

VŠB–Technická univerzita Ostrava
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Katedra aplikované matematiky

Hierarchické konečné a hraniční prvky
pro řešení Maxwellových rovnic
a tvarové optimalizace

Habilitační práce

Ing. Dalibor Lukáš, Ph.D.

duben 2010

Šárce a Valentýnce

Obsah

Úvod	1
I Komentář k přiloženým článkům	3
1 Tvarová optimalizace v lineární magnetostatice	5
1.1 Metoda konečných prvků v magnetostatice	5
1.2 Tvarová optimalizace	7
1.3 Aplikace	9
2 Párování topologické a tvarové optimalizace	11
2.1 Topologická optimalizace v magnetostatice	11
2.2 Identifikace tvarů a aproximace hladkými křivkami	13
2.3 Hierarchická tvarová optimalizace	14
3 Multigrid–SMALE s aplikací na Stokesovu úlohu	17
3.1 SMALE	17
3.2 Multigrid–SMALE	19
3.3 Aplikace na Stokesovu úlohu	20
4 Tvarová optimalizace pomocí FEM–BEM	23
4.1 Párování FEM–BEM v nelineární magnetostatice	24
4.2 Gaussova kvadratura singulárních jader	26
4.3 Tvarová optimalizace	27
5 Vzhůru k paralelním výpočtům . . .	31
5.1 Komprese v BEM pro Helmholtzovu úlohu	31
5.2 Multigrid–FETI metody	37
Literatura	39
II Přiložené časopisecké články	45
Seznam přiložených článků	47

Úvod

Budiž elektromagnetismus. A bylo světlo. (Richard P. Feynman)

Tato habilitační práce shrnuje mé výsledky ve vývoji škálovatelných hierarchických numerických metod založených na konečně-prvkové a hraničně-prvkové diskretizaci převážně Maxwellových rovnic a ve vývoji hierarchických metod tvarové optimalizace a její párování s topologickou optimalizací, přičemž každá z metod je motivována řešením praktické úlohy z inženýrského výzkumu, např. vývojem elektromagnetu generujícího vysoce homogenní magnetické pole pro magnetooptiku. Jednotlivé kapitoly práce sledují chronologii mého výzkumu a postupně komentují některou z pěti časopiseckých publikací, které jsou k práci přiloženy a v nichž jsem vždy buď jediný, nebo hlavní autor. V poslední kapitole se snažím práci metodicky uzavřít popisem dvou navazujících rozpracovaných témat. Kromě pěti zde komentovaných časopiseckých článků jsem jediným nebo hlavním autorem dalších osmi příspěvků [22]–[29] v recenzovaných sbornících mezinárodních konferencí, z nichž šest vyšlo v některé z konferenčních sérií nakladatelství Springer–Verlag. Tyto příspěvky o omezeném rozsahu prezentují mou práci účastníkům konference a až na dvě výjimky [28, 29] se týkají některého z časopiseckých článků, proto je v habilitaci dále nekomentuji.

Práce je členěna následovně: První kapitola, tj. první článek [17], je sumarizací dizertační práce [16] a zabývá se tvarovou optimalizací ve 3–dimenzionální lineární magnetostaticce, a to od klasické existenční a konvergenční teorie, přes specifika hranové metody konečných prvků, až po aplikaci mnou navržené hierarchické metody tvarové optimalizace pro optimální návrh elektromagnetu. Ve druhé kapitole (článku [18]) se zabýváme sekvenčním párováním topologické a tvarové optimalizace ve 2–dimenzionální nelineární magnetostaticce, citlivostní analýzou stavové úlohy a efektivní hierarchickou konstrukcí tvarově-optimalizačních úloh. Třetí kapitola (článek [19]) odbočuje od tématu. Zabývám se v ní párováním multigridu a semimonotónních Lagrangeovských multiplikátorů (SMALE) s aplikací na Stokesovu úlohu ve 2 dimenzích. Toto odbočení je však zdánlivé, neboť díky němu v současnosti vyvíjíme podobnou metodu typu multigrid–SMALE–FETI s aplikací v magnetostaticce, což vede na numericky i paralelně škálovatelnou metodu — tedy optimálně využívající veškerý dostupný výkon i paměť všech procesorů (super)počítače — pro lineární eliptické úlohy. Čtvrtá kapitola zahrnuje čtvrtý [20] a pátý [21] článek a popisuje párování metody konečných a hraničních prvků v nelineární magnetostaticce, analýzu nově vyvinutých kvadraturních formulí pro singulární jádra v rotační symetrii a metodu tvarové optimalizace s aplikací. V poslední páté kapitole prezentuji rozpracované výsledky, které vedou k paralelním výpočtům. Nejdříve ukáži vylepšenou hierarchickou kompresi matic v metodě hraničních prvků pro 3–dimenzionální Helmholtzovu úlohu popisující akustiku, ale také např. s-polarizovaný případ Maxwellových rovnic. Ve zbytku kapitoly prezentuji výše zmíněné párování multigridu a FETI metod.

Tato práce by nevznikla bez mého školitele a šéfa Prof. RNDr. Zdeňka Dostála, DSc., který mě k jejímu sepsání přesvědčil. Nevznikla by ani bez podpory mých milovaných děvčat Šárky a Valentýnky, které z jejího případného obhájení budou mít velkou radost.

Část I

Komentář k přiloženým článkům

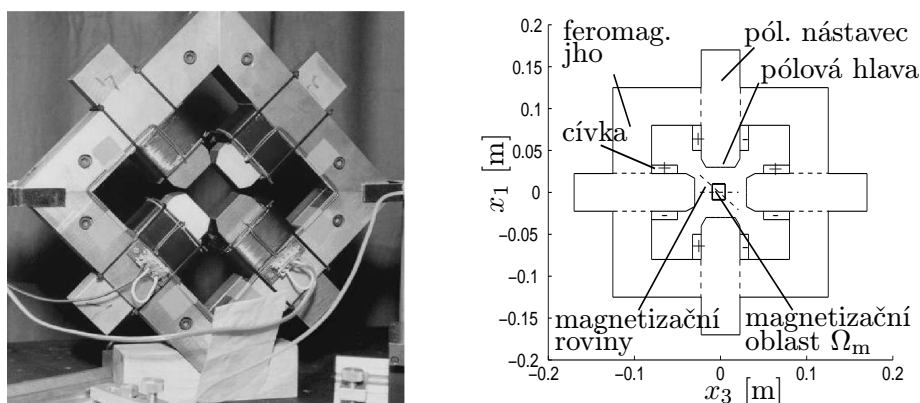
Kapitola 1

Tvarová optimalizace v lineární magnetostaticce

Na tomto tématu jsem pracoval převážně v rámci své dizertace [16] (v letech 1999–2003) a většina výsledků vznikla během mých dvou stáží (dvou a čtvrt roku) ve skupině Prof. Dr. Ulricha Langerera ve výzkumném projektu SFB 013 při Keplerově univerzitě v Linci. Úspěchu práce však také velmi vděčím Prof. Ing. Jaromíru Pištorovi, CSc. z Institutu fyziky, VŠB–TU Ostrava, který mi poskytl výborný benchmark — stejnosměrný elektromagnet sloužící pro generování homogenních polí používaný pro výzkum v magnetooptice. První výsledky jsem prezentoval na konferenci SCEE 2000 ve Warnemünde [22], souhrnné výsledky pak na konferenci ISMOT 2003 v Ostravě [23] a podrobně pak v časopisecké publikaci [17], jejíž komentář je také obsahem této kapitoly.

1.1 Metoda konečných prvků v magnetostaticce

I když zde prezentovaná teorie i numerické metody jsou obecnější, můžeme mít stále na mysli stejnosměrný elektromagnet z Obr. 1.1. Uvažujeme úlohu



Obrázek 1.1: Geometrie elektromagnetu

$$\begin{aligned} \operatorname{curl} \left(\frac{1}{\mu} \operatorname{curl}(\mathbf{u}) \right) &= \mathbf{J} \quad \text{v } \Omega, \\ \mathbf{n} \times \mathbf{u} &= \mathbf{0} \quad \text{na } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1.1}$$

kde Ω je 3–dimenzionální polygonální oblast zahrnující vzduch, budící cívky a feromagnetické jho, μ je permeabilita prostředí (vzduchu nebo feromagnetika), \mathbf{J} je budící (bezdivergentní) proudová hustota cívek, \mathbf{u} je hledaný magnetický vektorový potenciál. Poznamenejme, že se dopouštíme modelovací chyby, a to ořezáním \mathbb{R}^3 na Ω a nahrazením fyzikální podmínky $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{0}$ pro $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ výše uvedenou umělou okrajovou podmínkou. V kapitole 4 to napravíme a ukážeme si, že metody hraničních prvků jsou v elektromagnetismu vhodnější.

Přesto, že formulace magnetostatiky (1.1) je semi–eliptická okrajová úloha podobně jako např. Neumannova úloha v pružnosti, zabývá se numerickým řešením Maxwellových rovnic celý podobor matematiky. Specifikum řešení (1.1) tkví v tom, že jádro diferenciálního operátoru \mathbf{curl} obsahuje všechny gradientní pole a je tedy nekonečně–dimenzionální. To vede ke specifické konstrukci prostoru testovacích funkcí, jeho konečně–prvkové aproximace i např. multigradních řešičů. Přirozený prostor testovacích funkcí je (ve smyslu distribucí)

$$\mathbf{V} := \mathbf{H}_0(\mathbf{curl}; \Omega) := \{ \mathbf{u} \in [L^2(\Omega)]^3 \mid \mathbf{curl}(\mathbf{u}) \in [L^2(\Omega)]^3 \text{ a } \mathbf{n} \times \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ na } \partial\Omega \},$$

který je se skalárním součinem $(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{\mathbf{V}} := \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{curl}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{curl}(\mathbf{v})$ a indukovanou normou $\|\mathbf{v}\|_{\mathbf{V}} := \sqrt{(\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbf{V}}}$ Hilbertův (při Lipschitzovské Ω). Úlohu (1.1) chápeme ve slabém smyslu

$$? = \mathbf{u} \in \mathbf{V} : \quad a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \frac{1}{\mu} \mathbf{curl}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{curl}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{J} \cdot \mathbf{v} =: b(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \quad (1.2)$$

Abychom vybrali z nekonečně mnoha řešení pouze jedno \mathbf{u}_{\perp} , které je zároveň kolmé na jádro, tj. $\int_{\Omega} \mathbf{u}_{\perp} \cdot \nabla \phi = 0 \quad \forall \phi \in H^1(\Omega)$, a je jednoznačné, můžeme např. řešit regularizovanou úlohu magnetostatiky dávající jednoznačné řešení

$$? = \mathbf{u}_{\varepsilon} \in \mathbf{V} : \quad a(\mathbf{u}_{\varepsilon}, \mathbf{v}) + \varepsilon \int_{\Omega} \mathbf{u}_{\varepsilon} \cdot \mathbf{v} = b(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V},$$

kde $\varepsilon > 0$ je regularizační parametr. Platí, že $\mathbf{u}_{\varepsilon} \rightarrow \mathbf{u}_{\perp}$ pro $\varepsilon \rightarrow 0_+$ ve \mathbf{V} .

Nédélec v 80. letech fakticky inicioval vznik oboru výpočetní elektromagnetismus, když v [30, 31] zavádí vhodné třídy konečných prvků pro (1.1), např.

$$\mathbf{V}^h := \left\{ \mathbf{v} \in \mathbf{H}_0(\mathbf{curl}; \Omega) : \mathbf{v}(\mathbf{x})|_{K^e} := \mathbf{a}^e \times \mathbf{x} + \mathbf{b}^e \text{ pro } K^e \in \mathcal{T}^h \right\},$$

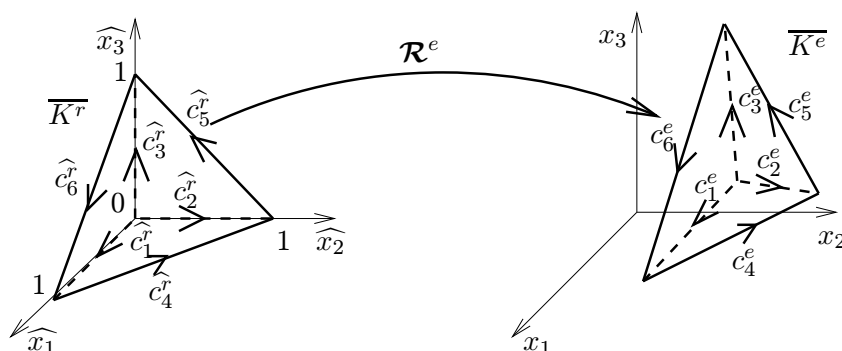
kde $\mathcal{T}^h := \{K^1, \dots, K^n\}$ je diskretizace Ω do čtyřstěnů. Funkce $\mathbf{v} \in \mathbf{V}^h$ mají tečné složky spojitě, což zajistí hranové stupně volnosti $\sigma_i^e(\mathbf{v}) := \int_{c_i^e} \mathbf{v} \cdot ds$, viz Obr. 1.2. Stejnoměrná regularita diskretizace zaručí stabilitu interpolace

$$\forall \mathbf{v} \in \mathbf{H}^2(\Omega) \cap \mathbf{C}(\overline{\Omega}) : \|\mathbf{v} - \boldsymbol{\pi}^h(\mathbf{v})\|_{\mathbf{V}} \leq Ch |\mathbf{v}|_{\mathbf{H}^2(\Omega)},$$

kde $\boldsymbol{\pi}^h : \mathbf{C}(\overline{\Omega}) \rightarrow \mathbf{V}^h$ je interpolační operátor a kde $C > 0$ závisí pouze na Ω . Předchozí dává stejnoměrnou lineární konvergenci metody konečných prvků $\|\mathbf{u}_{\varepsilon} - \mathbf{u}_{\varepsilon}^h\|_{\mathbf{V}} = O(h)$ pro hladké \mathbf{u}_{ε} , kde $\mathbf{u}_{\varepsilon}^h$ je konečně–prvková aproximace

$$? = \mathbf{u}_{\varepsilon}^h \in \mathbf{V}^h : \quad a(\mathbf{u}_{\varepsilon}^h, \mathbf{v}^h) + \varepsilon \int_{\Omega} \mathbf{u}_{\varepsilon}^h \cdot \mathbf{v}^h = b(\mathbf{v}^h) \quad \forall \mathbf{v}^h \in \mathbf{V}^h. \quad (1.3)$$

Z prvního Strangova lemma lze snadno dokázat, že konečně–prvkové aproximace konvergují i za přídavného předpokladu, že $|\mu^h - \mu| \rightarrow 0$ skoro všude v Ω . Celkově tedy platí, že $\mathbf{u}_{\varepsilon}^h \rightarrow \mathbf{u}_{\perp}$ ve \mathbf{V} pro $h \rightarrow 0_+$ a $\varepsilon \rightarrow 0_+$.



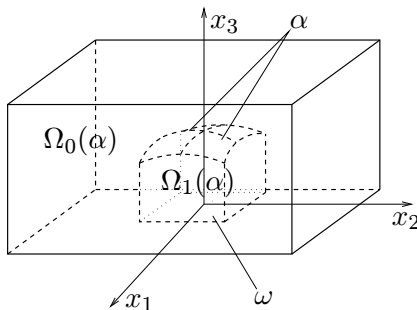
Obrázek 1.2: Transformace z referenčního Nédélecova konečného prvku

1.2 Tvarová optimalizace

Následující teorie je analogií k [13]. Bez újmy na obecnosti uvažujme obdélníkovou oblast $\omega \subset \mathbb{R}^2$ a nad ní definujeme tvary z přípustné množiny

$$\mathcal{U} := \{\alpha \in C(\bar{\omega}) : |\alpha(\mathbf{x}) - \alpha(\mathbf{y})| \leq C\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \text{ a } \alpha_l \leq \alpha(\mathbf{x}) \leq \alpha_u\}$$

se stejnoměrnou konvergencí, tj. $\alpha_n \rightarrow \alpha$ v \mathcal{U} znamená $\alpha_n \rightrightarrows \alpha$. Z Ascoli–Arzelàovy věty plyne, že \mathcal{U} je kompaktní. Předpokládejme, že tvary $\alpha \in \mathcal{U}$ řídí rozložení oblasti Ω tak, že $\bar{\Omega} = \bar{\Omega}_0(\alpha) \cup \bar{\Omega}_1(\alpha)$ a $\Omega_0(\alpha) \cap \Omega_1(\alpha) = \emptyset$, viz Obr. 1.3, přičemž Ω_0 je oblast vzduchu

Obrázek 1.3: Rozklad Ω podle řídicího tvaru α

nebo cívek a Ω_1 je oblast feromagnetika, které chceme optimalizovat. Nechť permeabilita vzduchu (a vinutí) je $\mu_0 > 0$ a permeabilita feromagnetika $\mu_1 \gg \mu_0$, pak

$$a_\alpha(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \frac{1}{\mu_0} \int_{\Omega_0(\alpha)} \mathbf{curl}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{curl}(\mathbf{v}) + \frac{1}{\mu_1} \int_{\Omega_1(\alpha)} \mathbf{curl}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{curl}(\mathbf{v})$$

a uvažujme stavovou úlohu

$$? = \mathbf{u}_\varepsilon(\alpha) \in \mathbf{V} : \quad a_\alpha(\mathbf{u}_\varepsilon(\alpha), \mathbf{v}) + \varepsilon \int_{\Omega} \mathbf{u}_\varepsilon(\alpha) \cdot \mathbf{v} = b(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}.$$

Díky stejnoměrné konvergenci v \mathcal{U} lze pomocí Lebesgueovy věty dokázat spojitost zobrazení $\mathbf{u}_\varepsilon : \mathcal{U} \rightarrow \mathbf{V}$. Podobně jsou spojitá zobrazení \mathbf{u}_\perp a $\mathbf{u}_{\varepsilon,h}$.

