

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

Paralelní řešení časo-prostorových úloh
Parallel solution to transient problems
by space-time methods

Zadání bakalářské práce

Student: **Ivo Peterek**

Studijní program: B2647 Informační a komunikační technologie

Studijní obor: 1103R031 Výpočetní matematika

Téma: **Paralelní řešení časo-prostorových úloh**
Parallel solution to transient problems by space-time methods

Jazyk vypracování: čeština

Zásady pro vypracování:

Časově-závislé úlohy, např. rovnice vedení tepla nebo Navier-Stokesovy rovnice proudění tekutin, jsou tradičně diskretizovány zvláště v čase a zvláště v prostorových souřadnicích. Paralelizace výpočtu je možná pouze v rámci jedné časové iterace a není příliš efektivní. Tato práce se bude zabývat novým přístupem, kdy se nahlíží na čas jako na další prostorovou souřadnici. Doba výpočtu je paralelně škálovatelná, tzn. je nepřímo úměrná počtu výpočetních jader nezávisle na délce časového intervalu. Práce zahrnuje:

- časo-prostorovou diskretizaci rovnice vedení tepla,
- studium konvergence přibližných řešení k přesnému,
- návrh paralelní implementace.

Seznam doporučené odborné literatury:

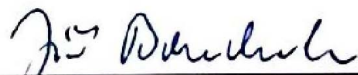
[1] M. Neumueller, Space-Time Methods. Doktorská práce, TU Graz (2013)

Formální náležitosti a rozsah bakalářské práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

Vedoucí bakalářské práce: **doc. Ing. Dalibor Lukáš, Ph.D.**

Datum zadání: 01.09.2015

Datum odevzdání: 29.04.2016



doc. RNDr. Jiří Bouchala, Ph.D.
vedoucí katedry



prof. RNDr. Václav Snášel, CSc.
děkan fakulty

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně. Uvedl jsem všechny literární
prameny a publikace, ze kterých jsem čerpal.

V Ostravě 29. dubna 2016



.....

Rád bych na tomto místě poděkoval doc. Ing. Daliboru Lukášovi, Ph.D. za mnohé rady, ochotu, trpělivost a motivaci při řešení této práce.

Abstrakt

Tato práce se zabývá řešením jednodimenzionální nestacionární úlohy vedení tepla v časo-prostorové doméně. Numerické řešení je založeno na časo-prostorové metodě konečných prvků, která vede na soustavu lineárních rovnic. Práce studuje konvergenci aproximace řešení metodou konečných prvků a ukazuje souvislost s konvergencí bilineární interpolace. Dále ukazuje, jak lze soustavu lineárních rovnic metodou Schurova doplnku v časo-prostorové doméně dekomponovat na menší oblasti. Nakonec rozebírá možnosti paralelní implementace řešeného problému.

Klíčová slova: rovnice vedení tepla, časo-prostorová metoda konečných prvků, metoda Schurova doplnku, paralelní implementace

Abstract

This bachelor thesis will discuss the one-dimensional transient heat conduction problem in space-time domain. The numerical solution is based on the time-space finite element method, which leads to a system of linear equations. Thesis studies the convergence of finite element method and shows the relationship with the convergence of bilinear interpolation. It also shows how to decompose a system of linear equations using Schur complement in the space-time domain into smaller areas. Finally, we discuss the possibility of parallel implementation of the problem.

Key Words: heat equation, space-time finite element method, Schure complement method, paralel implementation

Obsah

Seznam použitých zkratek a symbolů	7
Seznam obrázků	8
Seznam tabulek	9
1 Úvod	10
2 Modelová úloha	11
2.1 Rovnice vedení tepla	11
2.2 Příklad, analytické řešení	11
2.3 Variační formulace	13
3 Metoda konečných prvků MKP v časo-prostoru	15
3.1 Diskretizace časo-prostorové oblasti	15
3.2 MKP prostor	16
3.3 Konvergence MKP a interpolačního řešení	19
4 Paralelizace	23
4.1 Rozklad úlohy na podoblasti	23
4.2 Metoda Schurova doplňku	24
4.3 Poznámky k paralelní implementaci	25
5 Numerické experimenty	27
5.1 Specifikace řešené úlohy	27
5.2 Konvergence bilineární interpolace	28
5.3 Konvergence MKP-řešení	29
5.4 Ověření principu metody Schurova doplňku	31
6 Závěr	32
7 Literatura	33
8 Přílohy	34

Seznam použitých zkratek a symbolů

I	– Jednotková matice
MKP	– Metoda konečných prvků
S	– Schurův Doplněk
GK	– Gaussova kvadratura
$ x $	– Absolutní hodnota x
$\ x\ $	– Norma vektoru x
$C^1(\Omega)$	– Funkce se spojitými prvními derivacemi na Ω
$\bar{\Omega}$	– Uzávěr množiny Ω
∇	– Gradient
$y \in A$	– číslo y je prvkem množiny A
$A \subset B$	– množina A je podmnožinou množiny B
$\forall x$	– pro všechna x

Seznam obrázků

1	Graf řešení (3) pro $c=25$	12
2	na levé straně rozdělení oblasti Ω na obdélníky $\mathcal{T}_{h,\Delta t}$, v pravo jeden obdélník O_k	15
3	Bázová funkce $\varphi_i(x, t)$	16
4	Transformace referenčního obdélníka \hat{O}_k na obdélník O_k	18
5	Rozložení oblasti Ω do 4 podoblastí	24
6	Konvergenční křivka interpolace v logaritmické stupnici	28
7	Graf řešení MKP pro $L = 4$	29
8	Konvergenční křivky MKP v logaritmické stupnici	30
9	Struktura matice A v levo, v pravo struktura přeuspořádané matice	31

