

Vorkonditionierte konjugierte Gradientenverfahren zur Auflösung großdimensionierter FEM-Systeme

Ulrich Semmler

1. Einleitung

Die Finite-Elemente-Methode (FEM) hat sich weltweit als universelles Lösungsverfahren verschiedenster physikalischer Aufgabenstellungen durchgesetzt, wobei aber thermoelastische Festigkeitsanalysen das hauptsächliche Anwendungsgebiet darstellen.

Verbunden mit der Entwicklung der Computertechnik wurden große Fortschritte bei der nutzerfreundlichen und grafisch unterstützten Datengenerierung und Ergebnisaufbereitung erzielt. Die wachsenden Möglichkeiten der Computer erlauben die Lösung von FEM-Problemen mit immer größerer Zahl von Freiheitsgraden.

Traditionell sind eine Vielzahl auch international bekannter FEM-Programmsysteme mit direkten Auflösungsverfahren, verbunden mit den entsprechenden Speicherformen der Matrizen, ausgerüstet. Der Anwendung dieser Verfahren sind aber Grenzen gesetzt, die insbesondere bei 3D-Problemen mit Vollkörperelementen auftreten.

Betrachtet man als Modellaufgabe das Elastizitätsproblem für eine Vernetzung des Würfels in $m \cdot m \cdot m$ Hexaederelemente (Bild 1) und verwendet das Cholesky-Verfahren als Lösungsmethode (für jedes andere direkte Verfahren gelten die gleichen Aussagen), so sind diese Grenzen bestimmt durch

- $0 (m^5)$ Speicherplätze für die Systemmatrix bei Nutzung der Bandstruktur (für $m = 6$ und HK60-Elemente sind das ca. 15 MByte),
- $0 (m^7)$ Operationen für das Lösen des Steifigkeitssystems,
- eine Konditionszahl $\kappa = 0 (m^2)$ der Systemmatrix, die bei wachsendem m zum Verlust an gültigen Ziffern führt.

Einen Ausweg bieten iterative Lösungsverfahren, insbesondere die konjugierte Gradientenmethode (CGM).

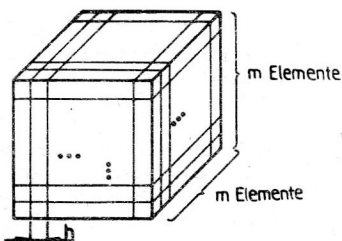


Bild 1
Reguläre Vernetzung eines Würfels

2. CGM mit Vorkonditionierung

Die CGM mit der Vorkonditionierungsmatrix C zur Auflösung des linearen Gleichungssystems

$$Ku = f \quad (1)$$

mit symmetrischer und positiv definierter Systemmatrix K (Steifigkeitsmatrix) lautet [1]:

Start: $u = u_0$ - Startnäherung (i. a. Nullvektor)

$$r_0 = Ku - f; r = r_0$$

$$Cw = r \quad (2)$$

$$s = w; \beta = (w, r)$$

$$a = Ks \quad (3)$$

Iteration: 1 $\tau = \beta / (s, a)$

$$u := u - \tau s$$

$$r := r - \tau a$$

IF ($\|r\| \leq \epsilon \|r_0\|$) GOTO 2

$$Cw = r \quad (2)$$

$$\alpha = (w, r); \sigma = \alpha / \beta; \beta = \alpha; s = w + \sigma s$$

$$a = Ks \quad (3)$$

GOTO 1

2 END

Der arithmetische Aufwand der CGM wird bestimmt durch das Lösen der Vorkonditionierungssysteme (2) und Multiplikationen (3) mit der Matrix K , jeweils einmal in der Startphase und pro Iteration.

Da die Steifigkeitsmatrix K nur multiplikativ verwendet wird, kann sie als Kompaktliste ihrer Nichtnullelemente gespeichert werden, wobei die Anzahl der benötigten Speicherplätze proportional der Zahl n der Unbekannten ist. Für das Modellproblem sind das $0 (m^3)$ Nichtnullelemente.

Für die Vorkonditionierungsmatrix werden eine Reihe von Forderungen erhoben.