Nechť $\mathcal{I} : \mathcal{U} \times \mathbf{V} \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitý cenový funkcionál, definujme $\mathcal{J}(\alpha) := \mathcal{I}(\alpha, \mathbf{u}_\perp(\alpha))$ a uvažujme následující abstraktní úlohu tvarové optimalizace

$$? = \alpha^* \in \mathcal{U} : \quad \mathcal{J}(\alpha^*) \leq \mathcal{J}(\alpha) \quad \forall \alpha \in \mathcal{U}, \quad (1.4)$$

která díky kompaktnosti \mathcal{U} a spojitosti \mathcal{J} má řešení. Zavedme $\mathcal{J}_\varepsilon(\alpha) := \mathcal{I}(\alpha, \mathbf{u}_\varepsilon(\alpha))$, pak i následující úloha má řešení

$$? = \alpha_\varepsilon^* \in \mathcal{U} : \quad \mathcal{J}_\varepsilon(\alpha_\varepsilon^*) \leq \mathcal{J}_\varepsilon(\alpha) \quad \forall \alpha \in \mathcal{U} \quad (1.5)$$

a platí, že z libovolné posloupnosti (ε_n) takové, že $\varepsilon_n \rightarrow 0_+$, lze vybrat podposloupnost (ε_{n_k}) tak, že

$$\alpha_{\varepsilon_{n_k}}^* \rightarrow \alpha^* \text{ v } \mathcal{U},$$

příčemž α^* řeší (1.4) a $\alpha_{\varepsilon_{n_k}}^*$ řeší (1.5). Uvažujme dále triangulaci \mathcal{T}_ω^h oblasti ω tak, že $\bar{\omega} = \sum_{i=1}^{n_\omega^h} \bar{\omega}_i^h$, $\omega_i^h \cap \omega_j^h = \emptyset$ pro $i \neq j$, která se nekříží s triangulací \mathcal{T}^h stavové úlohy, tj. trojúhelník ω_i^h je vždy sjednocením několika (i jedné) stěny čtyřstěnu z \mathcal{T}^h . Diskretizovaná konečně-dimenzionální množina přípustných tvarů je

$$\mathcal{U}^h := \left\{ \alpha^h \in \mathcal{U} : \alpha^h(\mathbf{x})|_{\omega_i^h} \in P^1(\omega_i^h) \text{ pro } \omega_i^h \in \mathcal{T}_\omega^h \right\}.$$

a příslušná diskretizovaná regularizovaná úloha tvarové optimalizace je

$$? = \alpha_\varepsilon^{h*} \in \mathcal{U}^h : \quad \mathcal{J}_\varepsilon(\alpha_\varepsilon^{h*}) \leq \mathcal{J}_\varepsilon(\alpha^h) \quad \forall \alpha^h \in \mathcal{U}^h.$$

Tato úloha má řešení a platí, že z libovolné posloupnosti (h_n) takové, že $h_n \rightarrow 0_+$, lze vybrat podposloupnost (h_{n_k}) tak, že

$$\alpha_\varepsilon^{h_{n_k}*} \rightarrow \alpha_\varepsilon^* \text{ v } \mathcal{U}.$$

Poznamenejme, že nic nevíme o jednoznačnosti ani o stabilitě optimálních tvarů, k čemuž bychom potřebovali dobře definovat tvarový Hessián cenového funkcionálu a dokázat jeho koercivitu, což pro některé úlohy lze, viz [10].

V inženýrské praxi je oblíben návrh pomocí Bézierových ploch. Zavedme proto Bézierovu parametrizaci tvarů $F : \mathcal{P} \rightarrow C(\bar{\omega})$, kde $\mathcal{P} := \{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d : \mathbf{p}_1 \leq \mathbf{p} \leq \mathbf{p}_u\}$, kde \mathbf{p}_1 a \mathbf{p}_u volíme tak, aby $F(\mathcal{P}) \subset \mathcal{U}$. Zavedme interpolaci $\pi_\omega^h : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}^h$. Pak parametrizovaná úloha tvarové optimalizace je

$$? = \mathbf{p}^* \in \mathcal{P} : \quad \mathcal{J}_\varepsilon(\pi^h(F(\mathbf{p}^*))) \leq \mathcal{J}_\varepsilon(\pi^h(F(\mathbf{p}))) \quad \forall \mathbf{p} \in \mathcal{P}. \quad (1.6)$$

Úlohu (1.6) řešíme sekvenčním kvadratickým programováním (SQP) s postupným budováním přibližného Hessiánu. K tomu potřebujeme derivovat cenový funkcionál, který se počítá následujícím zřetězením:

$$\mathbf{p} \xrightarrow{\pi_\omega^h \circ F} \alpha^h \xrightarrow{\mathbf{K}^n \cdot \Delta \mathbf{x}^n = \mathbf{b}^n(\alpha^h)} \mathbf{x}^n \xrightarrow{\text{FEM}} \mathbf{A}_\varepsilon^n, \mathbf{f}^n \xrightarrow{\mathbf{A}_\varepsilon^n \cdot \mathbf{u}_\varepsilon^n = \mathbf{f}^n} \mathbf{u}_\varepsilon^n \xrightarrow{\mathbf{A}_\varepsilon^n \cdot \mathbf{u}_\varepsilon^n = \mathbf{f}^n} \mathcal{I}^h(\alpha^h, \mathbf{x}^n, \mathbf{u}_\varepsilon^n) \xrightarrow{\mathcal{I}^h(\alpha^h, \mathbf{x}^n, \mathbf{u}_\varepsilon^n)} \mathcal{J}_\varepsilon^h, \quad (1.7)$$

kde $\mathbf{x}^n \in \mathbb{R}^{3n}$ jsou souřadnice všech uzlů diskretizace \mathcal{T}^h , $\mathbf{A}_\varepsilon^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a $\mathbf{f}^n \in \mathbb{R}^n$ je konečně-prvková matice a vektor pravé strany úlohy (1.3), $\mathbf{u}_\varepsilon^n \in \mathbb{R}^n$ je konečně-prvkový

vektor řešení (1.3), \mathcal{I}^h je diskretizovaný funkcionál \mathcal{I} a kde tvary α^h deformují diskretizaci \mathcal{T}^h řešením následující pomocné diskretizované úlohy lineární pružnosti:

$$\mathbf{K}^n \cdot \Delta \mathbf{x}^n(\alpha^h) = \mathbf{b}^n(\alpha^h), \quad \mathbf{x}^n(\alpha^h) := \mathbf{x}_0^n + \Delta \mathbf{x}^n(\alpha^h), \quad (1.8)$$

přičemž předepisujeme nehomogenní Dirichletovu podmínku podél α^h , která se metodou partikulárního řešení zahrne do pravé strany $\mathbf{b}^n \in \mathbb{R}^n$, matice tuhosti \mathbf{K}^n je sestavena pro nedeformovanou síť $\mathbf{x}_0^n \in \mathbb{R}^{3n}$. Výpočet gradientu, tj. citlivostní analýza, zahrnuje např. následující výraz

$$\left(-\frac{\partial \mathbf{A}_\varepsilon^n}{\partial (\mathbf{x}_1^n)_1} \cdot \mathbf{u}_\varepsilon^n, \dots, -\frac{\partial \mathbf{A}_\varepsilon^n}{\partial (\mathbf{x}_n^n)_3} \cdot \mathbf{u}_\varepsilon^n \right)^T \cdot \left\{ (\mathbf{A}_\varepsilon^n)^{-1} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{I}^h \right\},$$

v němž nám složené závorky naznačují správný postup, tzv. adjungovaná metoda, při níž řešíme úlohu (1.3) s pravou stranou $\nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{I}$.

1.3 Aplikace

Uvažujme opět elektromagnet z Obr. 1.1, který slouží k měření magnetooptických jevů [32]. Vzorek, jehož magnetooptické vlastnosti se mají měřit, se vloží mezi pólové nástavce, osvítlí se polarizovaným monochromatickým paprskem a měří se změna polarizace odražených paprsků. Pro měření je třeba, aby elektromagnet generoval uprostřed homogenní (konstattní) a dostatečně silné magnetické pole. Navíc se chce, aby elektromagnet postupně měnil rovinu polarizace, což jeho geometrie umožňuje v osmi směrech pouhým přepínáním/vypínáním vhodných cívek. Do výpočtu stačí díky symetrie zahrnout pouze dvě konfigurace:

- magnetický tok se uzavírá vertikálně, tj. horizontální cívky jsou vypnuty,
- magnetický tok se uzavírá diagonálně, polarita cívek je dle Obr. 1.1 (vpravo).

Cenový funkcionál je

$$\mathcal{I}(\mathbf{u}^{(1)}(\alpha, \mathbf{x}), \mathbf{u}^{(2)}(\alpha, \mathbf{x})) := \frac{1}{2} \sum_{v=1}^2 \varphi^{(v)}(\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x})) + \rho \theta^{(v)}(\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x})),$$

kde pro $v = 1, 2$ je $\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x}) := \mathbf{curl}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x}))$ je magnetické pole v -té stavové úlohy, kde $\rho := 10^{-6}$ a

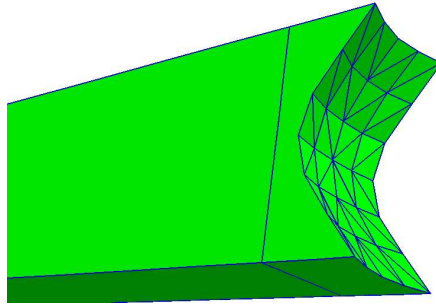
$$\varphi^{(v)}(\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x})) := \frac{1}{|\Omega_m| (B_{\min}^{\text{avg}})^2} \times \int_{\Omega_m} |\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x}) - B^{\text{avg},(v)}(\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x})) \mathbf{n}_m^{(v)}|^2,$$

$$\theta^{(v)}(\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x})) := \left(\max \left\{ 0, B_{\min}^{\text{avg}} - B^{\text{avg},(v)}(\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x})) \right\} \right)^2,$$

$$B^{\text{avg},(v)}(\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x})) := \frac{1}{|\Omega_m|} \int_{\Omega_m} |\mathbf{B}^{(v)}(\alpha, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_m^{(v)}|,$$

přičemž $|\Omega_m|$ je objem $\Omega_m := (-0.005, 0.005)^3$ [m], $B^{\text{avg}} := 0.08$ [T], $\mathbf{n}_m^{(1)} := (1, 0, 0)$, $\mathbf{n}_m^{(2)} := (1, 0, 1)/\sqrt{2}$.

Úloha tvarové optimalizace s $\varepsilon := 10^{-6}$ diskretizovaná metodou konečných prvků do 29541 hranových neznámých s 12 Béziovými návrhovými parametry trvala 93 SQP iteracích. Výsledný tvar je na Obr. 1.4, tvar byl vyroben, z naměřeného magnetického pole byl spočítán cenový funkcionál, přičemž jsme zaznamenali více než čtyřnásobné zlepšení oproti počátečnímu plochému tvaru. Relativní odchylka mezi změřeným a vypočteným magnetickým polem se však liší o 30%, což je způsobeno saturací pole v rozích geometrie a v pólových nástavcích.



Obrázek 1.4: Optimalizovaný tvar pólových nástavců elektromagnetu

Kapitola 2

Párování topologické a hierarchické tvarové optimalizace

Další pokračování mého výzkumu vedlo k článku [18], jehož komentář je obsahem této kapitoly. Většina prezentovaných výsledků vznikla také během mých stáží ve skupině Prof. Langerova v Linci, odkud se znám i se spoluautorem článku RNDr. Pavlem Chalmovian-ským, Ph.D., který je v současnosti na Fakultě matematiky, fyziky a informatiky Komenského univerzity v Bratislavě. Průběžně jsme výsledky prezentovali na konferencích ISMOT 2003 v Ostravě [23], na Workshop on Computational Electromagnetism 2004 v Oberwolfachu [24], na konferencích SCEE 2004 v Capu d'Orlando [25], ENUMATH 2005 v Santiagu de Compostela [26] a NM&A 2006 v Borovci [27]. V těchto pracích převážně používáme geometrický multigríd pro urychlení řešení stavové úlohy. Aplikaci algebraického multigrídu pro nekonformní diskretizaci jsme spolu s Dr. Johannesem Krausem z RICAM Linz představili na konferenci LSSC 2007 v Sozopolu [28].

2.1 Topologická optimalizace v magnetostatice

Ve tvarové optimalizaci dopředu známe topologii optimalizované geometrie. Přirozeným zobecněním je topologická optimalizace [2], kdy v optimalizované geometrii můžeme vytvářet díry, či slučovat nesouvislé komponenty. Dá se očekávat, že pracnost řešení takových úloh je mnohem větší, než tomu bylo u optimalizace tvarové. Tato práce sekvenčně páruje topologickou optimalizaci s tvarovou tak, že výsledek hrubě diskretizované topologické optimalizace, která ještě není příliš početně náročná, dává pevnou topologii a počátečním tvar pro následnou tvarovou optimalizaci, kterou navíc řešíme na hierarchii sítí s využitím multigrídu pro řešení stavové úlohy. Navrhujeme zde také schéma pro topologickou i tvarovou citlivostní analýzu nelineární stavové úlohy. Naše práce je motivována inženýrským přístupem v [39], kde však autoři nevyužívají struktury úlohy a každá nová topologie i tvar vede na generaci nové sítě.

Uvažujme stavovou úlohu ve slabém smyslu

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\nu(\mathbf{x}, |\nabla u(\mathbf{x})|^2) \nabla u(\mathbf{x})) &= J(\mathbf{x}) \quad \text{v } \Omega, \\ u(\mathbf{x}) &= 0 \quad \text{na } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{2.1}$$

kde Ω je 2–dimenzionální oblast zahrnující vzduch, budící cívky a feromagnetické jho, ν je reluktivita prostředí, J je budící proudová hustota cívek, u je hledaný skalární magnetický

potenciál. Topologická optimalizace je inverzní úlohou k (2.1), kde hledáme optimální rozložení reluktivity ν v oblasti $\Omega_d \subset \Omega$. Množinu přípustných návrhů tvoří $\mathcal{Q} := \{\rho \in L^2(\Omega_d) : 0 \leq \rho \leq 1\}$, přičemž penalizujeme přechodné hodnoty následovně:

$$\tilde{\rho}(\rho) := \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\arctan(p_\rho)} \arctan(p_\rho(2\rho - 1)) \right),$$

kde typicky stačí volit $p_\rho := 100$. Uvažujeme nelineární reluktivitu

$$\nu(\mathbf{x}, \eta) := \begin{cases} \tilde{\nu}(\eta, \tilde{\rho}(\rho(\mathbf{x}))) := \nu_0 + (\nu(\eta) - \nu_0) \tilde{\rho}(\rho(\mathbf{x})) & \text{pro } \mathbf{x} \in \Omega_d, \\ \nu_0 & \text{jinde,} \end{cases}$$

přičemž $\nu(\eta) := \nu_1 + (\nu_0 - \nu_1)\eta^4 / (\eta^4 + \nu_0^{-1})$ s $\nu_0, \nu_1 > 0$ konstantními reluktivitami vzduchu, resp. feromagnetika. Nechť $\mathcal{I} : H^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ je cenový funkcionál a V_{\max} maximální objem navrhované struktury, úlohu topologické optimalizace formulujeme následovně:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\rho \in \mathcal{Q}} \left(\mathcal{I}(u) + p_V \max \left\{ \int_{\Omega_d} \tilde{\rho}(\rho) - V_{\max}, 0 \right\}^2 \right) \\ \text{vzhledem k} \\ \int_{\Omega} \tilde{\nu}(|\nabla u|^2, \tilde{\rho}(\rho)) \nabla u \nabla v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} Jv \, d\mathbf{x} \text{ v } H_0^1(\Omega), \end{array} \right. \quad (2.2)$$

kde $p_V \gg 0$.

Úlohu (2.2) diskretizujeme uzlovými konečnými prvky nad triangulací \mathcal{T} , navrhované rozložení materiálu ρ je po trojúhelnících konstantní. Diskretizovaná stavová úloha vede na nelineární soustavu rovnic dimenze n

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}, \tilde{\rho}) \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f},$$

kterou řešíme Newtonovou metodou s line-search algoritmem pomocí bisekcí. V každém Newtonově kroce řešíme linearizovanou soustavu

$$\mathbf{A}'_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^{i-1}, \tilde{\rho}) \cdot \mathbf{w}^i = \mathbf{f} - \mathbf{A}(\mathbf{u}^{i-1}, \tilde{\rho}) \cdot \mathbf{u}^{i-1},$$

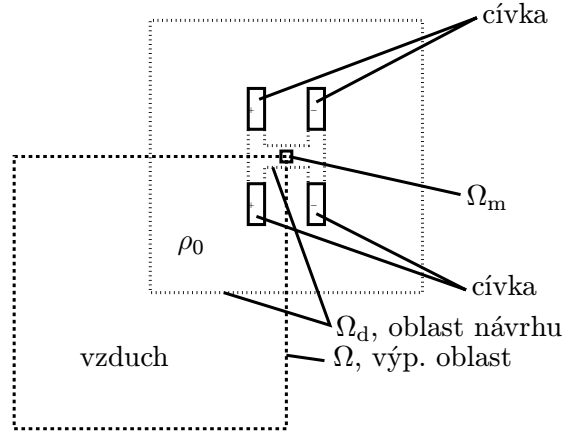
kde matice $\mathbf{A}(\mathbf{u}^{i-1}, \tilde{\rho})$ i $\mathbf{A}'_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^{i-1}, \tilde{\rho})$ lze sestavit po trojúhelnících

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}, \tilde{\rho}) = \sum_{K^e \in \mathcal{T}} \mathcal{G}^e \left(\mathbf{A}^e(\mathbf{u}^e, \tilde{\rho}^e) \right), \quad \mathbf{A}^e(\mathbf{u}^e, \tilde{\rho}^e) = \mathbf{B}^{eT} \tilde{\nu}(|\mathbf{B}^e \mathbf{u}^e|^2, \tilde{\rho}^e) \mathbf{B}^e |K^e|, \quad (2.3)$$

kde $\mathbf{B}^e \in \mathbb{R}^{2 \times 3}$ je matice gradientů konečně-prvkových tvarových funkcí nad K^e a $\mathcal{G}^e : \mathbb{R}^{3 \times 3} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ mapuje lokální matice, resp. stupně volnosti, na globální.

