměnné	600	1200	2400	5200	11200	23200	48000	97600	198400
Násobení Hessiánem	45	65	52	60	88	91	127	109	134
Počet kroků SG	28	42	38	46	41	33	23	28	44
Čas preprocessingu (s)	6	6	6	6	12	18	40	119	149
Čas výpočtu (s)	3	4	10	18	34	45	117	223	458
Celkový čas (s)	10	12	25	40	78	130	290	660	1300



Obrázek 5. Vývoj vybraných parametrů s rostoucím počtem podoblastí.

Na obr. 5 jsou odděleně vykresleny časy a počty iterací, oba grafy v závislosti na počtu podoblastí.

c) Kuličkové ložisko

Výpočetně náročnější úkol byl případ kuličkového ložiska. V prvním přiblížení se úloha počítala bez tření, což podmínilo numerickou nestabilitu, která byla způsobena volnými rotacemi kuliček. K odebrání tuhých pohybů se použil postup, kdy podmínkou $B_R \cdot u = 0$ jsou odebrány všechny rotace okolo vybraného bodu (zde geometrický střed kuličky).

$$\sum_{n_{TK}} -(y_i - y_T) + (x_i - x_T) = 0 \quad (1)$$

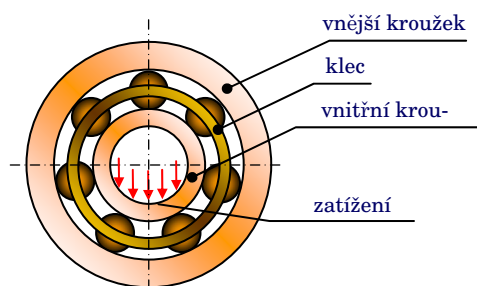
$$\sum_{n_{TK}} -(z_i - z_T) + (x_i - x_T) = 0 \quad (2)$$

$$\sum_{n_{TK}} -(z_i - z_T) + (y_i - y_T) = 0 \quad (3)$$

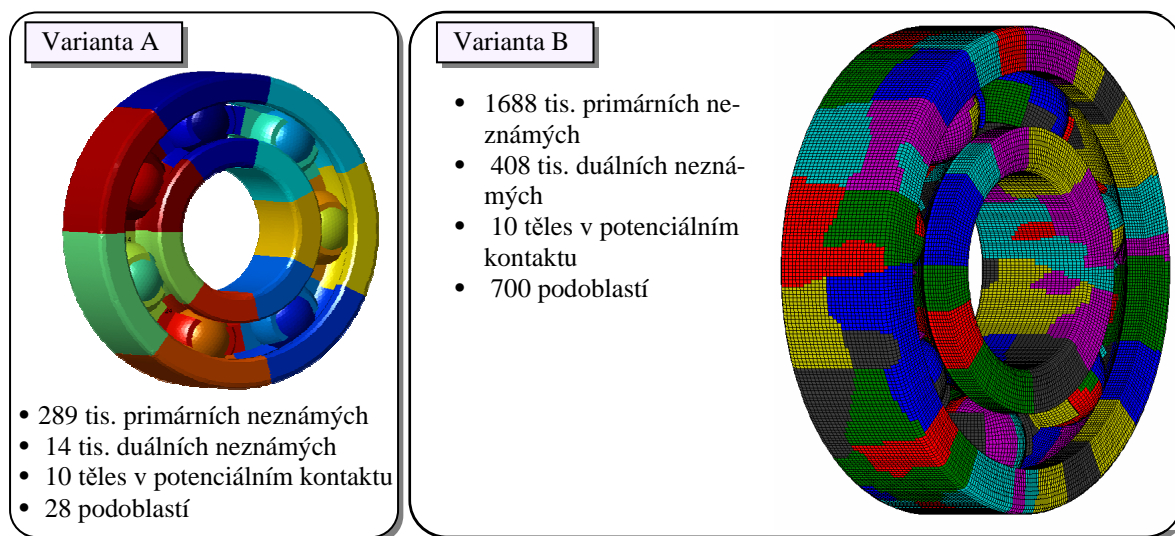
Podmínku $B_R \cdot u = 0$ lze rozepsat pro vybrané těleso dle (1) až (3), kde n_{TK} je počet uzlů tělesa, x_i, y_i, z_i jejich souřadnice a x_T, y_T, z_T souřadnice těžiště. V každé z rovnic se objevují vždy jen souřadnice jedné z rovin, ve které se odebrá rotace. Obdobně lze odebrat i volné tuhé posuvy.