Seznam tabulek

1	Hodnoty kořenů x_i vah a w_i pro Gauss-Legendrovu kvadraturu	21
2	Urovň diskretizace L pro oblast Ω	27
3	Chyba řešení úlohy pomocí interpolace	28
4	Chyba MKP-řešení	29

1 Úvod

Rozvoj paralelních počítačů umožňuje použít výpočetní metody, které by dříve nebyly myslitelné. Inženýrské úlohy modelované parciálními diferenciálními rovnicemi, např. mechanika, se dnes umí řešit v řádu minut pro diskretizace v miliardách prostorových neznámých. Tradiční řešení časově závislých úloh diskretizací do časových vrstev není vhodné pro paralelní implementaci. Nově se proto uvažuje čas jako další prostorová proměnná. Diskretizace metodou konečných prvků v časo-prostoru vede na rozsáhlé soustavy rovnic, které však lze dobře paralelizovat v časo-prostorové doméně [1, 2, 3]. Numerické řešení navíc konverguje uniformně v čase, na rozdíl od tradičních časových schémat např. Eulerovy metody nebo metody Runge-Kutta.

V této práci se zabýváme nestacionární úlohou vedení tepla v tyči a jejím numerickým řešením metodou konečných prvků. Práce je strukturována následovně. V kapitole 2 se nejprve seznámíme s parciální diferenciální rovnicí vedení tepla a odvodíme variační formulaci. V kapitole 3 se zabývám časo-prostorovou metodou konečných prvků, která vede na soustavu lineárních rovnic. Kapitola 3 ukazuje jak dekomponovat časoprostorovou doménu do oblastí a navrhuje paralelní řešení. Obsahem kapitoly 5 je rozbor výsledků numerických experimentů provedených v praktické části této práce.

2 Modelová úloha

2.1 Rovnice vedení tepla

Budeme se zabývat parciální diferenciální rovnicí vedení tepla v jednorozměrné tyči délky L v čase $\langle 0, T \rangle$ s konstantní hustotou ρ a konstantní měrnou tepelnou kapacitou c . Funkcí $u = u(x, t)$ rozumíme teplotu v bodě x a čase t . Označme $\rho c u(x, t)$ jako hustotu tepelné energie. Dále tepelným tokem $\tau(x, t)$ nazveme množství tepla, procházející bodem x za jednotku času t ve směru z části $\langle x - h, x \rangle$ do části $\langle x, x + h \rangle$. Definujme také počáteční stav $u(x, t_0) = u_0(x)$.

$$\rho c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial \tau}{\partial x}(x, t)$$

Poznámka 2.1 pro jednoduchost neuvažujeme žádné tepelné zdroje.

Vztah mezi teplotou a tepelným tokem určuje Fourierův zákon. Říká nám, že vektor hustoty tepelného toku τ je úměrný gradientu teploty ∇u v součinu s konstantou tepelné vodivosti k a má opačný směr.

$$\tau = -k \frac{\partial u}{\partial x}$$

kde $k > 0$.

Bude-li konstanta $\rho = 1$, pak dosazením z Fourierova zákona získáme rovnici:

$$c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = 0 \tag{1}$$

a počáteční úlohu

$$(P) \quad \begin{cases} c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = 0, & x \in (0, L), \quad t \in (0, T), \\ u(0, t) = 0, & t \in (0, T), \\ u(L, t) = 0, & t \in (0, T), \\ u(x, t_0) = u_0(x) & x \in \langle 0, L \rangle. \end{cases}$$

Poznámka 2.2 Okrajové podmínky v počáteční úloze (P) jsou uvedeny jako příklad a mohou být různě změněny.

2.2 Příklad, analytické řešení

Uvažujeme počáteční úlohu (P) pro $x \in (0, 1)$, $t \in (0, 2)$ s s touto počáteční podmínkou:

$$u(x, t_0) = \sin(\pi x) \quad x \in \langle 0, 1 \rangle. \tag{2}$$

Výsledek analytického řešení této úlohy je ve tvaru:

$$u(x, t) = e^{-\frac{\pi^2}{c}t} \sin(\pi x). \quad (3)$$

Ověřme si nyní, že výsledek je správný. Nejprve provedeme výpočet potřebných parciálních derivací:

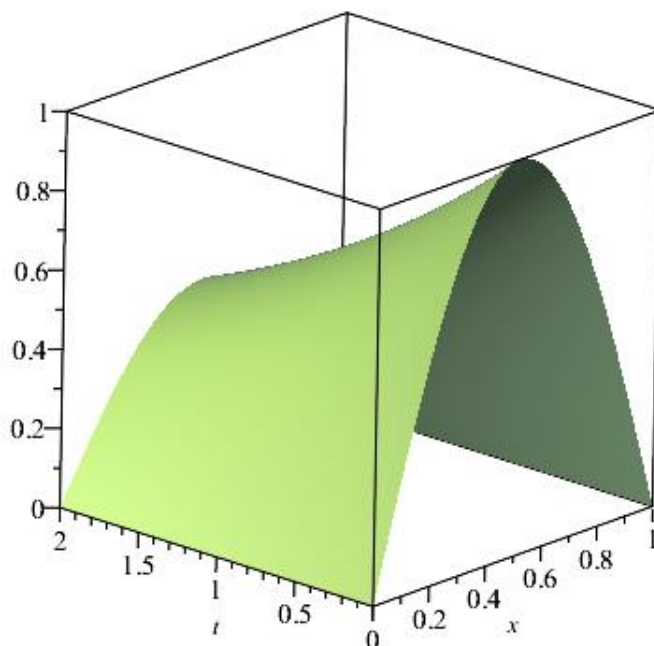
$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = -\frac{\pi^2 e^{-\frac{\pi^2}{c}t} \sin(\pi x)}{c}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = -\pi^2 e^{-\frac{\pi^2}{c}t} \sin(\pi x). \quad (5)$$

Po dosazení parciálních derivací (4) a (5) do rovnice (1) dostaneme:

$$-\pi^2 e^{-\frac{\pi^2}{c}t} \sin(\pi x) + \pi^2 e^{-\frac{\pi^2}{c}t} \sin(\pi x) = 0.$$

(3) navíc splňuje okrajové a počáteční podmínky a proto je teď již zřejmé, že (3) je řešením počáteční úlohy (P).