Diskretizovanou úlohu topologické optimalizace řešíme metodou největšího spádu, pro niž potřebujeme vyčíslit gradient cenového funkcionálu vzhledem k ρ . Aplikujeme adjungovanou metodu citlivostní analýzy, což mimo jiné vyžaduje zpětné diferencování Newtonovy metody pro stavovou úlohu. Naštěstí na rozdíl od tvarové optimalizace se penalizované návrhové proměnné $\tilde{\rho}$ vyskytují pouze ve výrazech pro ν , na nichž jsou matice \mathbf{A} i $\mathbf{A}'_{\mathbf{u}}$ lineárně závislé. Citlivostní analýzu lze tedy snadno odvodit a pracnost vyčíslení $\nabla_{\rho} \mathcal{I}$ je pomocí adjungované metody úměrná vyčíslení \mathcal{I} .

Uvažujme návrh elektromagnetu z Obr. 1.1 tak, že nyní máme zadánu pouze oblast Ω_m , buzeny jsou pouze vertikální cívky a oblast Ω_d je kompaktně vnořena do výpočetní

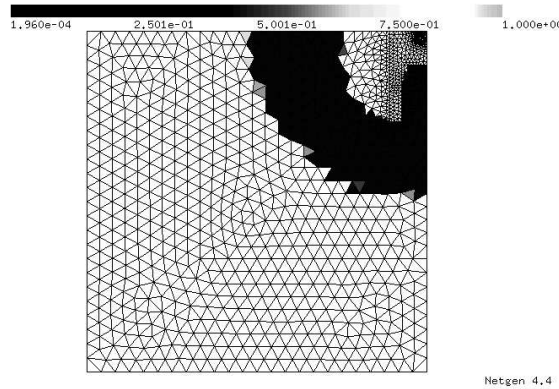


Obrázek 2.1: Výpočetní oblast, její symetrická čtvrtina a počáteční návrh

oblasti Ω tak, že neobsahuje Ω_m ani oblast vertikálních cívek, viz též Obr. 2.1. Cenový funkcionál je

$$\mathcal{I}(u) := \int_{\Omega_m} |\mathbf{B}(u) - B^{\text{avg}}(u) \mathbf{n}_m|^2 dx + p_B (\min\{0, B^{\text{avg}}(u) - B_{\text{min}}^{\text{avg}}\})^2,$$

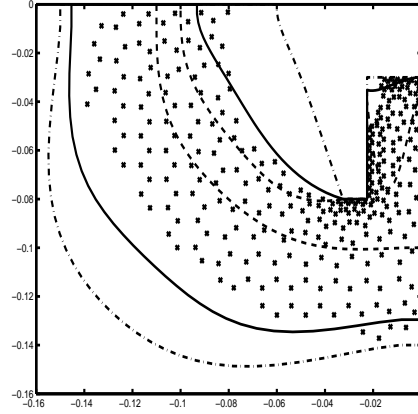
kde $\mathbf{B}(u) := \text{curl}(u) := (\partial u / \partial x_2, -\partial u / \partial x_1)$, $B^{\text{avg}}(u)$ je střední hodnota z $\mathbf{B}(u) \mathbf{n}_m$ přes Ω_m , $\mathbf{n}_m := (0, 1)$, $B_{\text{min}}^{\text{avg}} := 0.12$ [T] a $p_B := 10^6$. Cívky jsou buzeny proudem 5 [A] a mají 600 závitů, reluktivita nenasyceného feromagnetika je $\nu_1 := \nu_0 / 5100$, $V_{\text{max}} := 0.0155$ [m²]. Diskretizovaná úloha vedla na $n := 1105$ stavových proměnných a 861 návrhových proměnných, počáteční návrh byl $\rho_0(\mathbf{x}) := 0.5$. Na Obr. 2.2 je výsledná optimální topologie, přičemž výpočet trval 2.5 s v 7 optimalizačních iteracích.



Obrázek 2.2: Symetrická čtvrtina optimalizované topologie

2.2 Identifikace tvarů a aproximace hladkými křivkami

Optimalizovanou topologii z Obr. 2.2 označme ρ_{opt} . Poslouží nám jako počáteční návrh pro tvarovou optimalizaci. K tomu však potřebujeme identifikovat tvary oblasti feromag-



Obrázek 2.3: Aproximace tvarů: čárkovaně – dolní mez; čerchovaně – horní mez; plná čára – aproximace tvaru optimalizované topologie ρ_{opt} ; křížky – středy trojúhelníků s $\rho_{\text{opt}} \geq 0.5$

netika $\Omega_1 := \{\mathbf{x} \in \Omega : \rho(\mathbf{x}) \geq 1/2\}$ některým algoritmem rozpoznávání obrazu, např. procházením hranice $\partial\Omega_1$. Druhým krokem pak je aproximace $\partial\Omega_1$ po částech hladkými např. Béziovými křivkami. Hledejme tedy s Béziových křivek, které jsou popsány vektory parametrů $\mathbf{p}_1 \in \mathbb{R}^{n_1}, \dots, \mathbf{p}_s \in \mathbb{R}^{n_s}$. Volba vhodných mezí parametrů dává přípustnou množinu

$$\mathcal{P} := \{(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_s) : \underline{\mathbf{p}}_i \leq \mathbf{p}_i \leq \overline{\mathbf{p}}_i \text{ pro } i = 1, \dots, s\}$$

a řešíme následující úlohu nejmenších čtverců:

$$\min_{(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_s) \in \mathcal{P}} \int_{\Omega_d} (\rho_{\text{opt}} - \chi(\Omega_1(\alpha_1(\mathbf{p}_1), \dots, \alpha_s(\mathbf{p}_s))))^2 d\mathbf{x}, \quad (2.4)$$

kde $\chi(\Omega_1)$ je charakteristická funkce oblasti feromagnetika.

Při numerickém řešení úlohy (2.4) narazíme na potřebu hledat průsečíky Béziových křivek s triangulací \mathcal{T} , na níž je definováno ρ_{opt} . Abychom se tomu vyhlí, zjemňujeme Béziovův řídicí polygon, který konverguje lineárně k Béziově křivce a jehož průsečíky s triangulací lze spočítat snadno. Poznamenejme také, že vždy, když Béziova křivka opustí nějaký trojúhelník $T^e \in \mathcal{T}$ či protne nový, je cenový funkcionál v úloze (2.4) nediferencovatelný. Přesto se ukazuje vhodné užívat metodu největšího spádu s konečnými diferencemi pro výpočet gradientu cenového funkcionálu. Výsledná aproximace tvaru je na Obr. 2.3. Hledali jsme tři Béziové křivky o celkovém počtu $n_1 + n_2 + n_3 = 19$ parametrů. Řešení úlohy (2.4) trvalo 26 s v 8 iteracích.

2.3 Hierarchická tvarová optimalizace

Aproximace tvarů z předchozího kroku nyní bude počátečním návrhem pro tvarovou optimalizaci. Rozložme výpočetní oblast podobně jako na Obr. 1.3 $\overline{\Omega} = \overline{\Omega_0(\alpha(\mathbf{p}))} \cup \overline{\Omega_1(\alpha(\mathbf{p}))}$, kde zkracujeme zápis $\alpha(\mathbf{p}) := (\alpha_1(\mathbf{p}_1), \dots, \alpha_s(\mathbf{p}_s))$. Pak úloha tvarové optimalizace odpo-

vídající (2.2) je

$$\begin{cases} \min_{\mathbf{p} \in \mathcal{P}} \left(\mathcal{I}(u) + p_V \max \{ |\Omega_1(\alpha(\mathbf{p}))| - V_{\max}, 0 \}^2 \right) \\ \text{vzhledem k} \\ \int_{\Omega_0(\alpha(\mathbf{p}))} \nu_0 \nabla u \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega_1(\alpha(\mathbf{p}))} \nu_1 (|\nabla u|^2, \mathbf{x}) \nabla u \nabla v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} Jv \, d\mathbf{x} \, v \, H_0^1(\Omega). \end{cases} \quad (2.5)$$

Úlohu (2.5) diskretizujeme metodou konečných prvků, kde triangulace dobře kopíruje tvary $\alpha(\mathbf{p})$. Numerické řešení je obdobné, jako bylo popsáno v (1.7) s tím rozdílem, že stavová úloha je nelineární a řešíme ji Newtonovou metodou podobně jako v případě topologické optimalizace. Citlivostní analýza, tedy výpočet $\nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{I}$, je však programátorsky náročnější, neboť tvary ovlivňující matici stavové úlohy vystupují v lokálních maticích \mathbf{B}^e , viz (2.3). Detailní odvození citlivostní analýzy, která je založena na adjungované Newtonově metodě, podáváme v článku [18].

Abychom vypočetli dostatečně přesné optimální tvary, je nutné diskretizovat úlohu velmi jemnou sítí. To však vede na velký počet iterací, neboť počáteční tvar je většinou velmi vzdálen optimálnímu. My se zde inspirováme multigradovým algoritmem pro řešení rozsáhlých soustav lineárních rovnic a aplikujeme podobnou myšlenku. Postupně řešíme hierarchii tvarově-optimalizačních úloh se zjemňujícími se diskretizacemi tak, že počáteční návrh na dané úrovni je optimalizovaný návrh z předchozí úlohy v hierarchii. Navíc na každé úrovni hierarchie konstruujeme z počátečního tvaru příslušný smoother a prolongator pro multigradové předpokládání linearizací stavových úloh. Poznamenejme, že budujeme také multigrad pro řešení pomocné úlohy (1.8), který ale nezávisí na návrhových proměnných \mathbf{p} . Hierarchická tvarová optimalizace je popsána v Algoritmu 1. V Tab. 2.1 uvádíme náročnost řešení. Pozorujeme, že vnější optimalizační iterace ani vnitřní Newtonovy/CG iterace téměř nerostou s jemnějšími diskretizacemi. Poznamenejme také, že náročnost citlivostní analýzy by značně vzrostla při použití numerických diferencí, tedy programátorské úsilí vložené do adjungované metody se vyplácí. Na Obr. 2.4 (vlevo) je výsledný tvar elektromagnetu. Ten potvrzuje inženýrskou intuici, neboť koresponduje s již vyrobeným elektromagnetem z Obr. 2.4 (vpravo).

Algoritmus 1 Hierarchická tvarová optimalizace

Dáno $\mathbf{p}_0^{(1)}$

Diskretizuj (2.5) na první úrovni

Řeš tvarovou optimalizací s využitím Newtonovy metody a LU-rozkladu pro stavovou úlohu: $\mathbf{p}_0^{(1)} \rightsquigarrow \mathbf{p}_{\text{opt}}^{(1)}$

Ulož LU rozklad pro multigrad $\mathbf{C}^{(1)} := \left[\mathbf{A}^{(1)}(\mathbf{p}_{\text{opt}}^{(1)}) \right]^{-1}$

for $l = 2, \dots$ **do**

Zjemni stejnoměrně síť a diskretizuj (2.5) na úrovni l

Prolonguj tvary: $\mathbf{p}_{\text{opt}}^{(l-1)} \rightsquigarrow \mathbf{p}_0^{(l)}$

Řeš tvarovou optimalizací s využitím Newtonovy metody, sdružených gradientů a multigradu pro stavovou úlohu: $\mathbf{p}_0^{(l)} \rightsquigarrow \mathbf{p}_{\text{opt}}^{(l)}$

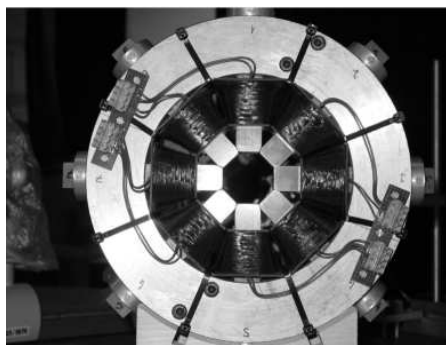
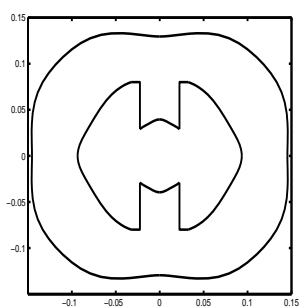
Aktualizuj multigrad $\rightsquigarrow \mathbf{C}^{(l)} \approx \left[\mathbf{A}^{(l)}(\mathbf{p}_{\text{opt}}^{(l)}) \right]^{-1}$

end for

Poznamenejme, že podobné výsledky jsme dosáhli s Dr. Krausem v konferenčním příspěvku [28], kde aplikujeme algebraický multigrad a deformace tvarů nedeformuje síť, ale

l	návrhové proměnné	optim. iterace	stavové proměnné	max. vnitřní iterace	CG iterace lin./nelin.	čas
1	19	10	1098	3	LU	32s
2	40	15	4240	3	3/14-25	2min 52s
3	82	9	16659	4	4-5/9-48	9min 3s
4	166	10	66037	4	4-6/13-88	49min 29s
5	334	13	262953	5	3-6/20-80	6h 36min

Tabulka 2.1: Hierarchická tvarová optimalizace



Obrázek 2.4: Optimalizovaný tvar z páté úrovně (vlevo); elektromagnet typu O-Ring (vpravo)

zobrazuje se pomocí váženého průměru do po částech konstantní reluktivity. I když se tímto dopoušíme tzv. variačního zločinu, což má za následek snížení rychlosti konečně-prvkové aproximace na $O(\sqrt{h})$ podobně, jako např. v metodě fiktivních oblastí, přesto se výsledný tvar shoduje s Obr. 2.4 (vlevo).

Kapitola 3

Multigrid–SMALE s aplikací na Stokesovu úlohu

Po návratu z druhé stáže v Linci na Katedru aplikované matematiky, VŠB–TU Ostrava jsem se více zapojil do výzkumných témat ve skupině prof. Zdeňka Dostála. Jedním z nich je vývoj kvalitativně nových a teoreticky podložených škálovatelných metod pro kvadratické programování s lineárními rovnostními a jednoduchými nerovnostními omezeními. Z toho v současnosti velmi těším, což se pokusím dokumentovat v kapitole 5.2. Mým úkolem bylo skloubit předpokládání multigridem a algoritmus semi–monotónních Lagrangeovských multiplikátorů pro kvadratické programování s lineárními rovnostními omezeními, tzv. SMALE (Semi–Monotonic Augmented Lagrangians for quadratic programming with linear Equality constraints), a aplikovat je na Stokesovu úlohu. Výsledkem je impaktovaný časopisecký článek [19] (IF 0.822), kde zobecňujeme původní algoritmus prof. Dostála [7, 8] z konečné dimenze do Hilbertových prostorů a ukazujeme, že teorie se formálně téměř nemění, stačí pouze nahradit Eukleidovské normy normami daných Hilbertových prostorů. Výsledky jsme rozšířili v konferenčním příspěvku [29] i na kvadratické programování s lineárními rovnostními a jednoduchými nerovnostními omezeními s aplikacemi na segmentaci obrazu a identifikaci parametrů. K časopisecké publikaci ještě zbývá dopracovat teorii.

Poznamenejme, že původně jsme algoritmus multigrid–SMALE aplikovali na (1.2) s regularizací $\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0$ ve slabém smyslu a po úspěšné implementaci jsem se jel pochlubit s výsledkem do Lince, načež mi prof. Langer po pár minutách mé přednášky ukázal, že jelikož proudová hustota je také bezdivergentní, pak Lagrangeovské multiplikátory jsou identicky nulové a SMALE se redukuje na metodu sdružených gradientů.

3.1 SMALE

Uvažujeme Hilbertovy prostory V (prostor primárních proměnných) a Q (prostor Lagrangeovských multiplikátorů), jejich duály značíme V' , resp. Q' , dualitní párování $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$, resp. $\langle \cdot, \cdot \rangle_Q$ a skalární součiny $(\cdot, \cdot)_V =: \langle I_V \cdot, \cdot \rangle_V$, resp. $(\cdot, \cdot)_Q =: \langle I_Q \cdot, \cdot \rangle_Q$ s Rieszovými operátory $I_V : V' \rightarrow V$, resp. $I_Q : Q' \rightarrow Q$. Uvažujme indukované normy $\|v\|_V := \sqrt{(v, v)_V}$, resp. $\|q\|_Q := \sqrt{(q, q)_Q}$ a

$$\|f\|_{V'} = \sqrt{\langle f, I_V^{-1} f \rangle_V}, \quad \text{resp.} \quad \|g\|_{Q'} = \sqrt{\langle g, I_Q^{-1} g \rangle_Q}, \quad (3.1)$$

díky Rieszovy věty. Normy (3.1) jsou právě základem ke správnému pochopení teorie i algoritmu z [7, 8]. Mějme dále symetrický eliptický omezený lineární operátor $A : V \rightarrow V'$ s konstantou elipticity $\lambda > 0$, $B : V \rightarrow Q'$ nechť je lineární omezený operátor s uzavřeným oborem hodnot, nechť $f \in V'$, $g \in \text{Im } B$ a nechť $B^T : Q \rightarrow V'$ značí adjungovaný operátor k B . Zajímá nás řešení následující úlohy kvadratického programování s lineárními rovnostními omezeními:

$$? = u^* = \arg \min_{u \in V} h(u) \quad \text{vzhledem k} \quad Bu = g, \quad (3.2)$$

kde $h(u) := (1/2)\langle Au, u \rangle_V - \langle f, u \rangle_V$. Podmínky optimality dávají ekvivalentní sedlobodovou úlohu

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^* \\ p^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

kde $p^* \in Q$ jsou tzv. Lagrangeovy multiplikátory, které v naší formulaci můžou být, na rozdíl od u^* , nejednoznačné, jelikož nevyžadujeme $\text{Ker } B^T = \{0\}$. Náš přístup dokonce umožňuje, aby A bylo eliptické pouze na ortogonálním doplňku ke $\text{Ker } B$. Tyto úlohy se vyskytují v ustáleném nestlačitelném proudění (Stokesova úloha), v úlohách s periodickými okrajovými podmínkami, v metodách rozložení oblasti, viz též kapitola 5.2, nebo v rozsáhlých optimalizačních úlohách. Do úlohy (3.2) lze zahrnout i jednoduché nerovnostní vazby, což jsme aplikovali na dva typy úloh v příspěvku [29].