Na obr. 6 jsou zakresleny popisné údaje. Ložisku na vnějším kroužku vnějšího průměru se odebraly posuvy ve všech směrech. Tato část je jako jediná uchycena v prostoru. Kuličky mají volné tuhé posuvy, nikoliv rotace. Klec je držena přes kontaktní podmínky a vnitřní kroužek má zamezen posuv ve směru osy ložiska a rotaci kolem ní. Na vnitřním průměru vnitřního kroužku je tlakové zatížení.

Na obr. 7 jsou zobrazeny dvě varianty modelů s popisem parametrů pro doménovou dekompozici.



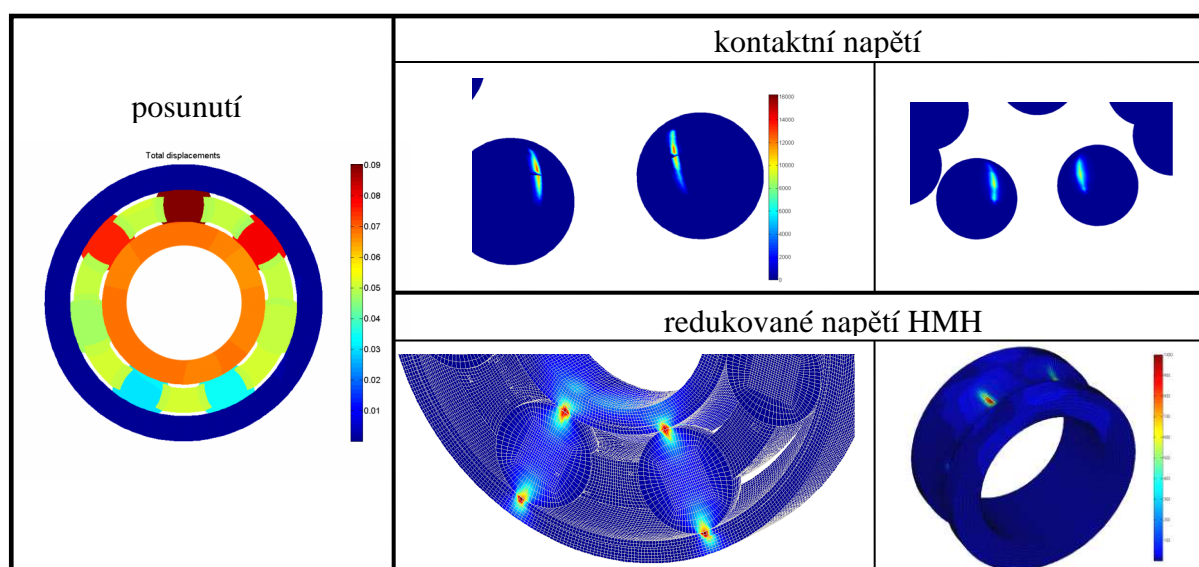
Obrázek 6. Kuličkové ložisko - popis.



Obrázek 7. Kuličkové ložisko – počítané varianty.

Mezi oběma variantami je rozdíl v počtu uzlů i podoblastí. Zatímco první případ je možné počítat sekvenčně i paralelně, druhá úloha je již natolik rozsáhlá, že bez paralelního přístupu nebylo možné získat výsledky.

Na obr. 8 jsou zobrazeny výsledky deformací, kontaktního a redukovaného napětí.



Obrázek 8. Kuličkové ložisko - vybrané výsledky.

Tabulka 2. Kuličkové ložisko, varianta A.