Obrázek 1: Graf řešení (3) pro $c=25$

2.3 Variační formulace

Odvodíme variační formulaci úlohy (P) . Začneme definicí množiny testovacích funkcí V :

$$V := \{ v(x, t) \in C^1(\overline{\Omega}) : v(0, t) = v(L, t) = v(x, 0) = 0; \forall t \in \langle 0, T \rangle \}.$$

Variační formulaci získáme z rovnice (1) a libovolné testovací funkce $v(x)$ z množiny V za pomoci následujících úprav:

$$\begin{aligned} c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) &= 0 \quad / \cdot v(x, t), \\ c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t)v(x, t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t)v(x, t) &= 0 \quad / \int_0^T \int_0^L dxdt, \\ \int_0^T \int_0^L c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t)v(x, t) dxdt - \underbrace{\int_0^T \int_0^L \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t)v(x, t) dxdt}_{=: \delta} &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Vezměme z rovnosti (6) část označenou jako δ pro pevnou proměnnou t .

$$- \int_0^L \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t)v(x, t) dx \quad (7)$$

Připomeňme si teď vzorec pro integraci per partes:

$$\int_a^b \varphi \cdot v' = [\varphi \cdot v]_a^b - \int_a^b \varphi' \cdot v.$$

Následně pomocí per partes upravme výraz (7).

$$- \int_0^L \underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t)}_{=: \varphi'} v(x, t) dx = \int_0^L \underbrace{\frac{\partial u}{\partial x}(x, t)}_{=: \varphi} \frac{\partial v}{\partial x}(x, t) dx - \underbrace{\left[\frac{\partial u}{\partial x}(x, t)v(x, t) \right]_0^L}_{=: 0}$$

Hraniční člen vymizí, viz definice V . Po dosazení zpět získáme

$$\int_0^T \int_0^L c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t)v(x, t) dxdt + \int_0^T \int_0^L \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \frac{\partial v}{\partial x}(x, t) dxdt = 0.$$

Variační formulace úlohy (P) je

$$(V) \quad \begin{cases} \text{Hledáme } u \in U \\ a(u, v) = 0 \quad \forall v \in V, \end{cases}$$

kde

$$U := \{ u(x, t) \in C^1(\overline{\Omega}) : u(0, t) = u(L, t) = 0; \forall t \in \langle 0, T \rangle; u(x, 0) = u_0(x); \forall x \in \langle 0, L \rangle \},$$

$$a(u, v) = \int_0^T \int_0^L c \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) v(x, t) dx dt + \int_0^T \int_0^L \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \frac{\partial v}{\partial x}(x, t) dx dt$$

je bilineární forma.

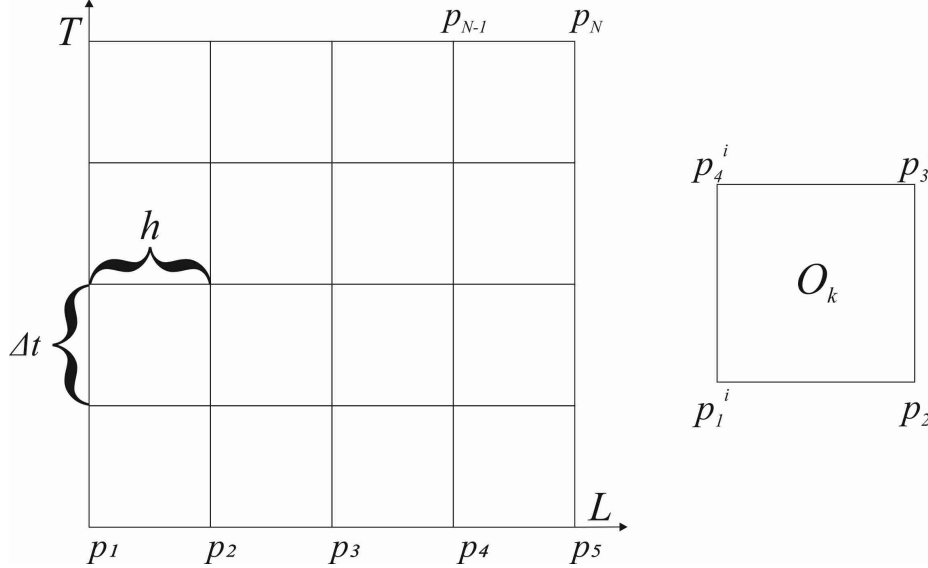
Tuto formulaci lze homogenizovat. Najdeme zobrazení $\tilde{u}_0(x)$ počáteční podmínky $u_0(x)$ do Ω . Pak (V) (2.3) je ekvivalentní s

$$(V) \quad \begin{cases} \text{Hledáme } u_H \in V : \\ a(u_H, v) = -a(\tilde{u}_0, v) \quad \forall v \in V. \end{cases}$$

Poznámka 2.3 (V) nemusí mít řešení. Pro důkaz existence řešení se prostor V volí sofistikovaněji, což však přesahuje rámec této práce.