Náš algoritmus oproti Uzavovu algoritmu v párování s multigridem [37] má výhodu v tom, že nevyžaduje inverzi A na celém V , ani regularitu Schurova komplementu $S := BA^{-1}B^T$, což by pro Stokesovu úlohu znamenalo normování tlaků, natož nevyžaduje konstrukci multigridového předpodmiňovače pro S . Algoritmus je založen na formulaci pomocí rozšířených Lagrangianů. Pro $\rho > 0$ zavedme rozšířený Lagrangian

$$L(u, p, \rho) := h(u) + \langle Bu - g, p \rangle_Q + \frac{\rho}{2} \|Bu - g\|_{Q'}^2,$$

jehož diferenciál je $F(u, p, \rho) := \nabla_u L(u, p, \rho) = Au - f + B^T p + \rho B^T I_Q^{-1}(Bu - g)$. Metoda SMALE pro řešení úlohy (3.3) je popsána v Algoritmu 2, kde $F^{(0)} := \|F(u^{(0)}, p^{(0)}, \rho^{(0)})\|_{V'}$, $G^{(0)} := \|Bu^{(0)} - g\|_{Q'}$.

Označme $s \geq 0$ nejmenší celé číslo takové, že $\beta^s \rho^{(0)} \geq \nu^2/\lambda$ a nechť

$$C := \frac{2}{\rho^{(0)}} \left[h(u^*) + L(u^{(0)}, 0, \rho^{(0)}) + (1 + s) \frac{\eta^2}{2\lambda} \right].$$

Z teorie článku [8] pak plyne, že počet iterací Algoritmu 2 nepřesáhne

$$k \leq \frac{C}{\min\{\nu^{-1}\varepsilon, \varepsilon_{\text{feas}}\}^2} + 1 \quad \text{a penalta je omezená} \quad \rho^{(k)} \leq \beta^s \rho^{(0)}. \quad (3.4)$$

V odhadech (3.4) si všimněme, že pokud optimálně, např. multigridem, předpředmíníme operátor A , pak $\lambda \approx 1$ nezávisle na dimenzi úlohy, a tedy počet vnějších iterací je stejnoměrně omezený. Padá také mýtus, že penalta $\rho^{(k)}$ diverguje, dokonce si ji můžeme libovolně omezit volbou β a ν . Proto penaltu raději nazýváme regularizací. Bohužel však v (3.4) je odhad počtu iterací $O(\varepsilon^{-2})$, přičemž optimální by bylo $O(\log \varepsilon)$. Naštěstí $O(\log \varepsilon)$ pozorujeme ve většině numerických experimentů. V případě zhoršující se konvergence stále můžeme zvýšit penaltu, neboť na ní je odhad (3.4) také nepřímo úměrný.

Algoritmus 2 Semi–monotónní rozšířené Lagrangiany s adaptivním řízením přesnosti

Dáno $\eta > 0$, $\beta > 1$, $\nu > 0$, $\rho^{(0)} > 0$, $p^{(0)} := 0$, rel. přesnosti $\varepsilon > 0$ a $\varepsilon_{\text{feas}} > 0$

for $k := 0, 1, 2, \dots$ **do**

Najdi $u^{(k)} : \|F(u^{(k)}, p^{(k)}, \rho^{(k)})\|_{V'} \leq \min \{ \nu \|Bu^{(k)} - g\|_{Q'}, \eta \}$

if $\|F(u^{(k)}, p^{(k)}, \rho^{(k)})\|_{V'} \leq \varepsilon F^{(0)}$ **and** $\|Bu^{(k)} - g\|_{Q'} \leq \varepsilon_{\text{feas}} G^{(0)}$ **then**

break

end if

$p^{(k+1)} := p^{(k)} + \rho^{(k)} I_Q^{-1} (Bu^{(k)} - g)$

if $k > 0$ **and** $L(u^{(k)}, p^{(k)}, \rho^{(k)}) < L(u^{(k-1)}, p^{(k-1)}, \rho^{(k-1)}) + \frac{\rho^{(k)}}{2} \|Bu^{(k)} - g\|_{Q'}^2$ **then**

$\rho^{(k+1)} := \beta \rho^{(k)}$

else

$\rho^{(k+1)} := \rho^{(k)}$

end if

end for

$u^{(k)}$, $p^{(k)}$ je přibližným řešením (3.3).

3.2 Multigrid–SMALE

Uvažujme nyní konečně–dimenzionální aproximaci úlohy (3.3). Zavedme symetrické pozitivně–definitní předpokmiňovače \widehat{A}^{-1} a \widehat{I}_Q^{-1} matic A a I_Q a jejich symetrický rozklad $\widehat{A}^{-1} = \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-1} \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-T}$, $\widehat{I}_Q^{-1} = \widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-1} \widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-T}$. Úloha (3.3) se pak změní následovně:

$$\begin{pmatrix} \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-1} A \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-T} & \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-1} B^T \widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-T} \\ \widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-1} B \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-T} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{u}^* \\ \widehat{p}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-1} f \\ \widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-1} g \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} u^* &:= \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-T} \widehat{u}^*, \\ p^* &:= \widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-T} \widehat{p}^*. \end{aligned}$$

Předpodmíněný Lagrangian je pak $\widetilde{L}(u, p, \rho) := h(u) + (Bu - g)^T p + \frac{\rho}{2} (Bu - g)^T \widehat{I}_Q^{-1} (Bu - g)$, jeho diferenciál je $\widetilde{F}(u, p, \rho) := Au - b + B^T p + \rho B^T \widehat{I}_Q^{-1} (Bu - g)$. Jejich duální normy (3.1) se změní takto:

$$\begin{aligned} \|\widetilde{F}(u, p, \rho)\|_{\widehat{V}'} &:= \sqrt{\widetilde{F}(u, p, \rho)^T \widehat{A}^{-1} \widetilde{F}(u, p, \rho)}, \\ \|Bu - g\|_{\widehat{Q}'} &:= \sqrt{(Bu - g)^T \widehat{I}_Q^{-1} (Bu - g)}. \end{aligned}$$

V Algoritmu 2 aplikovaném na předpodmíněnou sedlo–bodovou úlohu se pak postupně zamění $\|F(u^{(k)}, p^{(k)}, \rho^{(k)})\|_{V'}$, $\|Bu^{(k)} - g\|_{Q'}$, I_Q^{-1} a L za $\|\widetilde{F}(u^{(k)}, p^{(k)}, \rho^{(k)})\|_{\widehat{V}'}$, $\|Bu^{(k)} - g\|_{\widehat{Q}'}$, \widehat{I}_Q^{-1} a \widetilde{L} .

Zvolíme-li multigridové předpodmínění, pak je známo [3], že existují $\widehat{\gamma}, \widehat{\delta} \in [0, 1)$ nezávisle na diskretizaci tak, že pro spektra platí

$$\sigma(\widehat{A}^{-1} A) = \sigma(\widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-1} A \widehat{A}_{\frac{1}{2}}^{-T}) \subset [1 - \widehat{\gamma}, 1]$$

a

$$\sigma(\widehat{I}_Q^{-1} I_Q) = \sigma(\widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-1} I_Q \widehat{I}_{Q\frac{1}{2}}^{-T}) \subset [1 - \widehat{\delta}, 1].$$

level l	$\dim V_l$	$\dim Q_l$	vnější/PCG iterace	celkové PCG iterace
1	56	32	6 /1,0,1,2,4,8	16
2	208	128	6 /1,0,1,2,5,13	22
3	800	512	6 /1,0,1,2,5,14	23
4	3136	2048	6 /1,0,1,2,6,14	24
5	12416	8192	6 /1,0,1,2,6,15	25
6	49418	32768	6 /1,0,1,2,6,16	26

Tabulka 3.1: Numerická škálovatelnost SMALE pro Stokesovu úlohu

Máme tedy stejnoměrně ohraničený počet iterací i velikost penalty

$$\rho^{(k)} \leq \rho_{\max} := \max \left\{ \frac{\beta \nu^2}{1 - \widehat{\gamma}}, \rho^{(0)} \right\},$$

a tudíž pro řešení pomocných eliptických úloh v prvním kroce iterace Algoritmu 2 s maticí $A_\rho := A + \rho B^T \widehat{I}_Q^{-1} B$ můžeme použít např. předpodmiňovač $\widehat{A}_\rho := (1 + \rho_{\max} \|B\|_{V \rightarrow Q'}^2) \widehat{A}$. Pak $\sigma(\widehat{A}_\rho A_\rho) \subset \left[\frac{1 - \widehat{\gamma}}{1 + \rho_{\max} \|B\|_{V \rightarrow Q'}^2}, 1 \right]$.

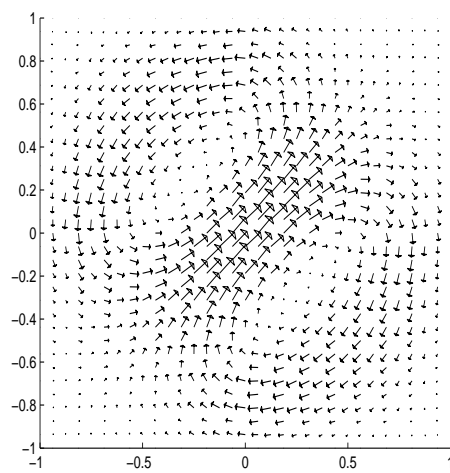
3.3 Aplikace na Stokesovu úlohu

Multigridem předpodmíněný Algoritmus 2 demonstrujeme na řešení 2–dimenzionální Stokesovy úlohy s $\Omega := (-1, 1)^2$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) := \text{sign}(x_1) \text{sign}(x_2) (1, 1) \in [L^2(\Omega)]^2$

$$\begin{aligned} -\Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} & \text{v } \Omega, \\ \text{div } \mathbf{u} &= 0 & \text{v } \Omega, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{0} & \text{na } \partial\Omega. \end{aligned}$$

Slabá formulace této úlohy vede na úlohu (3.3) s $V := [H_0^1(\Omega)]^2$, $Q := L^2(\Omega)$, $\langle Au, v \rangle_V := \int_\Omega \sum_{i=1}^2 \nabla u_i \nabla v_i \, d\mathbf{x}$, $\langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle_V := \int_\Omega \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x}$, $\langle B\mathbf{u}, q \rangle_Q := \int_\Omega \text{div}(\mathbf{u})q \, d\mathbf{x}$, $g := 0$. Poznamenejme, že výsledné rychlosti \mathbf{u} jsou jednoznačné a stabilní, ale tlaky p jsou nejednoznačné až na referenční hydrostatický tlak.

Pro diskretizaci nad vnořenou posloupností stejnoměrně se zjemňujících triangulací používáme nekonformní lineární Crouzeix–Raviartovy konečné prvky pro rychlosti a pro trojúhelníkových konstantní bázi pro tlaky. Pak je matice I_Q diagonální a $\widehat{I}_Q^{-1} := I_Q^{-1}$. Geometrický multigríd pro $A_\rho := A + \rho B^T I_Q^{-1} B$ tvoříme podle [4, 37], kde se používá nekonformní prolonační operátor. Vyhlažovací operátor je symetrický blokový Gauss–Seidel se 3 iteracemi. V Tabulce 3.1 prezentujeme asymptoticky omezený počet vnějších i vnitřních iterací SMALE. Volili jsme parametry $\eta := 1$, $\beta := 10$, $\rho^{(0)} := 1$, $\nu := 1$ a relativní přesnosti $\varepsilon := \varepsilon_{\text{feas}} := 10^{-3}$. Na Obr. 3.1 je vypočtené rychlostní pole.



Obrázek 3.1: Výsledné rychlostní pole

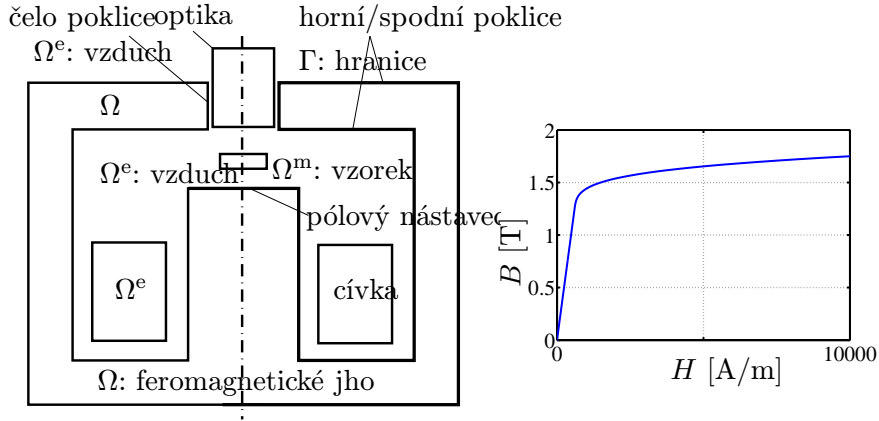
Kapitola 4

Tvarová optimalizace v nelineární magnetostatice pomocí párování FEM–BEM

Za následující výzkumné téma, které vyústilo v impaktované články [20] (IF 1.28), jež vyšel ve zvláštním čísle věnovaném konferenci JEMS 2008 v Dublinu, a [21] (IF 0.93), jež vyjde ve zvláštním čísle věnovaném konferenci Modelling 2009 v Rožnově pod Radhoštěm, vděčím spoluautorům Doc. Mgr. Kamilu Postavovi, Ph.D. a Ing. Ondřeji Životskému, Ph.D., kteří mi poskytli novou geometrii elektromagnetu pro výzkum magneto–optických jevů a posléze vyrobili mnou optimalizovaný tvar. Neméně však za téma vděčím Doc. RNDr. Jiřímu Bouchalovi, Ph.D. díky jeho hezké sérii přednášek na téma "Úvod do BEM" [5]. Poslední kapka inspirace přišla během konference ENUMATH 2007 ve Štýrském Hradci, kde mě nadchly vynikající výsledky skupiny prof. Dr. Olafa Steinbacha z tamní univerzity, který v roce 2006 týden přednášel o BEM na naší katedře. Konečně velké díky patří kolegyni Ing. Marii Sadowské, Ph.D., která mě již během konference ochotně zasvětila do hraniční formulace a implementace BEM pro magnetostatiku a do jejichž prací [34, 35] často nahlížím. Od té doby časté konzultace s Jirkou a Majkou mě rychle vedou k dalším výsledkům. Asi jsem po deseti letech pochopil tehdy v Linci módní slovo "synergie".

Motivace pro použití BEM místo FEM je zřejmá z podstaty elektromagnetismu. Jedná se většinou o neomezená pole, tudíž umělé ořezání výpočetní oblasti ve FEM je nepřirozené a zavedená chyba se špatně odhaduje. Navíc pro lineární prostředí, jako např. vzduch či budící cívky, lze úlohu redukovat na hranici výpočetní oblasti. Praktická realizace BEM pro jemné diskretizace však donedávna nebyla možná, neboť výsledné matice jsou husté a, byť redukuje dimenzi úlohy, BEM má větší paměťové i časové nároky než např. multigríd–FEM. Naštěstí bylo vyvinuto několik efektivních technik [33, 12, 1, 38], které komprimují matice a redukují paměťovou i časovou náročnost z $O(n^2)$ na $O(n \log n)$. Další nevýhoda BEM je její technicky náročná implementace, neboť máme vyčísřit integrály ze singulárních jader, které většinou nelze integrovat analyticky. V pracích [9, 36] je rozpracována technika regularizace jader na analytické funkce s následnou aplikací Gaussovy kvadratury.

FEM je i v elektromagnetismu nezastupitelná v oblastech s nelineárními materiálovými vztahy. Proto je párování FEM–BEM [6] vhodným přístupem pro řešení mnoha inženýrských úloh. V magnetostatice je možno použít skalární magnetický potenciál ve vzduchu a vektorový magnetický potenciál v cívkách a feromagnetiku. To vede na párování BEM pro Laplaceův operátor na vnější oblasti a FEM s Nédélecovými prvky v cívkách a fero-



Obrázek 4.1: Osově–symetrická geometrie elektromagnetu (vlevo), B – H křivka použitého materiálu AREMA (vpravo)

magnetiku, viz [15]. My uijeme sice technicky náročnější konstrukci, která ale umožňuje realizovat BEM i v cívkách, viz [14], a Nédélecovy FEM prvky budou použity pouze v nelineárním feromagnetiku.

