

УДК 519.6

**ОРГАНІЗАЦІЯ РОБОТИ З СИСТЕМАМИ ЛІНІЙНИХ
АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ В СКІНЧЕННО-
ЕЛЕМЕНТНОМУ РОЗВ'ЯЗУВАЧІ NADRA-3D**

М. В. Білоус, к. ф.-м. н.

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України
maksbilous@ukr.net

У статті розглядається механізм інтеграції різних алгоритмів розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь у скінченно-елементний розв'язувач.

Bilous M. V. Organization of work with systems of linear equations in finite element solver Nadra-3D. In the article a mechanism for integration of different algorithms for solving systems of linear equations in finite element solver is discussed.

Ключові слова: СИСТЕМИ ЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ, МЕТОД СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ, NADRA-3D.

Keywords: SYSTEMS OF LINEAR EQUATIONS, FINITE ELEMENT METHOD, NADRA-3D.

Обчислювальні схеми розв'язання систем диференціальних рівнянь за методом скінченних елементів (МСЕ) зводять вихідну задачу до (багатократної) побудови та чисельного знаходження розв'язків систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР). При цьому швидкість роботи програми розв'язання СЛАР має суттєвий вплив на швидкість роботи всього алгоритму. Механізми прискорення обчислень в розв'язувачах СЛАР включають максимальне врахування структури матриці (її розрідженості, симетричності), використання паралельних обчислень та реалізацію алгоритмів для графічних прискорювачів. В свою чергу програма побудови СЛАР (програмна реалізація обчислювальної схеми МСЕ) має враховувати вимоги до структур вхідних даних розв'язувача СЛАР.

У розробленому в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України програмному каркасі Nadra-3D та створеному на його основі скінченно-елементному розв'язувачі Nadra-3D [1] застосовано підхід, який дозволяє використовувати різні програмні реалізації алгоритмів розв'язання СЛАР без модифікації коду модулів побудови матриць та векторів. Для цього реалізовано набір абстрактних класів опису матриць, векторів, систем лінійних рівнянь та розв'язувачів СЛАР. На рівні цих класів визначено програмні інтерфейси доступу до елементів СЛАР, інтерфейси алгебраїчних операцій, інтерфейси ініціалізації розв'язувачів та їх запуску для виконання розрахунків. Усі операції над матрицями та векторами, а також операції розв'язання СЛАР виконуються модулями програмного каркасу виключно за допомогою методів цих базових класів.

Додавання до програмного каркасу нової схеми роботи з оперативною пам'яттю або нового розв'язувача СЛАР виконується шляхом реалізації набору нащадків зазначених базових класів та реєстрації його в підсистемі роботи зі СЛАР.

За описаним механізмом реалізовано наступні можливості.

1. Інтегровано розроблену в Інституті кібернетики програму розв'язання СЛАР з симетричною додатньо визначеною матрицею стрічкової структури методом LDL^T розкладу [2]. Ця програма використовує рядково-циклічну схему розміщення СЛАР в оперативній пам'яті.

2. Інтегровано розв'язувач DSS (Direct Sparse Solver) для розріджених матриць з бібліотеки Intel MKL [3]. Ця програма вимагає використання формату CSR (Compressed Sparse Row) для зберігання матриці СЛАР в оперативній пам'яті. Цей формат не є зручним на етапі генерування СЛАР МСЕ, оскільки структура ненульових елементів матриці тоді ще невідома, тому замість набору класів для схеми CSR реалізовано класи для роботи з розрідженими матрицями в координатному форматі, які дозволяють виконати конвертацію внутрішніх даних у формат CSR перед викликом розв'язувача DSS.

3. Реалізовано клас для роботи з розв'язувачами СЛАР, представленими у вигляді окремих виконуваних файлів. Цей клас використовує методи класів опису матриць та векторів для збереження даних у файли, генерує системний виклик для

командного рядка з параметрами зовнішньої програми-розв'язувача (завантажується з файлу налаштувань), чекає на завершення роботи цієї програми та виконує завантаження знайденого розв'язку з файлу. Оскільки усі нащадки базових класів для матриць та векторів мають реалізувати операції збереження даних в файли визначеного формату, використовувати зовнішні розв'язувачі можна з усіма підтримуваними системою схемами розміщення СЛАР в оперативній пам'яті. Через інтерфейс виклику зовнішнього розв'язувача СЛАР в каркасі Nadra-3D організована робота зі створеними в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова програмами розв'язання СЛАР зі стрічковими [4] та розрідженими [5] додатньо визначеними матрицями на комп'ютерах гібридної архітектури.

Розглянутий в доповіді підхід забезпечує гнучке налаштування розв'язувача СЛАР у складі пакету скінченно-елементного моделювання в залежності від наявних бібліотек та технічних характеристик обчислювального комплексу.

Література

1. Белоус М. В. Конечно-элементный решатель Надра-3D // Материалы II-й международной конференции «Кластерные вычисления», Львов, 3-5 июня 2013. — С. 40–47.
2. Попов А. В. Параллельный алгоритм решения системы линейных алгебраических уравнений с ленточной симметричной матрицей / А. В. Попов, А. Н. Химич // Компьютерная математика. – 2005. – № 2. – С. 52–59.
3. <https://software.intel.com/en-us/node/521696>.
4. Баранов А. Ю. Гибридные алгоритмы решения линейных систем для конечно-элементного моделирования процессов фильтрации / А. Ю. Баранов, М. В. Белоус, И. В. Сергиенко, А. Н. Химич // Кибернетика и системный анализ. – 2015. – Том 51, №4. – С. 112 – 120.
5. Хімич О. М. Плитковий гібридний алгоритм факторизації розріджених блочно-діагональних матриць з обрамленням / О. М. Хімич, В. А. Сидорук // Комп'ютерна математика. – 2016. – № 1. – С. 72 – 79.