3 Metoda konečných prvků MKP v časo-prostoru

3.1 Diskretizace časo-prostorové oblasti



Obrázek 2: na levé straně rozdělení oblasti Ω na obdélníky $\mathcal{T}_{h,\Delta t}$, v pravo jeden obdélník O_k

Jednodimenzionální úlohu v časo-prostoru, kterou řešíme na oblasti $\Omega \in (0, L) \times (0, T)$, rozdělíme na obdélníky s krokem h v ose x a krokem Δt v ose t (viz obrázek 2). Tím vznikne síť uzlů. Všechny takto získané uzly indexujeme čísly 1 až N , kde N odpovídá celkovému počtu uzlů. Uzly sítě uspořádáme a označíme:

$$p_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

Každý z uzlů je charakterizován svoji prostorovou a časovou souřadnicí $p_i = (x_i, t_i)$.

Označme $\mathcal{T}_{h,\Delta t}$ jako množinu všech obdélníků. Celkový počet obdélníků je dán hodnotou M .

$$\mathcal{T}_{h,\Delta t} = (O_1, O_2, O_3, \dots, O_M)$$

$$M = \frac{T}{\Delta t} \frac{L}{h}$$

Přičemž předpokládáme že T je dělitelné Δt a L je dělitelné h .

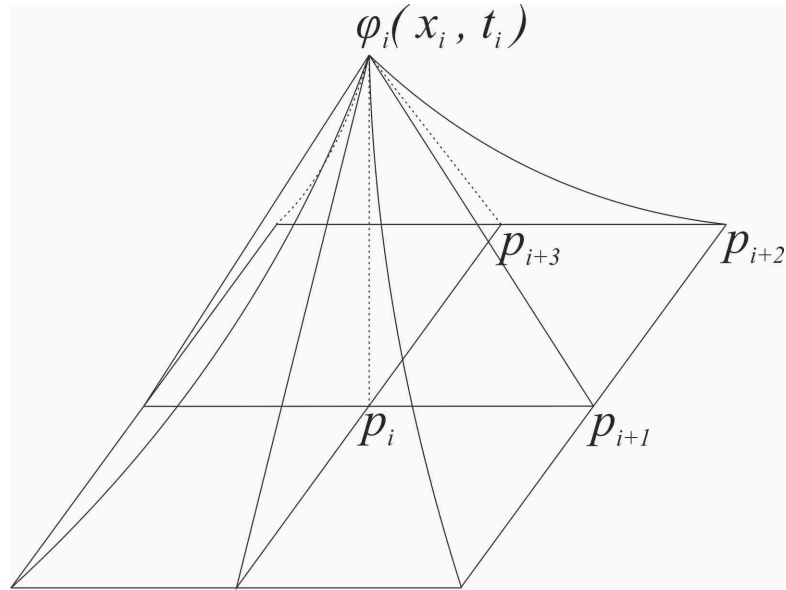
$$\bar{\Omega} = \bigcup_{O_k \in \mathcal{T}_{h,\Delta t}} O_k$$

Obdélník reprezentujeme uzly v jeho rozích (lokální indexování)

$$O_k = (p_1^i, p_2^i, p_3^i, p_4^i).$$

3.2 MKP prostor

- Řešení $u(x, t)$ i testovací funkce $v(x, t)$ budou spojité v Ω a bilineární na $\mathcal{T}_{h, \Delta t}$.
- Označme si zvlášť indexy uzlů I_v , ve kterých je hodnota funkce $u(x, t)$ předepsána okrajovými podmínkami: $x_i = 0$ nebo $x_i = L$.
- Totéž provedeme s indexy uzlů I_u pro počáteční podmínku: $t_i = 0 \wedge x \in (0, L)$.



Obrázek 3: Bázová funkce $\varphi_i(x, t)$

3.2.1 Bázové funkce

Definujme bilineární bázové funkce $\varphi_i(x, t)$ pro uzly $p_i = (x_i, t_i)$, takto:

$$\varphi_i(x_i, t_i) = 1, \quad \varphi_i(x_j, t_j) = 0 \quad \forall j \neq i.$$

Pro konkrétní body obdélníkového elementu $(0, h) \times (0, \Delta t)$ mají funkce následující tvar:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x_i, t_i) &= \frac{1}{h\Delta t}(h-x)(\Delta t-t), \\ \varphi_2(x_i, t_i) &= \frac{1}{h\Delta t}x(\Delta t-t), \\ \varphi_3(x_i, t_i) &= \frac{1}{h\Delta t}xt, \\ \varphi_4(x_i, t_i) &= \frac{1}{h\Delta t}(h-x)t. \end{aligned}$$

Bázové funkce na všech dalších obdélnících O_k získáme posunem počátku souřadnicového systému $(x, t) + p_1^i$.

3.2.2 MKP aproximace (V)

Testovací funkce $v(x, t)$ beru pouze tyto:

$$v(x, t) = \sum_{i \notin I_v \cup I_u} v_i \varphi_i(x, t)$$

Místo úlohy (V) na nekonečně dimenzionálním prostoru V budeme řešit Galerkinovu aproximaci na prostoru

$$V^{h, \Delta t} = \langle \varphi_i \rangle \quad i \notin I_v \cup I_u.$$

Pak

$$V^{h, \Delta t} \subset V.$$

Galerkinova aproximace úlohy (V) je

$$(V^{h, \Delta t}) \quad \begin{cases} \text{Hledáme } u^H(x, t) = \sum_{i \notin I_v \cup I_u} u_i^H \varphi_i(x, t) : \\ a(u^H, v) = -a(\tilde{u}_0, v) \quad \forall v \in V^{h, \Delta t}. \end{cases}$$