4.1 Párování FEM–BEM v nelineární magnetostatice

Uvažujeme geometrii stejnosměrného elektromagnetu z Obr. 4.1 (vlevo). Nechť $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ je jednoduše souvislá Lipschitzovská oblast feromagnetika s vnější jednotkovou normálou \mathbf{n} ke $\Gamma := \partial\Omega$. Označme $\Omega^e := \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}$ vnější oblast vzduchu a cívek. Nechť dále \mathbf{u} a \mathbf{u}^e označují magnetický vektorový potenciál definovaný v Ω a Ω^e , $\nu_0 := 1/(4\pi 10^{-7})$ a $\nu_r(t)$ nechť jsou reluktivita vzduchu, resp. nelineární reluktivita feromagnetika, která je určena tzv. B – H křivkou $H = \nu_r(B)B$, viz Obr. 4.1 (vpravo). Nechť \mathbf{J} označuje bezdivergentní proudovou hustotu s kompaktním nosičem v Ω^e . Pak stavová úloha magnetostatiky je následující:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{curl}(\nu_r(|\operatorname{curl} \mathbf{u}|) \operatorname{curl} \mathbf{u}) &= \mathbf{0} && \text{v } \Omega, \\
 \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 && \text{v } \Omega, \\
 \operatorname{curl} \operatorname{curl} \mathbf{u}^e &= \mathbf{J}/\nu_0 && \text{v } \Omega^e, \\
 \operatorname{div} \mathbf{u}^e &= 0 && \text{v } \Omega^e, \\
 \mathbf{n} \times ((\mathbf{u} - \mathbf{u}^e) \times \mathbf{n}) &= \mathbf{0} && \text{na } \Gamma, \\
 (\nu_r(|\operatorname{curl} \mathbf{u}|) \operatorname{curl} \mathbf{u} - \operatorname{curl} \mathbf{u}^e) \times \mathbf{n} &= \mathbf{0} && \text{na } \Gamma, \\
 \mathbf{u}^e(\mathbf{x}) &= O(|\mathbf{x}|^{-1}) && \text{v } \infty.
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Abychom mohli formulovat (4.1) variačně, použijeme techniku navrženou v [14], která je založena na následující Stratton–Chuoově reprezentační formuli pro vnější pole:

$$\mathbf{u}^e = \Psi_M(\gamma_D^e \mathbf{u}^e) - \Psi_A(\gamma_N^e \mathbf{u}^e) - \nabla \Psi_V(\gamma_n^e \mathbf{u}^e) + \mathbf{G}(\mathbf{J}/\nu_0), \tag{4.2}$$

kde postupně uvažujeme Dirichletův, Neumannův a normálový vnější operátor stop na Γ : $\gamma_D^e \mathbf{u}^e(\mathbf{y}) := \mathbf{n}(\mathbf{y}) \times (\mathbf{u}^e(\mathbf{y}) \times \mathbf{n}(\mathbf{y}))$, $\gamma_N^e \mathbf{u}^e(\mathbf{y}) := \operatorname{curl}(\mathbf{u}^e(\mathbf{y})) \times \mathbf{n}(\mathbf{y})$ a $\gamma_n^e \mathbf{u}^e(\mathbf{y}) := \mathbf{u}^e(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y})$ a kde pro $\mathbf{x} \notin \Gamma$ definujeme skalární potenciál jednoduché vrstvy

$$\Psi_V(\phi(\mathbf{y}))(\mathbf{x}) := \int_{\Gamma} \phi(\mathbf{y}) E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dS(\mathbf{y}),$$

vektorový potenciál jednoduché vrstvy

$$\Psi_A(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y}))(\mathbf{x}) := \int_{\Gamma} \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y}) E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dS(\mathbf{y}),$$

vektorový potenciál dvojvrstvy

$$\Psi_M(\mathbf{u}(\mathbf{y}))(\mathbf{x}) := \mathbf{curl}(\Psi_A(\mathbf{n}(\mathbf{y}) \times \mathbf{u}(\mathbf{y}))),$$

a vektorový Newtonův potenciál

$$\mathbf{G}(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y}))(\mathbf{x}) := \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y}) E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dS(\mathbf{y}),$$

přičemž pro $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ je $E(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := 1/(4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{y}|)$ fundamentální řešení Laplaceovy rovnice. Nyní lze správnou volbou prostoru testovacích funkcí, viz [14], a standartní technikou odvodit tzv. Caldéronův projektor, resp. Steklov–Poincarého operátor, který vztahuje vnější Dirichletova data $\gamma_D^e \mathbf{u}^e$ s vnějšími Neumannovy daty $\gamma_N^e \mathbf{u}^e$. Konečně lze odtud, podobně jako v [6], za použití Greenovy věty a předposlední rovnice v (4.1) spárovat první integrální rovnici, která vzešla aplikací γ_N^e na (4.2), s variační rovnicí pro vnitřní pole \mathbf{u} . To vede k následujícímu blokově antisymetrickému systému:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}(\mathbf{u}) - \mathbf{N} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B}^T & \mathbf{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \gamma_N^e \mathbf{u}^e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

na prostorech $\mathbf{H}(\mathbf{curl}; \Omega) \times \mathbf{H}_{\parallel}^{-1/2}(\text{div}_{\Gamma} 0; \Gamma)$. Tyto prostory lze diskretizovat Nédélecovými lineárními hranovými prvky nad čtyřstěny, resp. konstantními bezdivergentními Raviart–Thomasovými prvky nad trojúhelníky. Operátory v (4.3) jsou po řadě nelineární FEM operátor

$$\langle \mathbf{Q}(\mathbf{u}), \mathbf{v} \rangle_{\Omega} := \int_{\Omega} \nu_r (|\mathbf{curl}(\mathbf{u})|^2) \mathbf{curl}(\mathbf{u}) \mathbf{curl}(\mathbf{v}) d\mathbf{x},$$

párovací FEM–BEM operátory $\mathbf{N}(\mathbf{u}) := \gamma_N^e \Psi_M(\mathbf{u})$ a $\mathbf{B}(\boldsymbol{\lambda}) := \gamma_N^e \Psi_A(\boldsymbol{\lambda})$, BEM operátor jednoduché vrstvy $\mathbf{A}(\boldsymbol{\lambda}) := \gamma_D^e \Psi_A(\boldsymbol{\lambda})$ a BEM Newtonovy operátory $\mathbf{f} := \gamma_N^e \mathbf{G}(\mathbf{J}/\nu_0)$, $\mathbf{g} := \gamma_D^e \mathbf{G}(\mathbf{J}/\nu_0)$.

Jelikož uvažujeme osovou symetrií geometrie i proudových hustot, výpočetní oblast je $\omega := \{(r, z) \in \mathbb{R}^2 : \mathbf{x}(r, z, t) \in \Omega\}$, kde $\mathbf{x}(r, z, t) := (r \cos t, r \sin t, z)$, $r \geq 0$, $t \in [-\pi, \pi]$. Označme $\boldsymbol{\varphi}(t) := (-\sin t, \cos t, 0)$, pak $\mathbf{J}(\mathbf{x}(r, z, t)) := J \boldsymbol{\varphi}(t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = u(r, z) \boldsymbol{\varphi}(t)$, $\mathbf{u}^e(\mathbf{x}) = u^e(r, z) \boldsymbol{\varphi}(t)$, $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{y}) = \lambda(p) \boldsymbol{\varphi}(t)$ pro $\mathbf{y}(p, t) := \mathbf{x}(r(p), z(p), t) \in \Gamma$ s $r(p) \geq 0$ a $p \in [0, 1]$. Vektorové operátory \mathbf{Q} a \mathbf{B} pak dostávají následující skalární podobu

$$\langle \mathbf{Q}(w)u, v \rangle_{\omega} := 2\pi \int_{\omega} r \nu_r \left(\left| \widetilde{\mathbf{curl}}(w(r, z)) \right| \right) \widetilde{\mathbf{curl}}(u(r, z)) \widetilde{\mathbf{curl}}(v(r, z)) dS(r, z),$$

kde $\widetilde{\mathbf{curl}}(u(r, z)) := \left(-\frac{\partial u(r, z)}{\partial z}, \frac{1}{r} \frac{\partial [u(r, z)r]}{\partial r} \right)$,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{B}(\boldsymbol{\lambda}), v \rangle_{\partial\omega} &:= -\pi \int_0^1 \lambda(p) v(\boldsymbol{\eta}(p)) r(p) |\boldsymbol{\eta}'(p)| dp \\ &+ \int_0^1 \int_0^1 \int_0^{\pi} \frac{\lambda(p) v(\boldsymbol{\eta}(s)) r(p) r(s) |\boldsymbol{\eta}'(p)|}{d(p, s, \alpha)^{3/2}} \widetilde{\boldsymbol{\eta}}'(s) \zeta(p, s, \alpha) d\alpha ds dp \end{aligned}$$

přičemž $d(p, s, \alpha) := |\boldsymbol{\eta}(p) - \boldsymbol{\eta}(s)|^2 + 2r(p)r(s)(1 - \cos \alpha)$, $\boldsymbol{\eta}(p) := (r(p), z(p))$, $\tilde{\boldsymbol{\eta}}(p) := (-z(p), r(p))$, $\boldsymbol{\zeta}(p, s, \alpha) := (r(s) \cos \alpha - r(p), (z(s) - z(p)) \cos \alpha)$. Podobně se zjednoduší \mathbf{N} , \mathbf{A} , \mathbf{f} a \mathbf{g} na N , A , f a g . Osově–symetrická formulace pak vede na diskretizaci u Lagrangeovými uzlovými prvky nad triangulací ω a na diskretizaci λ po úsečkách konstantní nad $\partial\omega$. Diskretizovaný nelineární systém řešíme Newtonovou metodou v kombinaci s Gaussovou eliminací.

4.2 Gaussova kvadratura singulárních jader

Uvažujme dvě úsečky S_i, S_j z diskretizace $\partial\omega$ s parametrizací $S_i := \{\boldsymbol{\eta}_i(p) := (r_i(p), z_i(p)) : p \in [0, 1]\}$, kde $r_i(p) := a_i p + b_i$, $z_i(p) := c_i p + d_i$, $a_i, b_i, c_i, d_i \in \mathbb{R}$. Diskretizované osově–symetrické operátory N , B a A mají následující typ singularit:

$$\int_0^1 \int_0^1 \int_0^\pi \frac{n^{(i,j)}(p, s, \alpha)}{d^{(i,j)}(p, s, \alpha)^{r/2}} d\alpha ds dp, \quad r \in \{1, 3\},$$

přičemž jádro $k^{(i,j)}(p, s, \alpha) := n^{(i,j)}(p, s, \alpha)/d^{(i,j)}(p, s, \alpha)^{r/2}$ je Cauchyovsky–singulární pro $\boldsymbol{\eta}_i(p) = \boldsymbol{\eta}_j(s)$ a $\alpha = 0$. Singularita nastane v případě identických úseček $i = j$, nebo právě jednoho společného vrcholu. Podle návodu [36] se singularita odstraní zavedením lokálních souřadnic, rozdělením integrační oblasti do simplexů a Duffyho substitucí [9]. Demonstrujme si to na případě identických úseček a operátoru B , jehož příspěvky jsou

$$\int_0^1 \int_0^1 \int_0^\pi \frac{f_1^{(i)}(p, s)(1 - \cos \alpha)}{\sqrt{[(a_i^2 + c_i^2)(p - s)^2 + 2f_2^{(i)}(p, s)(1 - \cos \alpha)]^3}} d\alpha ds dp, \quad (4.4)$$

kde $f_1^{(i)}(p, s) := \xi v(s) c_i r_i(p)^2 r_i(s) \sqrt{a_i^2 + c_i^2}$ s $v(s) := as + b$, $f_2^{(i)} := 2r_i(p)r_i(s)$. Zavedme $z := p - s$, $\pi u := \alpha$ a označme jádro v (4.4) jako $\tilde{k}^{(i)}(p, s, \alpha)$. Jednoduché úpravy dávají

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_0^1 \int_0^\pi \tilde{k}^{(i)}(p, s, \alpha) d\alpha ds dp &= \pi \int_0^1 \int_{p-1}^p \int_0^1 \tilde{k}^{(i)}(p, p - z, \pi u) du dz dp \\ &= \pi \int_0^1 \int_0^1 \int_0^{1-z} \left(\tilde{k}^{(i)}(p, p + z, \pi u) + \tilde{k}^{(i)}(p + z, p, \pi u) \right) dp du dz. \end{aligned}$$

Poslední integrál je singulární pro $z = u = 0$, což spravíme rozdělením oblasti a Duffyho substitucí $\tau := z$, $u := \tau\eta$, resp. $\tau := u$, $z := u\eta$, a to následovně:

$$\begin{aligned} &= \int_0^1 \int_0^z \int_0^1 \tilde{K}^{(i)}(\xi, z, u) d\xi du dz + \int_0^1 \int_0^u \int_0^1 \tilde{K}^{(i)}(\xi, z, u) d\xi dz du \\ &= \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \tau K^{(i)}(\xi, \tau, \eta) d\xi d\eta d\tau, \end{aligned} \quad (4.5)$$

kde $\tilde{K}^{(i)}(\xi, z, u) := \pi(1 - z) \left(\tilde{k}^{(i)}(p, p + z, \pi u) + \tilde{k}^{(i)}(p + z, p, \pi u) \right)$ po substituci $p := (1 - z)\xi$, a kde $K^{(i)}(\xi, \tau, \eta) := \tilde{K}^{(i)}(\xi, \tau, \tau\eta) + \tilde{K}^{(i)}(\xi, \tau\eta, \tau)$. Nyní vidíme, že jak $\tau \tilde{K}^{(i)}(\xi, \tau, \tau\eta)$, tak i $\tau \tilde{K}^{(i)}(\xi, \tau\eta, \tau)$ jsou analytické v $[0, 1]^3$, ledaže $r_i(0) = 0$ nebo $r_i(1) = 0$, přičemž jsme využili

$$1 - \cos \alpha = \alpha^2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\alpha^{2(n-1)}}{(2n)!}, \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1 - \cos \alpha}{\alpha^2} = \frac{1}{2}.$$

To nás opravňuje použít tenzorově Gaussovu kvadraturu na druhý řádek v (4.5). Zbývá uvažovat případ $r_i(p) = 0$ pro $p \in \{0, 1\}$ a $p = s$, tj. příspěvky úseček s krajním bodem na ose r . Tam má ale integrand v (4.4) následující odstranitelnou singularitu: $(1 - \cos \alpha) \lim_{p \rightarrow 0_+} f_1^{(i)}(p, p) / \sqrt{f_2^{(i)}(p, p)^3} = \xi v(p) c_i \sqrt{a_i^2 + c_i^2} (1 - \cos \alpha) / \sqrt{8}$.

4.3 Tvarová optimalizace

Mějme dānu kompaktní množinu funkcí řídící hranici Γ , označme α -závislé řešení (4.3) jako $(\mathbf{u}(\alpha), \boldsymbol{\lambda}(\alpha))$ a necht' $\mathbf{B}^e(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) := \mathbf{curl}(\mathbf{u}^e)$ je vnější pole magnetické indukce spočtené pomocí (4.2) v oblasti $\Theta := \Omega^m \cup \Omega^o \subset \Omega^e$, viz Obr. 4.1. Necht' dále $\mathcal{I} : [L^2(\Theta)]^3 \rightarrow \mathbb{R}$ a $\mathcal{C} : [L^2(\Theta)]^3 \rightarrow \mathbb{R}$ jsou nelineární cenový funkcionāl, resp. funkcionāl omezení. Úloha abstraktní tvarové optimalizace pak vypadā následovně:

$$\min_{\alpha \in \mathcal{U}} \mathcal{I}(\mathbf{B}^e(\mathbf{u}(\alpha), \boldsymbol{\lambda}(\alpha))) \quad \text{vzhledem k (4.3) a } \mathcal{C}(\mathbf{B}^e(\mathbf{u}(\alpha), \boldsymbol{\lambda}(\alpha))) \leq 0. \quad (4.6)$$

Úlohu (4.6) aproximujeme pomocí

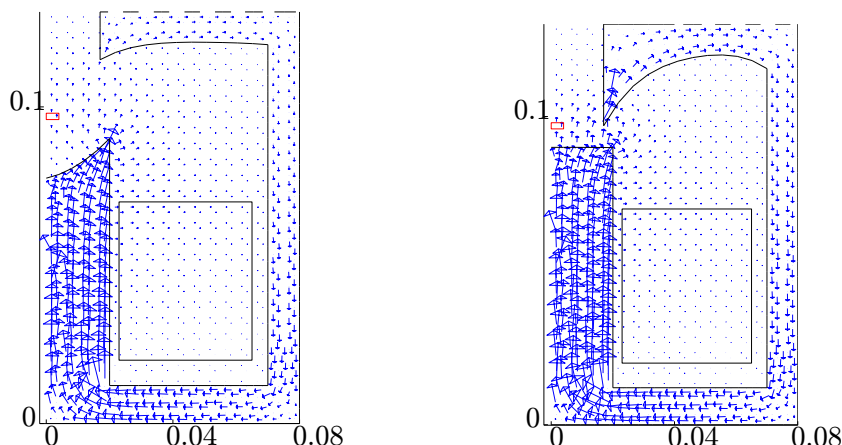
$$\min_{\mathbf{p} \in \mathcal{P}} \mathcal{J}(\mathbf{p}) \quad \text{vzhledem k (4.3) a } \mathcal{D}(\mathbf{p}) \leq 0, \quad (4.7)$$

kde \mathbf{p} je vektor Bézierových parametrů řídících hranici Γ a diskretizovanou úlohu (4.3), množina přípustných parametrů $\mathcal{P} := \{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d : \mathbf{P}\mathbf{p} \leq \mathbf{q}\}$ zahrnuje podmínky nepronikání Bézierových řídících polygonů popsané $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{e \times d}$ a $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^e$. Dále $F : \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{U}$ označuje Bézierovu parametrizaci a $\mathcal{J}(\mathbf{p}) := \mathcal{I}(\mathbf{B}^e(\mathbf{u}(F(\mathbf{p})), \boldsymbol{\lambda}(F(\mathbf{p}))))$ a $\mathcal{D}(\mathbf{p}) := \mathcal{C}(\mathbf{B}^e(\mathbf{u}(F(\mathbf{p})), \boldsymbol{\lambda}(F(\mathbf{p}))))$ jsou diskretizace cenového funkcionálu a funkcionálu omezení, jejichž výpočet probíhā podobně jako v (1.7), a to:

$$\begin{array}{ccccccc} \mathbf{p} & \xrightarrow{F} & \alpha & \xrightarrow{(1.8)} & \mathbf{x} & \xrightarrow[\text{Gaussova kvadratura}]{\text{sestavení (4.3)}} & Q, N, B, A, f, g \\ & & & & \downarrow & & \text{Newton-Gauss} \downarrow (4.3) \\ & & & & \mathbf{B}^e & \xleftarrow[\text{Gaussova kvadratura}]{\mathbf{B}^e := \mathbf{curl}(\mathbf{u}^e) \text{ pomocí (4.2)}} & \mathbf{u}, \boldsymbol{\gamma}_N^e \mathbf{u}^e \\ & & \mathcal{J}(\mathbf{p}), \mathcal{D}(\mathbf{p}) & \xleftarrow{\mathcal{I}, \mathcal{C}} & & & \end{array}$$

Úlohu (4.7) řešíme metodou největšího spādu v rámci aktivní množiny. K tomu v každém kroce linearizujeme omezení \mathcal{D} a používāme projekci na konvexní kužel linearizovaných nerovnostních omezení. Algoritmus projekce postupně přidāvā do aktivní množiny nejbližší narušenou vazbu a projektuje na ni nepřipustný tvar. Projekce je levnā, neboť počet vazeb ani počet návrhových proměnných nepřesāhne dvacet. Pro výpočet gradientu $\nabla \mathcal{J}$ a $\nabla \mathcal{D}$ používāme opět adjungovanou metodu semi-analytické citlivostní analýzy, jejíž náročnost odpovídā jednomu řešení stavové úlohy (4.3) s jinou pravou stranou a zahrnuje také derivace příspěvků do BEM-matic typu (4.5) podle uzlů diskretizace, tj. a_i, b_i, c_i, d_i .