Forderung 1:

Die Matrix C bestimmt die Konvergenzgeschwindigkeit der CGM, die umso höher ist, je „besser C die Matrix K approximiert“. D. h., es müssen positive Konstanten γ_1 und γ_2 existieren, so daß für alle n -dimensionalen Vektoren die Spektralungleichung

$$\gamma_1(Cv, v) \leq (Kv, v) \leq \gamma_2(Cv, v)$$

gilt. Je größer das Verhältnis $\xi = \gamma_1/\gamma_2$ ist, desto weniger Iterationen sind notwendig.

Forderung 2:

Da pro Iteration der CGM ein System (2) zu lösen ist, muß C in faktorisierte Form

$$C = L \cdot L^T \quad (4)$$

vorliegen bzw. in diese Form überführbar sein.

Forderung 3:

Die Linksdreiecksmatrix L soll die Form einer „kurzen“ Kompaktliste (möglichst kürzer als K) haben.

Bei 3D-Elastizitätsproblemen unter Verwendung von HK60-Elementen „liefert“ jedes Element einen Anteil von ca. 1000 Nichtnullelementen in der Kompaktliste von K, woraus die Bedeutung der letzten Forderung deutlich wird.

3. Unvollständige Faktorisierung

Für kompaktgespeicherte Matrizen sind zur Erzeugung der faktorisierten Form (4) die unvollständige Cholesky-Zerlegung (IC, [2]) bzw. die modifizierte IC (MIC, [3]) gebräuchlich. Dabei werden arithmetische Operationen analog dem Cholesky-Verfahren lediglich auf der Kompaktliste der Matrix K durchgeführt. Die Forderungen 1 bis 3 sind erfüllt. Das theoretisch nachgewiesene Spektralgrenzenverhältnis führt für das Modellproblem auf Operationszahlen $O(m^5)$ für die IC bzw. $O(m^4)$ für die MIC, also deutlich weniger als bei direkten Verfahren. In der Praxis ist die IC nicht schlechter als die MIC und i. a. robuster.

Um den (besonders bei 3D-Problemen mit quadratischen Ansatzfunktionen) großen Speicherbedarf für C (gleiche Größe wie K) zu reduzieren, ist es möglich und wünschenswert, die IC- bzw. MIC-Zerlegungen auf verkürzten (gegenüber K) Kompaktlisten K_1 und K_2 in der Form von Block-Diagonal-Matrizen durchzuführen. Dabei ist zu sichern, daß die Matrizen K_1 bzw. K_2 zu K spektraläquivalent sind.

3.1. Blockorientierte unvollständige Zerlegungen auf der Basis linear/quadratischer Ansatzfunktionen

Diese Methode beruht auf einer Idee von Axelsson/Gustafsson [4] und bezieht sich auf Elemente mit Eck- und Kantenmittelnknoten, wie sie in ingenieurtechnischen FEM-Anwendungen bevorzugt werden.

Für die Elementeckknoten werden lineare (bi-, trilineare) Ansatzfunktionen, für die Mittelnknoten die entsprechenden quadratischen Ansätze gewählt. Für 2D-Viereckelemente ist das im Bild 2 dargestellt. Ordnet man die Freiheitsgrade der FEM-Vernetzung nach Eck- und Mittelnknoten, so hat das Steifigkeitssystem (1) die Gestalt

$$\begin{bmatrix} K_{EE} & K_{EM} \\ K_{EM}^T & K_{MM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_E \\ u_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_E \\ f_M \end{bmatrix} \quad (5)$$

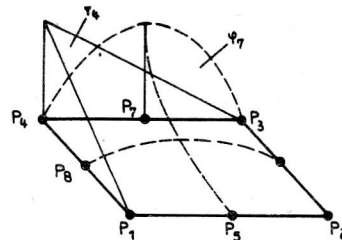


Bild 2
Hierarchische Ansatzfunktionen für Viereckelemente

In diesem System entsprechen die Komponenten der Vektoren u und f auf Grund der Konstruktion der Ansatzfunktionen nicht mehr den Knotenverschiebungen und -kräften. Das ist im FEM-Programm zu berücksichtigen; die Nutzer des Programmes dürfen davon nichts verspüren.

Die Systemmatrix (5) ist der Diagonalblockmatrix

$$K_1 = \begin{bmatrix} K_{EE} & 0 \\ 0 & D_{MM} \end{bmatrix}, \quad D_{MM} = \text{diag}(K_{MM})$$

spektraläquivalent

$$\kappa_1(K_1 v, v) \leq (Kv, v) \leq \kappa_2(K_1 v, v), \quad (6)$$

wobei die Konstanten κ_1 und κ_2 von der Elementform und (bei Elastizitätsproblemen) der Querkontraktionszahl ν abhängen, unabhängig von der Feinheit der Vernetzung sind und berechnet werden können [5], [6], [7].