3.2.3 Soustava lineárních rovnic

Ukážeme, že $V^{h, \Delta t}$ je díky bilinearitě soustavou lineárních rovnic:

$$a(u^H(x, t), \sum_{i \notin I_v \cup I_u} v_i \varphi_i(x, t)) = -a(\tilde{u}_0(x, t), \sum_{i \in I_u} v_i \varphi_i(x, t))$$

$$\underbrace{\sum_{i \notin I_v \cup I_u} v_i a(u^H, \varphi_i(x, t))}_{\text{Násobení vektor} \times \text{vektor}} = - \sum_{i \in I_u} v_i a(\tilde{u}_0, \varphi_i(x, t))$$

$$(V^{h, \Delta t}) \quad \begin{cases} \text{Hledáme } u^H(x, t) = \sum_{j \notin I_v \cup I_u} u_j^H \varphi_j(x, t) : \\ a(u^H, \varphi_i) = -a(\tilde{u}_0, \varphi_i) \quad \forall i \notin I_v \cup I_u. \end{cases}$$

Opět z bilinearity $a(u, v)$:

$$a\left(\sum_{j \notin I_v \cup I_u} u_j^H \varphi_j, \varphi_i\right) = -a\left(\sum_{j \in I_u} (\tilde{u}_0)_j \varphi_j, \varphi_i\right) \quad \forall i \in 1, \dots, N.$$

$$\sum_{j \notin I_v \cup I_u} (u^H)_j \underbrace{a(\varphi_j, \varphi_i)}_{=: A} = - \sum_{j \in I_u} (\tilde{u}_0)_j \underbrace{a(\varphi_j, \varphi_i)}_{=: \tilde{A}} \quad \forall i \in 1, \dots, N.$$

Úloha $(V^{h, \Delta t})$ je tedy ekvivalentní s $Au^H = -\tilde{A}\tilde{u}_0$, kde A matice $N \times N$ a \tilde{A} matice $N \times Nu$ (Nu je počet prvků I_u).

3.2.4 Sestavení matice A a vektoru pravých stran b

Matice $A_{i,j}$ soustavy má tvar:

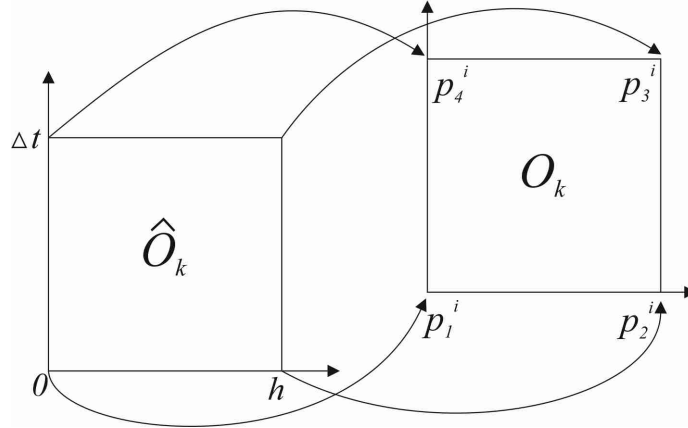
$$A_{i,j} = \int_0^T \int_0^L c \frac{\partial \varphi_j}{\partial t}(x,t) \varphi_i(x,t) + \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}(x,t) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(x,t) dt dx.$$

Rozepíšeme $A_{i,j}$ jako součet jednotlivých obdélníků:

$$A_{i,j} = \sum_{k=1}^M \underbrace{\int_{O_k} c \frac{\partial \varphi_j}{\partial t}(x,t) \varphi_i(x,t) + \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}(x,t) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(x,t) dx dt}_{=: \psi}$$

ψ bude nenulové pouze pro p_i, p_j rohy obdélníku O_k . Zavedeme lokální matici tuhosti, kterou stačí spočítat pro referenční obdélník $(0, h) \times (0, \Delta t)$:

$$A^k \in \mathbb{R}^{4 \times 4}, A^k = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & a_{1,4} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & a_{2,4} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} \\ a_{4,1} & a_{4,2} & a_{4,3} & a_{4,4} \end{pmatrix}, A = \sum_{k=1}^M A^k.$$



Obrázek 4: Transformace referenčního obdélníka \hat{O}_k na obdélník O_k

Zavedme si referenční obdélník \hat{O}_k a transformaci na obdélník O_k (obrázek 4)

$$\begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} = p_1^i + (p_2^i - p_1^i) \cdot \hat{x} + (p_4^i - p_1^i) \cdot \hat{t},$$

$$\text{kde } \hat{x} \in (0, h) \quad \hat{t} \in (0, \Delta t),$$

$$R = (p_2^i - p_1^i, p_4^i - p_1^i) = I,$$

$$dxdt = \underbrace{|\det(R)|}_{=1} d\hat{x}d\hat{t}.$$

Pro transformované funkce φ_i platí:

$$\begin{aligned}\varphi_i(x, t) &= \hat{\varphi}_i(\hat{x}, \hat{t}), \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial t}(x, t) &= \frac{\partial \hat{\varphi}_i}{\partial \hat{t}}(\hat{x}, \hat{t}), \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(x, t) &= \frac{\partial \hat{\varphi}_i}{\partial \hat{x}}(\hat{x}, \hat{t}).\end{aligned}$$

Jednotlivé prvky lokální matice soustavy pak vypočteme podle:

$$a_{i,j} = \int_0^{\Delta t} \int_0^h c \frac{\partial \hat{\varphi}_j}{\partial \hat{t}}(\hat{x}, \hat{t}) \hat{\varphi}_i(\hat{x}, \hat{t}) + \frac{\partial \hat{\varphi}_j}{\partial \hat{x}}(\hat{x}, \hat{t}) \frac{\partial \hat{\varphi}_i}{\partial \hat{x}}(\hat{x}, \hat{t}) \cdot d\hat{x}d\hat{t}.$$

Globální matici \hat{A} můžeme sestavit z lokálních příspěvků matice A^k podle následujícího algoritmu, P^i jsou indexy uzlů $p_1^i, p_2^i, p_3^i, p_4^i$ obdélníku O_k .