Cílem optimalizace je vyvinout tvar feromagnetického jādra tak, že elektromagnet bude vhodný pro měření feromagnetických jevů vzorků umístěných v oblasti Ω^m , viz Obr. 4.1 (vlevo). K tomu potřebujeme maximalizovat průměrnou osovou složku \mathbf{B}^e v Ω^m a zároveň minimalizovat homogenitu, kterou předepisujeme jako rozptyl osové složky \mathbf{B}^e v Ω^m a rozptyl radiální složky od nuly. Bohužel jsou tyto kritéria protichůdnā. Z naší zkušenosti



Obrázek 4.2: Výsledné tvary (v metrech) a magnetická pole pro minimalizaci κ^2 (vlevo) a maximalizaci B^{avg} vzhledem ke $\kappa \leq \kappa^{\text{req}}$ (vpravo)

se zdá rozumné řešit tyto dvě optimalizační úlohy odděleně. Začneme z tvaru na Obr. 4.1 (vlevo) a minimalizujeme rozptyl

$$\kappa^2 := \frac{1}{|\Omega^{\text{m}}| |B^{\text{avg}}|^2} \int_{\Omega^{\text{m}}} \left[(B_1^{\text{e}}(r, 0, z))^2 + (B_3^{\text{e}}(r, 0, z) - B^{\text{avg}})^2 \right] dV(r, z, t),$$

kde $|\Omega^{\text{m}}|$ je objem Ω^{m} a kde

$$B^{\text{avg}} := \frac{1}{|\Omega^{\text{m}}|} \int_{\Omega^{\text{m}}} B_3^{\text{e}}(r, 0, z) dV(r, z, t).$$

Pak předepíšeme nelineární omezení $\mathcal{D} := \kappa^2 - (\kappa^{\text{req}})^2$, kde $\kappa^{\text{req}} := 0.06$, a maximalizujeme B^{avg} vzhledem k $\mathcal{D} \leq 0$, přičemž počáteční tvar je výsledek předchozí minimalizace. V obou případech jsou optimalizační proměnné axiální souřadnice řídicích uzlů tří Bézierových křivek, které po řadě řídí tvar pólového nástavce, spodní a horní poklice, viz Obr. 4.1 (vlevo).

V numerické simulaci máme $d := 16$ návrhových proměnných: 3 pro pólový nástavec, 6 pro horní poklici, 6 pro spodní poklici a 1 řídicí axiální zkosení čela poklice, viz Obr. 4.1 (vlevo). Ve všech případech je čelo optimálně rovnoběžné s osou. Optimalizaci provádíme na dvou diskretizacích se stejným výsledkem. FEM–BEM diskretizace se skládá z $n := 262$ vnitřních (FEM) uzlů a 125 hraničních (BEM) úseček, resp. z $n := 902$ uzlů a 250 úseček. Všechny BEM regularizované integrály jsou vyčísleny tenzorovou Gaussovou kvadraturou s 6 Gaussovými uzly v každém integračním směru. Optimalizované tvary a magnetická pole jsou uvedeny na Obr. 4.2. Parametry optimalizace prezentuje Tab. 4.1. V druhém sloupci pozorujeme stabilitu Newtonových iterací. Poslední dva sloupce dokumentují protichůdnost optimalizačních kritérií. Podstatná vylepšení může dát Paretova optimalizace.

úloha, n	optim. iterace	Newtonovy iterace (typické)	vývoj κ [%]	vývoj B^{avg} [T]
min κ , 262	54	5–13 (5)	2.6 \rightarrow 0.5	0.153 \rightarrow 0.119
max B^{avg} , 262	5	5–13 (8)	0.5 \rightarrow 6	0.119 \rightarrow 0.231
min κ , 902	35	7–14 (7)	2.7 \rightarrow 0.5	0.150 \rightarrow 0.116
max B^{avg} , 902	15	7–19 (12)	0.5 \rightarrow 6	0.116 \rightarrow 0.216

Tabulka 4.1: Numerické výsledky

Kapitola 5

Vzhůru k paralelním výpočtům

• • •

V této kapitole uzavřu habilitační práci rozpracovanými tématy, které jsou společné pro předchozí kapitoly. Prezentuji zde nové či vylepšení stávajících efektivních paralelních metod typu BEM pro akustiku a typu FEM pro eliptické úlohy. Výsledky hodlám publikovat ve dvou impaktovaných člancích.

5.1 Komprese v BEM pro Helmholtzovu úlohu

Ve spolupráci s Ing. Janem Szwedou, Ph.D. z Katedry mechaniky Strojní fakulty VŠB-TU Ostrava se zabývám tvarovou optimalizací profilu železničního kola tak, aby se utlumilo jeho kvílení v zatáčkách. Přímá úloha vede na sekvenční párování visko–elasticity a akustiky. Předepíšeme harmonickou budící sílu o úhlovém kmitočtu ω na obvodě kola a vypočteme harmonické pole posunutí $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ na hranici kola jako řešení úlohy visko–elasticity. Tato posunutí určují Neumannovu okrajovou podmínku pro následující vnější Helmholtzovu úlohu:

$$\begin{aligned} -\Delta p(\mathbf{x}) - \kappa^2 p(\mathbf{x}) &= 0 & \text{v } \Omega^e &:= \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}, \\ \partial p(\mathbf{x}) / \partial \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= v_n(\mathbf{x}) := \omega^2 \rho \mathbf{u}(\mathbf{x}) \mathbf{n}(\mathbf{x}) & \text{na } \Gamma &:= \partial\Omega, \end{aligned} \quad (5.1)$$

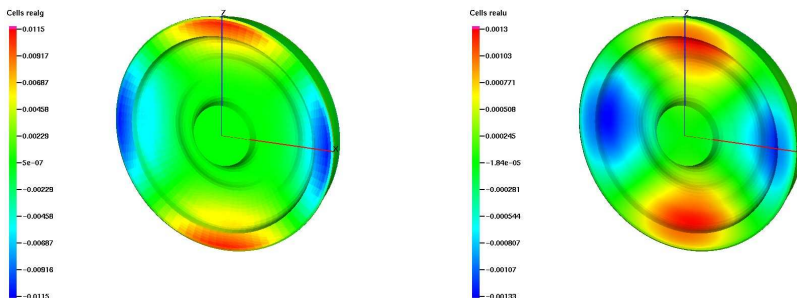
kde $\kappa := \omega/c$ je akustické vlnové číslo s rychlostí zvuku $c := 340$ [m s⁻¹], $\rho := 7850$ [kg m⁻³] je hustota materiálu kola, Ω je oblast kola a \mathbf{n} je vnější jednotková normála ke Γ .

Výsledné akustické pole hledáme metodou hraničních integrálních rovnic v následujícím tvaru, viz [38]:

$$p(\mathbf{x}) = - \int_{\Gamma} v_n(\mathbf{y}) P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) + \int_{\Gamma} p(\mathbf{y}) \frac{\partial P(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} dS(\mathbf{y}), \quad \mathbf{x} \in \Omega^e, \quad (5.2)$$

kde $p(\mathbf{y})$ na Γ jsou neznámé Dirichletovy data úlohy a $P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := e^{i\kappa r} / (4\pi r)$ je fundamentální řešení Helmholtzovy úlohy, přičemž $r := |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$. Hraniční integrální formulace úlohy (5.1) spočívá v limitním přechodu $\Omega^e \ni \mathbf{x} \rightarrow \tilde{\mathbf{x}} \in \Gamma$ v reprezentační formuli (5.2). Výsledkem je lineární integrální rovnice pro neznámou $p(\tilde{\mathbf{x}})$. Řešení hledáme v Sobolevově prostoru stop v Galerkinově smyslu

$$? = p \in H^{1/2}(\Gamma) : \langle D_{\kappa} p, v \rangle = \langle ((-1/2)I + K_{\kappa}') v_n, v \rangle \quad \forall v \in H^{1/2}(\Gamma), \quad (5.3)$$



Obrázek 5.1: Zadané hraniční rychlostní pole (vlevo) a vypočtené tlaky (vpravo) na frekvenci 341 Hz

kde

$$\langle D_\kappa p, v \rangle := \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) [(\mathbf{n}(\mathbf{x}) \times \nabla \tilde{v}(\mathbf{x})) (\mathbf{n}(\mathbf{y}) \times \nabla \tilde{p}(\mathbf{y})) - \kappa^2 v(\mathbf{x}) p(\mathbf{y}) \mathbf{n}(\mathbf{x}) \mathbf{n}(\mathbf{y})] dS(\mathbf{y}) dS(\mathbf{x}), \quad (5.4)$$

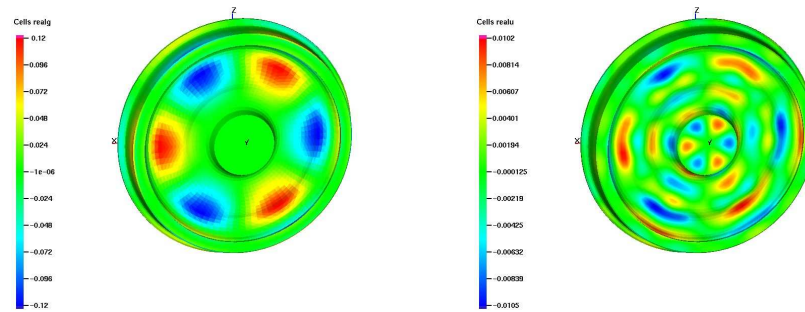
přičemž \tilde{v} , \tilde{p} je rozšíření stop v , p na okolí Γ , a kde

$$\langle v_n, v \rangle := \int_{\Gamma} v_n(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}), \quad \langle K_\kappa' v_n, v \rangle := \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{\partial P(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{n}(\mathbf{y})} v_n(\mathbf{y}) v(\mathbf{x}) dS(\mathbf{y}) dS(\mathbf{x}).$$

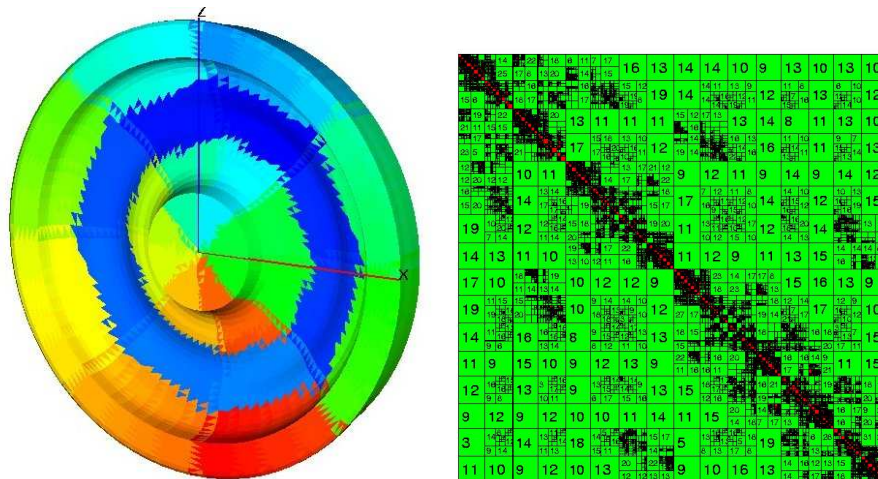
Hraniční integrální rovnici (5.3) aproximujeme metodou hraničních prvků tak, že prostor $H^{1/2}(\Gamma)$ nahradíme konečně-prvkovým podprostorem s po částech lineárními bázevými funkcemi nad triangulací hranice Γ . Na Obr. 5.1 a 5.2 jsou zobrazeny zadané hraniční normálové rychlosti a k nim vypočtené tlaky pro frekvence 341 Hz a 2706 Hz na diskretizaci do 15112 trojúhelníků a 22668 hraničních uzlů, která je pro danou úlohu nutná. Řešení hraničně-prvkové soustavy trvalo pouze 10 minut ve 138, resp. 47 minut v 700 GMRES iteracích, avšak sestavení hustých matic \mathbf{K}_κ a \mathbf{D}_κ trvalo 5 hodin 23 minut při spotřebě paměti 2.6 GB. Vystává tedy potřeba redukovat časovou i paměťovou složitost metody hraničních prvků $O(n^2)$, kde n je počet uzlů triangulace.

Redukci výpočetní a paměťové složitosti dosáhneme komprimací matic \mathbf{D}_κ a \mathbf{K}_κ , a to tak, že složitost BEM se sníží z $O(n^2)$ na $O(n \log n)$. Jednou z efektivních metod je tzv. Adaptive Cross Approximation (ACA) [1]. Prvním krokem v metodě je hierarchické dělení oblasti Γ do klastrů [12], např. bisekcí s rovinou řezu procházející těžištěm triangulace hranice Γ , jejíž normála je dominantní vlastní vektor kovarianční 3x3 matice, která je dána váženým součtem souřadnicových odchylek $(x_i - X_i)(x_j - X_j)$ těžišť trojúhelníků (x_1, x_2, x_3) od těžiště klastru (X_1, X_2, X_3) . Bisekci aplikujeme rekurzivně. Zastavíme se na předem zvoleném minimálním počtu uzlů n_{\min} v klastru. Typický výsledek hierarchického klastrování je na Obr. 5.3 (vlevo). Poznamenejme, že jednotlivé klastry nemusí být souvislé oblasti.

Dalším krokem je identifikace blízkých a vzdálených párů klastrů a s tím související rozložení matice, kterou chceme komprimovat, na submatice. Procházíme hierarchii klastrových párů shora dolů, tj. počínaje bisekcí Γ , a hledáme vzdálené, tzv. přípustné, páry



Obrázek 5.2: Zadané hraniční rychlostní pole (vlevo) a vypočtené tlaky (vpravo) na frekvenci 2706 Hz



Obrázek 5.3: Hierarchické klastrování (vlevo) a struktura \mathcal{H} -matice (vpravo): přípustné bloky zeleně s hodnotami ACA-aproximací, nepřípustné červeně

klastrů C_k, C_l , které splňují podmínku

$$\min\{\text{diam } C_k, \text{diam } C_l\} \leq \eta \text{dist}(C_k, C_l),$$

kde $\text{diam } C_k$ značí průměr opsané kružnice klastru C_k a $\text{dist}(C_k, C_l)$ je vzdálenost klastrů. Míru přípustnosti řídí pevně zvolený parametr $\eta \in (0, 1)$. Pokud je pár klastrů přípustný, neprohledáváme již dále potomky vzniklé bisekcí. Není-li přípustný, aplikujeme test rekurzivně pro všechny 4 kombinace párů potomků. Je-li jeden z klastrů již dále nedělitelný, prohlásíme daný pár za nepřípustný. Tento krok nám rozdělí matici na bloky, přičemž některé jsou přípustné a jiné nepřípustné. Příklad výsledné tzv. \mathcal{H} -matice (po vhodné permutaci řádků a sloupců) je na Obr. 5.3 (vpravo).