Die Kompaktliste von K_1 benötigt nur ca. 1/9 des Speicherplatzes von K. Für die notwendige unvollständige Zerlegung von K_1 ist deutlich weniger Rechenzeit erforderlich (vgl. Abschnitt 4.).

3.2. Block-Zerlegung des Laplace-Operators als Vorkonditionierung

Die Durchführbarkeit der IC- bzw. MIC-Zerlegungen ist für sogenannte H- bzw. M-Matrizen bewiesen [3]. Die Steifigkeitsmatrizen K des Elastizitätsproblems bzw. die Matrix K_1 besitzen diese Eigenschaft nicht, so daß die Zerlegbarkeit nicht garantiert ist.

Verwendet man zur Vorkonditionierung nur den sogenannten Laplace-Anteil der Matrix K_1 , so entsteht bei entsprechender Ordnung der Freiheitsgrade des Systems die Blockdiagonalmatrix

$$K_2 = \text{diag}(K_{EE}^1, K_{EE}^2, K_{EE}^3, D_{MM}).$$

Dabei entfallen im Block K_{EE}^i der Matrix K_1 die Koppungsglieder zwischen den Komponenten unterschiedlicher Koordinatenrichtungen, die übrigen Elemente sind zu modifizieren.

Die Matrix K_2 ist (wiederum unabhängig von der Feinheit des Netzes) spektraläquivalent zu K_1 , so daß eine zu (6) äquivalente Beziehung auch für K_2 gilt [7]. Der

Speicherplatz reduziert sich gegenüber K_1 noch einmal auf ca. 1/3.

Es kann gezeigt werden, daß K_2 eine M-Matrix ist; die unvollständige Faktorierbarkeit ist also garantiert. Die konkreten Abschätzungen sowie die berechneten Konstanten für die verschiedenen Block-Vorkonditionierungen sind [5], [6], [7] zu entnehmen.

4. Numerische Tests

Die Implementierung der CGM mit Kompaktspeicherung und den genannten Vorkonditionierungen erfolgte im Programmsystem FEPAS [8], [9] sowohl für 2D- als auch für 3D-Probleme. Das vorher in FEPAS enthaltene Cholesky-Verfahren mit Systemmatrizen in Hüllenspeicherung (variable Bandbreite) steht auch weiterhin für kleine Vernetzungen und zu Vergleichszwecken zur Verfügung.

Die in der Tabelle 1 verglichenen Rechnungen wurden mit FEPAS auf einem Rechner EC 1056 durchgeführt. Neben den im Bild 1 dargestellten Netzen mit 27 bzw. 216 ($m = 3$ bzw. $m = 6$) HK 60-Elementen (Rechnungen 1 und 2) wurden Vernetzungen gleicher Topologie und verzerrter Geometrie gerechnet. Folgende zwei Beispiele sind in die Tabelle aufgenommen:

Rechnung 3:

Verschiebung der Deckfläche parallel zur Grundfläche, so daß Innenwinkel von 11.3° entstehen.

Rechnung 4:

Verdrehung der Deckfläche um 90° gegen die Grundfläche.

Die Abschätzungen der Spektralgrenzen, die sich gegenüber regulären Elementen verschlechtern (ohne aber die Ordnungsaussagen zu beeinflussen), sind für diese und weitere verzerrte Elemente in [7] enthalten. Die numerischen Tests bestätigen diese theoretischen Aussagen. Da sich bei verzerrten Elementen die Kondition der Steifigkeitsmatrizen verschlechtert, sinkt die Genauigkeit der Lösungen direkter Verfahren, während iterative Verfahren lediglich mehr Iterationen erfordern.

Die Rechnungen in der Tabelle 1 erfolgten mit einer geforderten Genauigkeit $\epsilon = 10^{-3}$. Da die Iterationszahl der CGM näherungsweise proportional der Größe $-lnc$ ist, ist z. B. für $\epsilon = 10^{-6}$ etwa die doppelte Zahl von CG-Schritten erforderlich, wodurch sich die Gesamt-CPU-Zeit auf 110 bis 190 % erhöht, je nachdem, wie groß der Anteil der unvollständigen Zerlegung der Matrix an der Gesamtzeit ist.