1. $\hat{A} = 0$;
2. **for** $i = 1:M$ **do**
3. $\hat{A}(P^i, P^i) += A^k$;
4. **end**

Nakonec v matici \hat{A} vynulujeme prvky odpovídající indexům okrajových podmínek.

Vektor pravých stran b bude nenulový pouze v indexech uzlů I_u , kde je počáteční podmínka $u_0(x)$ (viz. kapitola 2. poznámka 2.1):

$$\begin{aligned}b_i &= u_0(i) \quad \forall i \in I_u, \\ b_i &= 0 \quad \forall i = 1, \dots, N \setminus I_u.\end{aligned}$$

3.3 Konvergence MKP a interpolačního řešení

Nejprve definujme bilineární interpolační funkci I_u^h .

$$I_u^h(x, t) = \sum_{i=1}^N u(x_i, t_i) \varphi_i(x, t),$$

kde $\varphi_i(x, t)$ jsou spojitě po částech lineární bázové funkce.

Je známo, že rychlost konvergence MKP řešení lze odhadnout rychlostí konvergence bilineární interpolace v uzlech sítě [2]. Popišme proto si výpočet, kde chybu interpolačního řešení odhadneme jako:

$$\text{err}_{I_u}^0(h) = \|u - I_u^h\|_{L_2(\Omega)} = \sqrt{\int_0^T \int_0^L [u(x, t) - I_u^h(x, t)]^2 dx dt} \quad (8)$$

Chybu derivací odhadujeme:

$$\text{err}_{I_u}^1(h) = \|\nabla(u - I_u^h)\|_{L_2(\Omega)} = \sqrt{\int_0^T \int_0^L \left[(\nabla[u(x, t) - I_u^h(x, t)]) \right]^2 dx dt} \quad (9)$$

Obdobně definujeme i funkce $\text{err}_{MKP}^0(h)$ a $\text{err}_{MKP}^1(h)$.

Poznámka 3.1 Hodnoty dvojných integrálů vypočítáme užitím složené Gaussovy kvadrurní formule (kapitola 3.3.1).

Očekáváme polynomiální konvergenci řádu r :

$$\text{err}(h) \leq c \cdot h^r.$$

To je ekvivalentní s

$$\log(\text{err}(h)) \leq \log c + r \cdot \log h \quad (10)$$

a tedy v grafu v logaritmické škále uvidíme řád konvergence r jako směrnici asymptoty. Tento poznatek se nám bude hodit při vyhodnocování numerických experimentů v kapitole 5.

3.3.1 Gaussova kvadratura

Gaussova kvadratura k -tého řádu je kvadrurní pravidlo, které přesně integruje polynomy stupně $n = 2k - 1$ a méně. Této přesnosti při minimálním počtu vyčíslení funkce $f(x)$ je dosaženo vhodnou volbou bodů x_i a vah w_i . Dá se ukázat, že těmito body jsou kořeny ortogonálních polynomů. Za systém ortogonálních polynomů vezmeme Legendrovy polynomy, které jsou definovány na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$. Definice Gaussovy kvadrurní formule pro funkci jedné proměnné je předpis:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^k w_i f(x_i),$$

Kde x_i jsou kořeny ortogonálních polynomů a w_i je váha daného bodu.

Hodnoty kořenů a vah pro Gaussovu-Legendrovu kvadraturu nízkého řádu jsou uvedeny v tabulce 1.

Jelikož jsou hodnoty v tabulce 1 pro integraci na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$, je potřeba při integraci na intervalu $\langle a, b \rangle$ převést požadovaný integrál na tento interval za pomoci následující transformace:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right) dx.$$

Aplikováním Gaussova kvadrurního pravidla na tento vztah získáme vzorec

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^k w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right).$$

k	x_i	w_i
1	0	2
2	$\pm\sqrt{\frac{1}{3}}$	1
3	0	$\frac{8}{9}$
	$\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{5}{9}$
4	$\pm\sqrt{\frac{3}{5} - \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$
	$\pm\sqrt{\frac{3}{5} + \frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	$\frac{18-\sqrt{30}}{36}$
5	0	$\frac{128}{225}$
	$\pm\frac{1}{3}\sqrt{5 - 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	$\frac{322+13\sqrt{70}}{900}$
	$\pm\frac{1}{3}\sqrt{5 + 2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}$

Tabulka 1: Hodnoty kořenů x_i vah a w_i pro Gauss-Legendrovu kvadraturu

Definice Gaussovy kvadraturní formule pro funkci dvou proměnných je předpis:

$$\int_a^b \int_c^d f(y, t) dy dt \approx \sum_{\alpha=0}^k w_{\alpha} \sum_{\beta=0}^k w_{\beta} f(x_{\alpha}, x_{\beta}),$$

kde $x_{\alpha, \beta}$ jsou kořeny ortogonálních polynomu a $w_{\alpha, \beta}$ jsou jejich váhy.

Ke zpřesnění výpočtu integrálu je vhodné integrovaný interval rozdělit na síť mnoha menších čtverců a ty poté samostatně integrovat. Výsledný integrál je pak jejich součtem:

$$\int_a^b \int_c^d f(y, t) dy dt = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \int_{a_{i-1}}^{a_i} \int_{c_{j-1}}^{c_j} f(y, t) dx dt,$$

kde N je počet dílků v $\langle a, b \rangle$ a M je počet dílků v $\langle c, d \rangle$. Dosazením Gaussovy kvadraturní formule získáme:

$$\int_a^b \int_c^d f(y, t) dy dt \approx \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \sum_{\alpha=0}^k \sum_{\beta=0}^k w_{\alpha} w_{\beta} f(x_{\alpha}, x_{\beta}).$$