Posledním krokem metody ACA je aproximace přípustných bloků maticemi nízkých hodnotí tak, že chyba této aproximace je řádově stejná jako chyba BEM-approximace. Tato aproximace je efektivní díky tomu, že jádra integrálních operátorů $\int_{\Gamma} \int_{\Gamma} u(\mathbf{x}) v(\mathbf{y}) k(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ jsou asymptoticky hladká, tj.

$$\exists c_1, c_2 > 0 \exists g \leq 0 \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^3 : \left| \partial_{\mathbf{y}}^{\alpha} k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \right| \leq c_1 p! (c_2)^p |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{g-p},$$

kde $p := |\alpha|$ je řád multi-indexu derivací. Poznamenejme, že v případě Helmholtzovy rovnice závisí konstanty c_1, c_2 na vlnovém čísle κ , což má přirozený důsledek, že pro vyšší frekvence se efektivita komprimace matic \mathbf{D}_{κ} zhoršuje. Algoritmus aproximace ACA je podobný sloupcově-pivotovanému částečnému LU-rozkladu. Uvažujeme-li matici \mathbf{A} jako funkci dvou indexů $A(i, j)$, pak ACA je Lagrangeovskou interpolací $A(i, j)$ na množině vybraných pivotů. Uvažujme submatici $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times p}$ odpovídající přípustnému páru klastrů a nechť ε je kýžená přesnost aproximace. Pak ACA je Lagrangeovskou interpolací matice \mathbf{A} , kterou můžeme uvažovat jako funkci $A(i, j)$ indexů řádků a sloupců, na množinu vhodně zvolených pivotů. Hledáme permutaci řádků \mathbf{P}_r , permutaci sloupců \mathbf{P}_s a hodnotu aproximace $h := h(\varepsilon) \ll \min\{m, p\}$ tak, že

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_r \mathbf{A} \mathbf{P}_s &= \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}}_{11} & \tilde{\mathbf{A}}_{12} \\ \tilde{\mathbf{A}}_{21} & \tilde{\mathbf{A}}_{22} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}}_{11} & \tilde{\mathbf{A}}_{12} \\ \tilde{\mathbf{A}}_{21} & \tilde{\mathbf{A}}_{21}^{-1} \tilde{\mathbf{A}}_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}}_{11} \\ \tilde{\mathbf{A}}_{21} \end{pmatrix} \left[\tilde{\mathbf{A}}_{11}^{-1} \left(\tilde{\mathbf{A}}_{11} \tilde{\mathbf{A}}_{12} \right) \right] \\ &=: \sum_{i=1}^h \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T \end{aligned}$$

kde $\tilde{\mathbf{A}}_{11} \in \mathbb{C}^{h \times h}$ je regulární, $\tilde{\mathbf{A}}_{12} \in \mathbb{C}^{h \times (p-h)}$, $\tilde{\mathbf{A}}_{21} \in \mathbb{C}^{(m-h) \times h}$, $\tilde{\mathbf{A}}_{22} \in \mathbb{C}^{(m-h) \times (p-h)}$, $\mathbf{u}_i \in \mathbb{C}^m$, $\mathbf{v}_i \in \mathbb{C}^p$, přičemž permutace $\mathbf{P}_r, \mathbf{P}_s$ hledáme tak, aby chyba aproximace, což je operátorová norma Schurova komplementu $\tilde{\mathbf{S}} := \tilde{\mathbf{A}}_{22} - \tilde{\mathbf{A}}_{21} \tilde{\mathbf{A}}_{11}^{-1} \tilde{\mathbf{A}}_{12}$, byla co nejmenší. Bohužel se umí, viz [1], odhadnout pouze relativní chyba ve Frobeniově normě, tj. $\|\tilde{\mathbf{S}}\|_F \leq \varepsilon \|\tilde{\mathbf{A}}\|_F$. Permutační matice, tj. pivoty, volíme tak, aby $|\det \tilde{\mathbf{A}}_{11}|$ byl co největší.

Efektivní algoritmizace ACA je taková, že hledáme ve zvoleném nenulovém řádku s , typicky $s := 1$, dominantní prvek a ten prohlásíme prvním pivotem matice \mathbf{A} , označme jej a_{st} . Pak spočteme vektory $\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_1$ jako sloupec s , resp. řádek t , matice $\mathbf{A}_1 := \mathbf{A}$, \mathbf{v}_1 podělíme a_{st} a zaznamenanáme s, t do permutačních matic. Není-li odhad normy aktuálního Schurova komplementu, tj. matice $\mathbf{A}_2 := \mathbf{A}_1 - \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T$, kterou samozřejmě nesestavujeme, dostatečně malý, pokračujeme v hledání dalších pivotů. V dosud nepoužitém řádku matice \mathbf{A} , od nějž odečteme odpovídající řádek matice $\mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T$ a výsledný vektor označíme \mathbf{u}_2 , najdeme pivot, příslušný sloupec modifikujeme o sloupec $\mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T$, podělíme pivotem a

uložíme do \mathbf{v}_2 , atd. Se zvyšující se hodnotí h klesá odhad chyby aproximace ACA a pro asymptoticky hladká integrální jádra se žádané hodnotí $h(\varepsilon)$ zvyšují pouze logaritmicky v závislosti na míře přípustnosti bloku, viz Obr. 5.3 (vpravo), z čehož plyne složitost $O(n \log n)$.

Algoritmus ACA lze snadno začlenit do existujících BEM kódů, neboť vyžaduje pouze rutiny na vyčíslení pivotů, sestavení řádku a sloupce přípustné submatice a sestavení celé nepřípustné submatice. To je ve 3 dimenzích časově nenáročné v případě po částech konstantních bázových funkcí, např. pro BEM–matici tzv. potenciálu jednoduché vrstvy \mathbf{V}_κ , případně dvojevrstvy \mathbf{K}_κ . Pro BEM–matici hypersingulárního operátoru \mathbf{D}_κ však jsou bázové funkce po částech lineární na triangulaci hranice Γ a vyčíslení každého prvku vyžaduje projít nosič příslušné bázové funkce. To vede k tomu, že na mnoha trojúhelnících se počítají složité substituce pro lokální integrály vícekrát, neboť každý trojúhelník je nosičem tří bázových funkcí. Složitost sestavení ACA aproximace pro \mathbf{D}_κ je pak sice stále $O(n \log n)$, ale čas sestavení např. pro naši diskretizaci železničního kola je 8 hodin, přičemž aproximace matic \mathbf{V}_κ , \mathbf{K}_κ podobných rozměrů trvá pouze po hodině. Naštěstí pro Laplaceovu úlohu, tj. $\kappa := 0$, platí, že $\mathbf{D}_0 = \mathbf{T}^T \mathbf{V}_0 \mathbf{T}$, kde \mathbf{T} je řídká matice realizující vektorové součiny v prvním členu (5.4). Stačí tedy sestavit (trochu přesnější) ACA aproximaci matice \mathbf{V}_0 . Podobně je tomu v ACA–BEM pro lineární pružnost. Jediný slabý bod ACA–BEM pro standartní koercivní úlohy je časová náročnost komprese \mathbf{D}_κ v Helmholtzové úloze. Ve zbytku kapitoly navrhuji modifikovanou metodu ACA pro \mathbf{D}_κ , $\kappa > 0$.

Uvažujme triangulaci Γ do m trojúhelníků $\{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m\}$. Navrhnuji tzv. Element–based ACA (ACA-E), která se inspirovuje reprezentací $\mathbf{D}_0 = \mathbf{T}^T \mathbf{V}_0 \mathbf{T}$ a snaží se sestavit ACA–aproximaci matice \mathbf{D}_κ po trojúhelníkových elementech podobně, jako je výhodné sestavit plnou matici \mathbf{D}_κ součtem lokálních matic $\mathbf{D}_\kappa^{(i,j)} \in \mathbb{C}^{3 \times 3}$ po párech trojúhelníků γ_i a γ_j , tj. $\mathbf{D}_\kappa = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \mathcal{G}^{(i,j)}(\mathbf{D}_\kappa^{(i,j)})$, kde $\mathcal{G}^{(i,j)} : \mathbb{C}^{3 \times 3} \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}$ mapuje lokální matice na globální. V klasické ACA pro \mathbf{D}_κ se uvažují uzlové klastry, které odpovídají sjednocení nosičů všech uzlových bázových funkcí, čímž se trochu komplikuje bisekce a testování podmínek přípustnosti. V ACA-E uvažují pouze elementové klastry podobně jako v klasické ACA pro \mathbf{V}_κ . Aplikujme na triangulaci hierarchické klastrování a nechtě \mathcal{N}^{adm} je výsledná množina přípustných klastrových párů a \mathcal{N}^{non} množina zbylých nepřípustných klastrových párů. Prohlédneme–li si reprezentaci (5.4), dospějeme přirozeně k následující aproximaci:

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}_\kappa &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \mathcal{G}^{(i,j)}(\mathbf{D}_\kappa^{(i,j)}) \\
&= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m (\mathbf{T}^{(i)})^T (\mathbf{V}_\kappa)_{i,j} \mathbf{T}^{(j)} \\
&\quad - \kappa^2 \mathcal{G}^{(i,j)} \left(\int_{\gamma_i} \int_{\gamma_j} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi_k^{(i)}(\mathbf{x}) \phi_l^{(j)}(\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) dS(\mathbf{x}) \right)_{k,l=1}^3 \mathbf{n}^{(i)} \mathbf{n}^{(j)} \\
&\approx \mathbf{T}^T \mathbf{V}_\kappa^{\text{adm}} \mathbf{T} - \kappa^2 \sum_{(i,j) \in \mathcal{N}^{\text{adm}}} \mathcal{G}^{(i,j)} \left(\begin{pmatrix} 1/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{pmatrix} (\mathbf{V}_\kappa^{\text{adm}})_{i,j} (1/3, 1/3, 1/3) \right) \mathbf{n}^{(i)} \mathbf{n}^{(j)} \\
&\quad + \sum_{(i,j) \in \mathcal{N}^{\text{non}}} \mathcal{G}^{(i,j)}(\mathbf{D}_\kappa^{(i,j)}),
\end{aligned}$$

n, m	ACA ($\eta := 0.4, \varepsilon := 10^{-8}$)				ACA-E ($\eta := 0.4, \varepsilon := 10^{-8}$)			
	chyba $L^2(\Gamma)$	sest. [s]	GMRES it./čas [s]	paměť [GB]	chyba $L^2(\Gamma)$	sest. [s]	GMRES it./čas [s]	paměť [GB]
22	0.099	1	13/0	0.007	0.099	0	13/0	0.008
82	0.020	2	19/0	0.008	0.020	3	19/0	0.009
322	3.9e-3	30	28/0	0.013	3.9e-3	34	28/1	0.023
1282	8.7e-4	973	42/7	0.085	1.0e-3	255	42/49	0.13
5122	2.7e-4	8095	60/70	0.484	3.9e-4	1259	60/450	0.727
20482	1.0e-4	42397	86/496	2.24	2.3e-4	5515	86/6662	2.93
81922					4.2e-4	25768	123/23877	13.19

Tabulka 5.1: Srovnání ACA a ACA-E pro \mathbf{D}_κ na kouli

v níž jsme nahradili uzlové lineární báze funkce ϕ elementovými konstantními bázemi, proto ta čísla $1/3 = \int_{\gamma_i} \phi_k^{(i)}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x})/|\gamma_i|$, a v níž $\mathbf{n}^{(i)} := \mathbf{n}|_{\gamma_i}$. Místo sestavení klasického uzlového ACA pro \mathbf{D}_κ tedy sestavíme přípustnou část elementového ACA pro \mathbf{V}_κ a nepřipustnou elementovou část \mathbf{D}_κ . Naše ACA-E bude rychlejší než uzlové ACA pro \mathbf{D}_κ za cenu větších paměťových nároků a dražšího násobení s vektory během GMRES iterací. Numerické výsledky ukazují, že se ACA-E vyplácí. Poznamenejme, že ACA-E lze použít i pro \mathbf{K}_κ , a to následovně:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_\kappa &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \mathcal{L}^{(i,j)}(\mathbf{K}_\kappa^{(i,j)}) \\ &\approx \sum_{(i,j) \in \mathcal{N}^{\text{adm}}} \mathcal{L}^{(i,j)} \left(\int_{\gamma_i} \int_{\gamma_j} \nabla_{\mathbf{y}} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathbf{n}_j dS(\mathbf{y}) dS(\mathbf{x}) (1/3, 1/3, 1/3) \right) \\ &\quad + \sum_{(i,j) \in \mathcal{N}^{\text{non}}} \mathcal{L}^{(i,j)}(\mathbf{K}_\kappa^{(i,j)}), \end{aligned}$$

kde $\mathcal{L}^{(i,j)} : \mathbb{C}^{1 \times 3} \rightarrow \mathbb{C}^{m \times n}$ mapuje lokální matice na globální.

Uvažujme úlohu (5.1) na jednotkové kouli $\Omega := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : |\mathbf{x}| \leq 1\}$ s v_n tak, že $p(\mathbf{x}) := e^{i\kappa|\mathbf{x}-\mathbf{x}_s|}/(4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}_s|)$, kde $\kappa := 2\pi 151.6/340$ a $\mathbf{x}_s := (0.05, 0.05, 0.05)$. Srovnání klasického ACA s ACA-E pro tuto úlohu najdeme v Tab. 5.1. Srovnání pro stejnou úlohu na jednotkové krychli $\Omega := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : 0 \leq |x_i| \leq 1 \text{ pro } i = 1, 2, 3\}$ je v Tab. 5.2. Nakonec jsme řešili úlohu (5.1) pro geometrii železničního kola a frekvenci 341 Hz, viz Obr. 5.1, a redukovali jsme pro volbu $\varepsilon := 10^{-4}$, $\eta := 0.4$ celkový výpočetní čas více než třikrát, přičemž sestavení \mathbf{D}_κ uzlovým ACA trvalo 27286 s a řešení ve 138 GMRES iteracích zabralo 490 s, zatímco ACA-E sestavilo \mathbf{D}_κ za 5732 s a řešení ve 142 GMRES iteracích trvalo 2542 s. Matici \mathbf{K}_κ jsme komprimovali klasickým ACA za 3121 s, zatímco ACA-E vyžadovalo pouze 2658 s. Poznamenejme však, že je třeba ještě analyzovat chybu aproximace ACA-E, neboť z Tab. 5.1 a 5.2 je vidět, že pro vysoké diskretizace konvergence stagnuje. Bude třeba zpřísnit míru přípustnosti η .

Konečně si všimněme, že množiny klastrových párů \mathcal{N}^{adm} i \mathcal{N}^{non} lze rozdělit mezi více procesů, a tedy sestavení příslušných submatic či jejich ACA aproximací, stejně jako aplikace na vektor, jsou paralelně-škálovatelné.

n, m	ACA ($\eta := 0.4, \varepsilon := 10^{-8}$)				ACA-E ($\eta := 0.4, \varepsilon := 10^{-8}$)			
	chyba $L^2(\Gamma)$	sest. [s]	GMRES it./čas [s]	paměť [GB]	chyba $L^2(\Gamma)$	sest. [s]	GMRES it./čas [s]	paměť [GB]
82	0.538	0	7/0	0.007	0.538	0	7/0	0.008
26	0.186	100/0	21/0	0.007	0.186	1	21/0	0.008
98	0.166	100/3	30/0	0.008	0.166	3	30/0	0.009
386	0.035	100/43	37/1	0.016	0.037	45	37/3	0.029
1538	9.3e-3	91/1661	48/12	0.115	0.015	282	48/87	0.165
6146	3.5e-3	37/12134	66/107	0.641	4.6e-3	1236	66/729	0.918
24578	3.5e-3	12/60671	92/738	2.81	5.2e-3	5157	93/5060	3.90

Tabulka 5.2: Srovnání ACA a ACA-E pro \mathbf{D}_κ na krychli

5.2 Multigrid–FETI metody

Uvažujme modelovou úlohu na oblasti $\Omega := (0, 1)^2$

$$? = u \in H_0^1(\Omega) : \langle Au, v \rangle = \langle f, v \rangle \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \quad (5.5)$$

s $\langle Au, v \rangle := \int_\Omega \nabla u \nabla v \, d\mathbf{x}$ a $\langle f, v \rangle := \int_\Omega f v \, d\mathbf{x}$. Odpovídající energetický funkcionál $J(v) := \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla v|^2 \, d\mathbf{x} - \int_\Omega f v \, d\mathbf{x}$ nabývá minima na prostoru $H_0^1(\Omega)$ právě v u . Jednou z efektivních paralelně-škálovatelných (čas výpočtu úlohy je nepřímě úměrný počtu procesorů) metod aproximace a následného řešení je tzv. Finite Element Tearing and Interconnecting (FETI) [11]. Metoda FETI je založena na rozložení oblasti (v našem případě opět do čtverců)

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{i=1}^N \bar{\Omega}_i, \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset \text{ a } \text{diam } \Omega_i \approx \text{diam } \Omega_j \text{ pro } i \neq j$$

s následným rozložením prostoru, kde „ \equiv ” je ve smyslu izomorfického izometrismu,

$$H_0^1(\Omega) \equiv \left\{ v = (v_1, \dots, v_N) \in \bigotimes_{i=1}^N H^1(\Omega_i) : v_i = v_j \text{ na } \Gamma_{ij} \text{ a } v_i = 0 \text{ na } \Gamma_i \cap \Gamma \right\},$$

kde $\Gamma := \partial\Omega$, $\Gamma_i := \partial\Omega_i$ a $\Gamma_{ij} := \Gamma_i \cap \Gamma_j$. Odpovídající energetický funkcionál se pak rozpadá na $J(v) = \sum_{i=1}^N J_i(v_i)$, kde $J_i(v_i) := \frac{1}{2} \langle A_i v_i, v_i \rangle - \langle f_i, v_i \rangle$ s $\langle A_i u_i, v_i \rangle := \int_{\Omega_i} \nabla u_i \nabla v_i \, d\mathbf{x}$, $\langle f_i, v_i \rangle := \int_{\Omega_i} f v_i \, d\mathbf{x}$. Jeho minimum na $H_0^1(\Omega)$, tedy řešení (5.5), je řešením následující sedlo-bodové úlohy:

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

s $\langle Au, v \rangle = \sum_{i=1}^N \langle A_i u_i, v_i \rangle$, $\langle f, v \rangle = \sum_{i=1}^N \langle f_i, v_i \rangle$. Operátor B zahrnuje ve slabém smyslu všechny podmínky spojitosti na Γ_{ij}

$$\int_{\Gamma_{ij}} (u_i - u_j) q_{ij} \, ds(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall q_{ij} \in L^2(\Gamma_{ij})$$

a Dirichletovu okrajovou podmínku na Γ

$$\int_{\Gamma_i \cap \Gamma} u_i q_i \, ds(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall q_i \in L^2(\Gamma_i \cap \Gamma).$$

Konečně uvažujeme diskretizaci úlohy (5.6) metodou konečných prvků nad triangulací s po částech lineárními uzlovými bázemi ve $V_i := H^1(\Omega_i)$ a s po částech konstantními bázemi v $L^2(\Gamma_{ij})$, resp. v $L^2(\Gamma_i \cap \Gamma)$. Poznamenejme, že dochází ke zdvojení stupňů volnosti podél Γ_{ij} . Všimněme si, že náš přístup umožňuje i nekonformní párování oblastí pomocí tzv. mortar elements.