	Sekvenčně	Paralelně	Zrychlení
Čas preproc.	38s	23s	1.7x
Čas řešení	2300s	326s	7x
Celkový čas	2380s	339s	7x

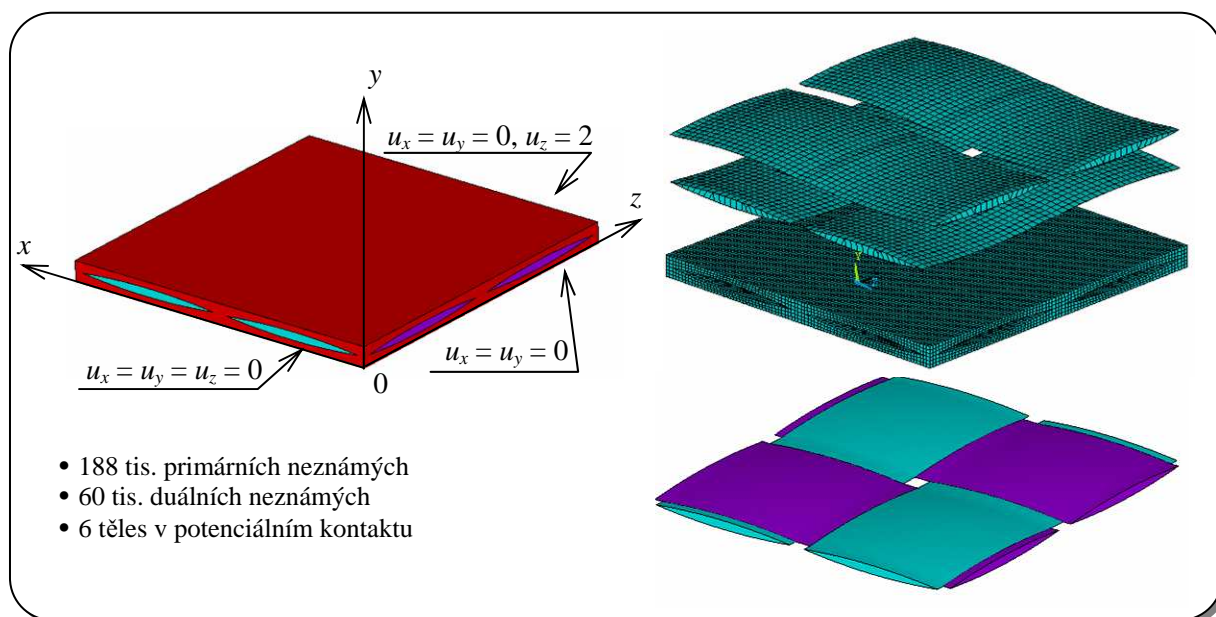
Tabulka 3. Kuličkové ložisko, varianta B.

	Sekvenčně	Paralelně	Zrychlení
Čas preproc.	nelze	300 s.	∞
Čas řešení	nelze	1.75 hod.	∞
Celkový čas	nelze	1.75 hod.	∞

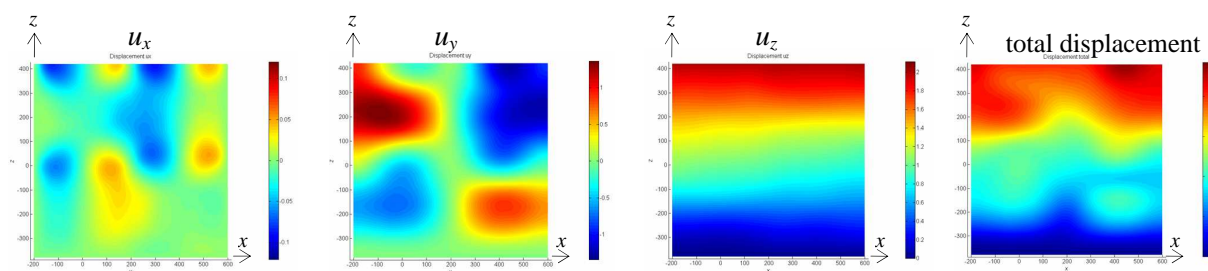
V tabulce 2 a 3 jsou zapsány časy potřebné k sestavení modelu, řešení a jejich součet.

d) Vlákenný kompozit

Poslední z příkladů je vláknový kompozit. Jedná se o náročnou kontaktní úlohu, ve které značná část z povrchových elementů přichází do kontaktu. Na obr. 9 jsou stručně vyznačené okrajové podmínky, napěťový stav byl vyvolán předepsáním posuvů na jedné z rovin. Na obr. 10 jsou vykresleny posunutí uzlů (u_x , u_y , u_z a celkové posunutí).