Následuje ukázka MATLAB[®] zdrojového kódu pro Gaussovu kvadraturu řádu $k = 2$.

```

function [ value ] = intFunciton( x,t )
%funkce ktera bude integrovana
value = (u(x,t)-IhU(x,t))^2;
end
function [I] = gaussQuad2D(a,b,c,d,h)
%slozena Gauss-Legendre kvadratura
%vstupni parametry:
%a - dolni mez 1. integralu
%b - horni mez 1. integralu
%c - dolni mez 2. integralu
%d - horni mez 2. integralu
%h - krok na intervalu (a,b), resp. (c,d)
%vystupni parametry:
%I - hodnota integralu
%hodnoty pro rad k=2 na intervalu [-1,1]
x=[1/sqrt(3);-1/sqrt(3)];
w=[1;1];
I=0;
%prepocitani vah w na novy interval
ww=h/2*w;
for i=a:h:b-h
    pxx=h/2*x+(2*i+h)/2;
    %prepocitani korenu xx na novy interval
    for j=c:h:d-h
        %prepocitani korenu xy na novy interval
        pxy=h/2*x+(2*j+h)/2;
        for alpha=1:length(x)
            for beta=1:length(w)
                %vypocet integralu pro jeden dilek
                S=(ww(alpha)*ww(beta)*intFunciton(pxx(alpha),pxy(beta)));
                %pricteni dilku k celkove hodnote integralu
                I=I+S;
            end
        end
    end
end
end
end
end
end

```

4 Paralelizace

4.1 Rozklad úlohy na podoblasti

časo-prostorovou úlohu na oblasti $\Omega := \langle 0, L \rangle \times \langle 0, T \rangle$ rozložíme na n podoblastí s krokem H_i v ose x a krokem ΔT_i v ose t (podoblasti nemusí mít stejný rozsah), vzniklé podoblasti označíme jako Ω_i kde $i = 1, \dots, n$. Z rozdělení do podoblastí vynecháme množiny uzlů I_v a I_u , kde je hodnota funkce zadána okrajovými podmínkami. Ze sítě uzlů $I = \{p_1, \dots, p_N\}$ vybereme podmnožiny bodů, tak aby odpovídaly jednotlivým podoblastem I_1, \dots, I_n a kostře, která je tvořena body na hranici mezi podoblastmi I_S . Pro tyto vybrané podmnožiny platí:

$$I \setminus \{I_v, I_u\} = I_1 \cup I_2 \cup \dots \cup I_n \cup I_S.$$

$I_1, I_2, \dots, I_n, I_S$ jsou disjunktní množiny.

Příklad rozložení oblasti Ω do 4 podoblastí je znázorněn na obrázku 5.

Původní soustavu

$$Au = b$$

přeuspořádáme podle nových indexových množin pro podoblasti:

$$\begin{aligned} A_i &= A_{I_i, I_i}, \\ A_{SS} &= A_{I_S, I_S}, \\ A_{Si} &= A_{I_S, I_i}, \\ A_{iS} &= A_{I_i, I_S}, \\ b_i &= b_{I_i}, \\ b_S &= b_{I_S}, \end{aligned}$$

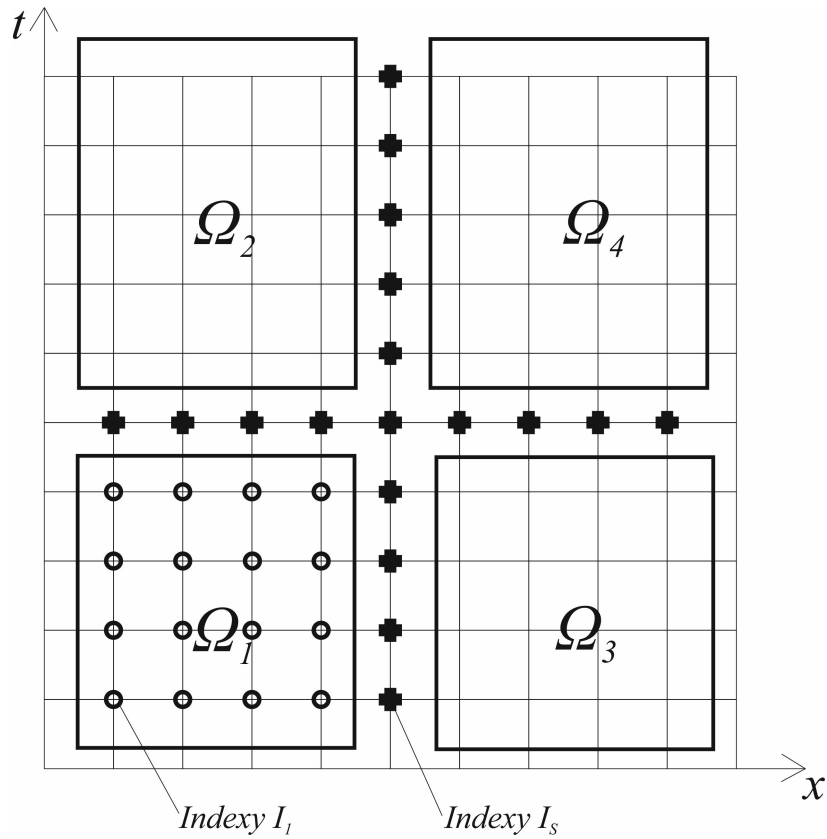
kde $i = \{1, \dots, n\}$.

Nově budeme řešit soustavu:

$$\begin{pmatrix} A_1 & & & A_{1S} \\ & A_2 & & A_{2S} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & A_N & A_{NS} \\ A_{S1} & A_{S2} & \cdots & A_{SN} & A_{SS} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \\ u_S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \\ b_S \end{pmatrix}, \quad (11)$$

kde u_i je vektor neznámých na podoblasti Ω_i a u_S představuje vektor neznámých pro hranice mezi podoblastmi.

Poznámka 4.1 Matice soustavy A je nesymetrická.