Tradiční, viz [11], řešení diskretizované úlohy (5.6) spočívá v eliminaci primárních proměnných (u_1, \dots, u_N) a v řešení duální eliptické úlohy metodou sdružených gradientů. To však vyžaduje explicitní výpočet, typicky LU rozkladem, pseudoinverzí A_i^+ semidefinitních operátorů A_i a eliminaci lineárně závislých vazeb v B . Podmíněnost příslušného Schurova doplňku $S := BA^+B^T$, a tedy i počet iterací, je úměrná parametru H/h , kde $H \approx \text{diam } \Omega_i$ a h je parametr FEM diskretizace. Po ortogonalizaci matice B lze použít tzv. lumped předpodmínění operátorem BAB^T , které však pořád vede na počet iterací úměrný H/h . Paralelní řešení využívá toho, že A i A^+ jsou blokově-diagonální a jejich sestavení i aplikace lze realizovat nezávislými procesy. Poznamenejme, že pseudoinverze lze na současných počítačích prakticky provádět pouze do řádu 10^5 neznámých ve 2 dimenzích, resp. 10^4 ve 3 dimenzích, přičemž pro větší matice výpočet trvá desítky minut a spotřebuje paměť v řádu Giga Bytů. To dává praktické omezení na maximální velikost úlohy na jeden proces. Pro větší úlohy časová i paměťová náročnost LU rozkladu dominuje nad náročností metody sdružených gradientů.

My navrhuje nový způsob řešení systému (5.6), a to tak, že nepřevádíme úlohu do duálu, ale řešíme původní sedlo-bodový systém. Klasický Uzawův algoritmus by nebyl přínosný, neboť vyžaduje předpodmínění Schurova doplňku. Navrhujeme algoritmus SMALE, viz Alg. 2, který v kombinaci s multigridovým předpodmíněním odstraňuje výše zmíněné nevýhody řešení duální úlohy, a to:

- + nesestavujeme LU rozklady pro pseudoinverze A_i^+ ,
- + neeliminujeme závislé vazby v B ,
- + nepoužíváme Schurův komplement S ,
- + počet našich iterací je omezený nezávisle na volbě H, h ,
- + efektivně využíváme nejen veškerý dostupný výkon paralelního počítače, ale i jeho paměť.

Na rozdíl od duálního přístupu však musíme

- sestavit multigridový předpodmiňovač pro skalární součin I_V ve $V := \bigotimes_{i=1}^N V_i$,
- sestavit multigridový předpodmiňovač pro regularizovaný Hessián A_ρ .

Ve V volíme následující skalární součin:

$$\langle I_V u, v \rangle := \sum_{i=1}^N \left(\langle A_i u_i, v_i \rangle + \int_{\Gamma_i} u_i v_i ds(\mathbf{x}) \right),$$

což je blokově-diagonální, tedy paralelně-škálovatelné, stejně jako A . Bohužel však regularizace $B^T I_Q^{-1} B$ není blokově-diagonální a její aplikaci přenecháme master-procesu. Zde

se odhalí snad jediná slabina našeho přístupu, a to předpokládání $A_\rho := A + \rho B^T I_Q^{-1} B$. Po FEM–diskretizaci prostorů $L^2(\Gamma_{ij})$ a $L^2(\Gamma_i \cap \Gamma)$ dostáváme

$$\begin{aligned} \langle B^T I_Q^{-1} B u, v \rangle &= \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j \\ \Gamma_{ij} \neq \emptyset}}^N \sum_{S^k \in \Gamma_{ij}} \frac{1}{|S^k|} \int_{S^k} (u_i - u_j) \int_{S^k} (v_i - v_j) + \sum_{\substack{i=1 \\ \Gamma_i \cap \Gamma \neq \emptyset}}^N \sum_{S^k \in \Gamma_i \cap \Gamma} \frac{1}{|S^k|} \int_{S^k} u_i \int_{S^k} v_i \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{S^k \in \Gamma_i} \frac{1}{|S^k|} \int_{S^k} u_i \int_{S^k} v_i - \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j \\ \Gamma_{ij} \neq \emptyset}}^N \sum_{S^k \in \Gamma_{ij}} \frac{1}{|S^k|} \left[\int_{S^k} u_i \int_{S^k} v_j + \int_{S^k} u_j \int_{S^k} v_i \right]. \quad (5.7) \end{aligned}$$

První část napravo v (5.7) je blokově–diagonální, tedy paralelně–škálovatelná. Druhá část představuje mimo–diagonální bloky a v předpokládání \widehat{A}_ρ ji zanedbáváme, čímž se dopouštíme chyby, která naštěstí téměř nepokazí numerickou ani paralelní škálovatelnost našeho algoritmu. To je dokumentováno v Tab. 5.3.

Algoritmus jsme testovali na úloze (5.5) s $f := 1$ a dělením Ω do $N := 4, 8, 16$ a 25 čtvercových podoblastí. Pro všechny simulace jsme použili diskretizaci Ω_i na hrubé síti do 16.641 uzlů. Pro oba multigridy \widehat{I}_V a \widehat{A}_ρ vždy volíme 3 symetrické vyhlazovací blokové Gauss–Seidelovy iterace, přičemž bloky zahrnují uzly trojúhelníků adjacenní k nějaké hraně, tedy mají velikost 5×5 nebo 3×3 . Parametry SMALE byly $\eta = \nu := 1$, $\beta := 10$ a penalta $\rho_0 := 10$ se v průběhu výpočtů nikdy nezvýšila. Úlohy jsme řešili s relativními přesnostmi $\varepsilon = \varepsilon_{\text{feas}} := 10^{-4}$. Testy jsme prováděli na počítači Hubert na Ústavu geoniky, AVČR v Ostravě. Hubert má 32 jader a 128 GB sdílené paměti. Implementace v C++ využívá paralelní knihovnu MPI a přeuspořádání COLAMD pro faktorizaci hrubých matic. Největší úlohy jsme řešili

- pro více než **26 milionů** primárních uzlových neznámých za **1 hodinu 42 minut** při spotřebě 82.2 GB na **25 procesorech** a
- pro téměř **38 milionů** uzlových neznámých za **4 hodiny 48 minut** při spotřebě 121 GB na **9 procesorech**.

Poznamenejme, že výpočetní čas lze ještě redukovat při dekompozici do více procesů než jader pro nejnižší úroveň multigridu. Např. pro $N := 100$ vedoucí na 1.664.100 primárních a 28.160 duálních neznámých jsme dosáhli času inicializace a řešení 75+131 sekund v 18 SMALE a 83 PCG iteracích při spotřebě 16 GB paměti, pro srovnání viz Tab. 5.3 $l := 1$, $N := 25$. Tímto přístupem, který je v klasickém FETI běžný, však neumíme na Hubertovi řešit o moc větší úlohy, neboť velké množství LU rozkladů brzy zahltí paměť a výpočetní kapacita na jeden proces se snižuje. Očekáváme, že ve 3 dimenzích multigrid–SMALE přístup překoná tento tradiční už pro miliony primárních neznámých, kdy se začíná projevat efektivita multigridu.

l	$N := 4$ prim./duál. SMALE(CG) it. inicializace+řešení paměť	$N := 9$ prim./duál. SMALE(CG) it. inicializace+řešení paměť	$N := 16$ prim./duál. SMALE(CG) it. inicializace+řešení paměť	$N := 25$ prim./duál. SMALE(CG) it. inicializace+řešení paměť
0	66.564/1.536 10(27) 11+4 s 0.2 GB	149.769/3.072 12(36) 12+7 s 0.7 GB	266.256/5.120 13(39) 13+10 s 2.0 GB	416.025/7.680 14(46) 13+15 s 5.5 GB
1	264.196/3.072 10(26) 14+145 s 0.8 GB	594.441/6.144 11(34) 15+195 s 2.0 GB	1.056.784/10.240 13(39) 16+233 s 4.3 GB	1.651.225/15.360 14(46) 17+295 s 9.1 GB
2	1.052.676/6.144 10(28) 26+763 s 3.1 GB	2.368.521/12.288 11(34) 27+973 s 7.3 GB	4.210.704/20.480 13(39) 30+1147 s 13.7 GB	6.579.225/30.720 14(46) 32+1432 s 23.8 GB
3	4.202.500/12.288 10(28) 78+3237 s 12.5 GB	9.455.625/24.576 11(34) 83+4126 s 28.3 GB	16.810.000/40.960 13(39) 88+4862 s 51.0 GB	26.265.625/61.440 14(46) 94+6060 s 82.2 GB
4	16.793.604/24.576 10(28) 285+13320 s 49.9 GB	37.785.609/49.152 11(34) 303+16973 s 112.4 GB	>128 GB	>128 GB

Tabulka 5.3: Numerická a paralelní škálovatelnost multigrid-SMALE-FETI

Literatura

- [1] Bebendorf, M., Approximation of boundary element matrices. *Numerische Mathematik* **86**:565–589, 2000.
- [2] Bendsoe, M.P., Optimization for Structural Topology, Shape and Material. Springer, 1995.
- [3] Bramble, J.H., Multigrid Methods. Pitman Research Notes in Mathematics **294**. Wiley, 1993.
- [4] Brenner, S.C., A nonconforming mixed multigrid method for the pure displacement problem in linear elasticity. *SIAM Journal on Numerical Analysis* **30**:116–135, 1993.
- [5] Bouchala, J., Úvod do "Boundary Elements Method". Přednášky zimní školy SNA 2007, Ostrava.
- [6] Costabel, M., Symmetric methods for coupling of finite and boundary elements. In: Brebbia, C., Wendland, W., Kuhn, G. (editoři), Boundary Elements IX, str. 411–420, Springer, 1987.
- [7] Dostál, Z., Optimal Quadratic Programming Algorithms: With Applications to Variational Inequalities. Springer, 2009.
- [8] Dostál, Z.: Semi-monotonic inexact augmented Lagrangians for quadratic programming with equality constraints. *Optimization Methods and Software* **20**:715–727, 2005.
- [9] Duffy, M.G., Quadrature over a pyramid or cube of integrands with a singularity at a vertex. *SIAM Journal on Numerical Analysis* **19**:1260–1262, 1982.
- [10] Eppler, K., Second derivatives and sufficient optimality conditions for shape functionals. *Control and Cybernetics* **29**:485–512, 2000.
- [11] Farhat, C., Roux, F.-X., A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **32**:1205–1227, 1991.
- [12] Hackbusch, W., Nowak, Z.P., On the fast matrix multiplication in the boundary element methods by panel clustering. *Numerische Mathematik* **54**:463–491, 1989.
- [13] Haslinger, J., Neittaanmäki, P., Finite Element Approximation of Optimal Shape, Material and Topology Design. Wiley, 1996.

- [14] Hiptmair, R., Symmetric coupling for eddy current problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis* **40**:41–65, 2002.
- [15] Kuhn, M., Steinbach, O., Symmetric coupling of finite and boundary elements for exterior magnetic field problems. *Mathematical Methods in the Applied Sciences* **25**:357–371, 2002.
- [16] Lukáš, D., *Optimal Shape Design in Magnetostatics*. Dizertační práce, VŠB–Technická univerzita Ostrava, 2003.
- [17] Lukáš, D., On solution to an optimal shape design problem in 3–dimensional linear magnetostatics. *Applications of Mathematics* **49**:441–464, 2004.
- [18] Lukáš, D., Chalmovianský, P., A sequential coupling of optimal topology and multilevel shape design applied to 2–dimensional nonlinear magnetostatics. *Computing and Visualization in Science* **10**:135–144, 2007.
- [19] Lukáš, D., Dostál, Z., Optimal multigrid preconditioned semi–monotonic augmented Lagrangians applied to the Stokes problem. *Numerical Linear Algebra with Applications* (IF 0.822) **14**:741–750, 2007.
- [20] Lukáš, D., Postava, K., Životský, O., Optimization of electromagnet for high–field polar mageto–optical microscopy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (IF 1.283) **322**:1471–1474, 2010.
- [21] Lukáš, D., Postava, K., Životský, O., A shape optimization method for nonlinear axisymmetric magnetostatics using a coupling of finite and boundary elements. *Mathematics and Computers in Simulation* (IF 0.93), 16 stran, Přijato.
- [22] Lukáš, D., Shape optimization of homogeneous electromagnets. In: Van Rienen, U., Günther, M., Hecht, D. (editoři), Proceedings of SCEE 2000, *Lecture Notes in Computational Science and Engineering* **18**:145–152, Springer, 2001.
- [23] Lukáš, D., Ciprian, D., Pištora, J., Postava, K., Foldyna, M., Multilevel solvers for 3–dimensional optimal shape design with an application to magneto–optics. In: Pištora, J., Postava, K., Hrabovský, M., Rawat, B.S. (editoři), Proceedings of ISMOT 2003, *Proceedings of the International Society for Optical Engineering (SPIE)* **5445**:235–239, 2004.
- [24] Lukáš, D., Langer, U., Lindner, E., Stainko, R., Pištora, J., Computational shape and topology optimization with applications to 3–dimensional magnetostatics. In: Hiptmair, R., Hoppe, R.W., Langer, U. (editoři), Proceedings of the Oberwolfach Workshop on Computational Electromagnetism 2004, *Oberwolfach Reports* **1**:601–603, 2004.
- [25] Lukáš, D., An integration of optimal topology and shape design for magnetostatics. In: Anile, A.M., Ali, G., Mascali, G. (editoři), Proceedings of SCEE 2004, *Mathematics in Industry* **9**:227–232, Springer, 2006.
- [26] Lukáš, D., A multigrid method for coupled optimal topology and shape design in nonlinear magnetostatics. In: de Castro, A.B., Gomes, D., Quintela, P., Salgado, P. (editoři). Proceedings of ENUMATH 2005, *Numerical Mathematics and Advanced Applications*, str. 1015–1022, Springer, 2006.

- [27] Lukáš, D., Multigrid based optimal shape and topology design in magnetostatics. In: Boyanov, T., Dimova, S., Georgiev, K., Nikolov, G. (editoři), Proceeding of NM&A 2006, *Lecture Notes in Computer Science* **4310**:82–91, Springer, 2007.
- [28] Lukáš, D., Kraus, J.K., A fixed-grid finite element algebraic multigrid approach for interface shape optimization governed by 2-dimensional magnetostatics. In: Lirkov, I., Margenov, S., Wasniewski, J. (editoři), Proceedings of LSSC 2007, *Lecture Notes in Computer Science* **4818**:96–104, Springer, 2008.
- [29] Lukáš, D., Dostál, Z., Semi-monotonic augmented Lagrangians for optimal control and parameter identification. In: Kunisch, K., Of, G., Steinbach, O. (editoři), Proceedings of ENUMATH 2007, *Numerical Mathematics and Advanced Applications*, str. 621–628, Springer, 2008.
- [30] Nédélec, J.C., Mixed finite elements in \mathbb{R}^3 . *Numerische Mathematik* **35**:315–341, 1980.
- [31] Nédélec, J.C., A new family of mixed finite elements in \mathbb{R}^3 . *Numerische Mathematik* **50**:57–81, 1986.
- [32] Postava, K., Hrabovský, D., Pištora, J., Fert, A.R., Višňovský, Š., Yamaguchi, T., Anisotropy of quadratic magneto-optic effects in reflection. *Journal of Applied Physics* **91**:7293–7295, 2002.
- [33] Rokhlin, V., Rapid solution of integral equations of classical potential theory. *Journal of Computational Physics* **60**:187–207, 1985.
- [34] Sadowská, M., Řešení variačních nerovnic pomocí hraničních integrálních rovnic. Diplomová práce, VŠB–Technická univerzita Ostrava, 2005.
- [35] Sadowská, M., Scalable Total BETI for 2D and 3D Contact Problems. Dizertační práce, VŠB–Technická univerzita Ostrava, 2008.
- [36] Sauter, S., Schwab, C., Quadrature for hp-Galerkin BEM in \mathbb{R}^3 . *Numerische Mathematik* **78**:211–258, 1997.
- [37] Schöberl, J., Zulehner, W.: On Schwarz-type smoothers for saddle-point problems. *Numerische Mathematik* **95**:377–399, 2003.
- [38] Steinbach, O., Rjasanow, S., The Fast Solution of Boundary Integral Equations. Springer, 2007.
- [39] Tang, P.-S., Chang, K.-H., Integration of topology and shape optimization for design of structural components. *Structural and Multidisciplinary Optimization* **22**:65–82, 2001.

Část II

Přiložené časopisecké články

Seznam příložených článků

1. Lukáš, D., On solution to an optimal shape design problem in 3-dimensional linear magnetostatics. *Applications of Mathematics* **49**:441–464, 2004.
2. Lukáš, D., Chalmovianský, P., A sequential coupling of optimal topology and multilevel shape design applied to 2-dimensional nonlinear magnetostatics. *Computing and Visualization in Science* **10**:135–144, 2007.
3. Lukáš, D., Dostál, Z., Optimal multigrid preconditioned semi-monotonic augmented Lagrangians applied to the Stokes problem. *Numerical Linear Algebra with Applications* (IF 0.822) **14**:741–750, 2007.
4. Lukáš, D., Postava, K., Životský, O., Optimization of electromagnet for high-field polar mageto-optical microscopy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (IF 1.283) **322**:1471–1474, 2010.
5. Lukáš, D., Postava, K., Životský, O., A shape optimization method for nonlinear axisymmetric magnetostatics using a coupling of finite and boundary elements. *Mathematics and Computers in Simulation* (IF 0.93), 16 stran, přijato.