Die numerischen Tests zeigen die Vorteile der CGM gegenüber direkten Verfahren, wobei mit wachsender Dimension der Vergleich zugunsten der CGM immer deutlicher ausfällt. Beste Ergebnisse hinsichtlich Durchführbarkeit der Methode und Anforderungen an Speicher und Rechenzeit zeigt die Block-Zerlegung der Steifigkeitsmatrix des Laplace-Operators als Vorkonditionierung.

Tabelle 1
Vergleich des Cholesky-Verfahrens mit der CGM für 3D-Modellprobleme

Rechnungs-Nr.	1	2	3	4
Vernetzung	27 HK 60	216 HK 60	27 HK 60 (verschoben)	27 HK 60 (verdreht)
Anzahl der Gleichungen	504	3276	504	504
Cholesky-Verfahren				
Speicherbedarf	627 K	17.99 M	627 K	627 K
CPU-Zeit	162 s	≈ 3.5 h	162 s	162 s
IC-Vorkonditionierung				
Länge Kompaktdliste	26360	220747	nicht faktori-	nicht gerechnet
Speicherbedarf insgesamt	422 K	3.56 M	sierbar	
Anzahl der Iterationen	9	nicht gerechnet		
CPU-Zeit für Zerlegung	485 s			
CPU-Zeit insgesamt	514 s			
Block-Vorkonditionierung				
Länge Kompaktdliste	3582	28827	3582	nicht gerechnet
Speicherbedarf insgesamt	242 K	2.01 M	242 K	
Anzahl der Iterationen	21 (IC)	29 (IC)	55 (IC)	
CPU-Zeit für Zerlegung	12 s	132 s	12 s	
CPU-Zeit insgesamt	47.7 s	565 s	103 s	
Laplace-Block-Vorkonditionierung				
Länge Kompaktdliste	1482	11499	1482	1482
Speicherbedarf insgesamt	225 K	1.87 M	225 K	225 K
Anzahl der Iterationen	25 (IC)	28 (MIC)	61 (IC)	30 (IC)
CPU-Zeit für Zerlegung	0.72 s	6.7 s	0.72 s	0.72 s
CPU-Zeit insgesamt	38.9 s	380 s	93.7 s	45.8 s

LITERATUR

- [1] Samarskij, A. A.; Nikolaev, E. S.: Methoden der Lösung von Gittergleichungen. Nauka, Moskva, 1978 (in Russisch).
- [2] Manteuffel, T. A.: An incomplete factorization technique for positive definite linear systems. Math. Comp. 34 (1980) 150, 473 – 497.
- [3] Gustafsson, I.: On modified incomplete factorization methods. Lect. Notes Math., 1982, 968, p. 334 – 351.
- [4] Axelsson, O.; Gustafsson, I.: Preconditioning and two-level multigrid methods of arbitrary degree of approximation. Math. Comp. 40 (1983), 219 – 242.
- [5] Jung, M.: Konvergenzuntersuchungen zum Mehrgitterverfahren für Probleme der Festkörpermechanik. Diss. A, TU Karl-Marx-Stadt, 1988.
- [6] Semmler, U.; Hoyer, K.: Vorkonditionierte konjugierte Gradientenverfahren zur Auflösung von 3D-FEM-Systemen und ihre Anwendung im Programmsystem FEPAS. Studententexte „Finite Elemente V“, TU Dresden, WBZ FKW, 1988 (im Druck).
- [7] Semmler, U.: Vorkonditionierungen für konjugierte Gradientenverfahren zur Lösung großdimensionierter FEM-Systeme. TUK, Sektion FPM, Preprint, Nr. 92, 1989.
- [8] Finite-Elemente-Programmsystem FEPAS. Wiss. Schriftenreihe der TUK, 11/1986.
- [9] Semmler, U.: Finite-Elemente-Programmsystem FEPAS-3D für die Analyse dreidimensionaler Probleme. TU Karl-Marx-Stadt, Sektion FPM, Preprint Nr. 49, 1987.

Anschrift des Verfassers:

Dr. rer. nat. Ulrich Semmler
Technische Universität Karl-Marx-Stadt
Sektion Fertigungsprozeß und Fertigungsmittel
WB Theorie der Fertigung und Abtrenntechnik
PSF 964
Karl-Marx-Stadt
DDR – 9010