Obrázek 9. Vlákenný kompozit.



Obrázek 10. Vlákenný kompozit, vybrané výsledky.

4. Závěr

Metody založené na doménové dekompozici se hojněji využívají posledních 20 let. Přednosti metod jako je paralelní a numerická škálovatelnost, se ukazují v řešení rozsáhlých úloh jako klíčové. Prezentovaná knihovna MatSol je produktem několikaletého vývoje algoritmů na VŠB-TU Ostrava. Hlavní motiv vývoje knihovny v prostředí Matlab je dostupnost řady důležitých nástrojů pro lineární algebru. Software disponuje bohatými možnostmi ve vizualizaci a celkově poskytuje komfortní zázemí i pro samotné ladění běhu procesu (debugger). Díky těmto skutečnostem se výrazně urychlil vývoj, o čemž svědčí i fakt, že knihovna MatSol v současnosti slaví jeden rok.

Ačkoliv se MatSol neustále zdokonaluje a obohacuje o další funkce, ukazuje se, že obsah stávajících řešičů je na špičkové úrovni. Schopnost řešit kontaktní úlohy s volnými tělesy povyšuje knihovnu nad běžně používané komerční balíčky. Existuje řada technických problémů, ve kterých vystupovaly objekty se singulárními maticemi a které se postupem času začaly řešit speciálními technikami, které vedly k regularizaci matic. Například se do úlohy uměle dodávaly členy, které tuhé pohyby odebíraly a to např. formou systému pružin. Tento efekt

může nepříznivě ovlivnit vlastnosti matice tuhosti a zejména v iteračních řešičích, které jsou pro úlohy s mnoha stupni volnosti nezbytné, může být důsledek katastrofický. V komerčních softwarech jsou tyto „pomocné nástroje“ - tuhostní konstanty – volitelné. Zpravidla se úlohu od úlohy liší a obecně nejsou známy exaktní vzorce pro jejich nastavení. Úsilí věnované hledání optimálních parametrů může převýšit samotnou problematiku řešené úlohy. Metoda Total FETI ve své podstatě pracuje pouze se singulárními maticemi a metody, které jsou založené na regularizaci, se mohou v lepším případě pouze přiblížit.

V další etapě se počítá s rozšířením nástrojů pro řešení úloh s geometrickými a materiálovými nelinearitami a také knihovny konečných prvků.

5. Poděkování

Tento příspěvek byl vypracován za podpory výzkumného záměru MSM 6198910027 [12] s názvem Výpočetně náročné počítačové simulace a optimalizace a GAČR s číslem grantu 103/09/H078 a názvem Počítačová a experimentální analýza stavebních materiálů a jejich vícevrstevných systémů..

6. Literatura

- [1] F.-X. Roux C. Farhat. An unconventional domain decomposition method for an efficient parallel solution of large-scale finite element systems. In SIAM, Journal on Scientific Computing, 13:379–396, 1992.
- [2] F.-X. Roux C. Farhat, J. Mandel. Optimal convergence properties of the FETI domain decomposition method. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 115:365–387, 1994.
- [3] Dostál, Z., Horák, D., Kučera, R.: Total FETI - an easier implementable variant of the FETI method for numerical solution of elliptic PDE. In Communications in Numerical Methods in Engineering , 2006, vol. 22, 1155-1162
- [4] Dostál, Z., Horák, D., Haslinger, J., Vondrák, V., Kučera, R., Dobiáš, J., Pták, S.: FETI based algorithms for contact problems:scalability, large displacements and 3D Coulomb friction. In Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2005, vol. 194, čís. 2-5, 395-409
- [5] MatSol library (version 1.56). <http://www.am.vsb.cz/matsol>.
- [6] OOSol library. <http://www.am.vsb.cz/oosol>.
- [7] MATLAB - The Language of Technical Computing. <http://www.mathworks.com>.
- [8] ANSA Manuals. <http://www.ansa.cz/>
- [9] ANSYS. <http://www.ansys.com>.
- [10] COMSOL Muliphysics. <http://www.comsol.com>.
- [11] PMD Manuals. <http://www.it.cas.cz/manual/pmd>.
- [12] COMSIO - Computationally Intensive Simulations and Optimizations. <http://comsio.vsb.cz>