Obrázek 5: Rozložení oblasti Ω do 4 podoblastí

4.2 Metoda Schurova doplňku

Budeme řešit přeuspořádanou soustavu $Au = b$. Nejprve se nám však bude hodit abychom rozdělili řešení u na partikulární u^P a homogenní u^H část.

$$u = u^P + u^H$$

Následně vypočteme jednotlivé části řešení použitím Schurova doplňku S . Postup řešení se bude skládat ze tří kroků:

1. Výpočet partikulárního řešení u_i^P pro podoblasti Ω_i :

$$A_i u_i^P = b_i.$$

2. Výpočet řešení na kostře u_S :

$$S u_S = c,$$

kde

$$S = A_S - \sum_{i=1}^N A_{Si} A_i^{-1} A_{iS},$$

$$c = b_S - \sum_{i=1}^N A_{Si} \underbrace{A_i^{-1} b_i}_{u_i^P}.$$

3. Výpočet homogenního řešení u_i^H pro podoblasti Ω_i :

$$A_i u_i^H = -A_{iS} u_S.$$

Výše uvedená procedura je vlastně bloková Gaussova eliminace (11). Nakonec získáme výsledek součtem partikulárního u^P a homogenního u^H řešení pro všechny podoblasti Ω_i :

$$u = \begin{pmatrix} u_1^P + u_1^H \\ \vdots \\ u_N^P + u_N^H \\ u_S \end{pmatrix}.$$

4.3 Poznámky k paralelní implementaci

V předešlé části jsme viděli, jak lze pomocí metody Schurova doplnku vypočítat řešení soustavy ve třech krocích. Výhodou této metody je, že kroky 1 a 3 můžeme vypočítat jednotlivě nezávisle na sobě pro všechny podoblasti. Tohoto poznatku můžeme perfektně využít pro paralelizaci výpočtu do více nezávislých procesů a dosáhnout jeho významného urychlení.

K paralelizaci můžeme například použít Master/Slave model komunikace, kde jeden z procesů bude hlavním řídicím procesem, který bude rozdělovat práci i ostatním slave procesům. Pro tento model můžeme navrhnout paralelní výpočet v následujících krocích:

1. Master proces sestaví soustavu rovnic a poté ji rozdělí do podoblastí (11), následně odešle slave procesům jejich příslušné bloky.
2. Výpočet partikulárního řešení u_i^P pro podoblasti Ω_i . Master proces může v tuto chvíli řešit také jednu z podoblastí.

$$A_i u_i^P = b_i$$

3. Master proces počká než dokončí všechny procesy předchozí krok a získá od nich jejich výsledky. Poté vypočte řešení na kostře u_S

$$S_h u_S = c,$$

kde

$$S_h = A_S - \sum_{i=1}^N A_{Si} A_i^{-1} A_{iS},$$

$$S_h = b_S - \sum_{i=1}^N A_{Si} \underbrace{A_i^{-1} b_i}_{u_i^P}.$$

4. Tento krok probíhá opět paralelně. Master rozešle slave procesům výsledek řešení na kostře u_S . Slave procesy potom vypočtou homogenní řešení u_i^H pro podoblasti Ω_i . Opět master nemusí pouze čekat než procesy práci dokončí ale může sám pracovat na jedné podoblasti.

$$A_i u_i^H = -A_{iS} u_S$$

5. Po dokončení předchozího kroku všemi procesy master přijme všechny výsledky a nakonec sestaví výsledný vektor u , jenž je řešením celé soustavy.

$$u = \begin{pmatrix} u_1^P + u_1^H \\ \vdots \\ u_N^P + u_N^H \\ u_S \end{pmatrix}$$

Poznámka 4.2 Krok 3. je slabým místem, protože master proces musí počítat inverze A_i^{-1} , to je výpočetně náročné. Pro efektivní implementaci je potřeba tento krok ještě promyslet.

5 Numerické experimenty

Text této kapitoly se zabývá popisem a vyhodnocením výsledků získaných v praktické části mé bakalářské práce. V praktické části jsem se zabýval řešením konkrétní časo-prostorové úlohy užitím MKP i pomocí bilineární interpolace. Dále jsem u obou dvou těchto řešení studoval jejich konvergenci k přesnému analytickému řešení. Obě požitá numerické metody jsem poté mezi sebou porovnal. Ověřil jsem si také funkčnost principu paralelizace za pomoci metody Shurova doplňku. Všechny výpočty byly prováděny v prostředí MATLAB[®] R2013a.

5.1 Specifikace řešené úlohy

Vezměme nyní konkrétní úlohu vedení tepla na časo-prostorové doméně $\Omega := (0, 1) \times (0, 2)$, kde $c = 25$:

$$\begin{aligned} 25 \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) &= 0, & x \in (0, 1), \quad t \in (0, 2), \\ u(0, t) &= 0, & t \in (0, 2), \\ u(1, t) &= 0, & t \in (0, 2), \\ u(x, 0) &= \sin(\pi x) & x \in \langle 0, 1 \rangle. \end{aligned}$$

Všechny následující výpočty budou prováděny pro tuto počáteční úlohu.

Poznámka 5.1 Přesné řešení této počáteční okrajové úlohy známe z kapitoly 2.2, tento fakt se nám bude hodit při výpočtu chyby numerických metod.

časo-prostorová oblast Ω bude v následujících podkapitolách diskretizována do úrovní L s krokem $h = \Delta t$, to znamená jednotlivé dílky budou mít čtvercový tvar. Přehled jednotlivých úrovní L a k nim příslušné velikosti h nalezneme v tabulce 2.

L	h
1	$\frac{1}{2}$
2	$\frac{1}{4}$
3	$\frac{1}{8}$
4	$\frac{1}{16}$
5	$\frac{1}{32}$
6	$\frac{1}{64}$

Tabulka 2: Úrovně diskretizace L pro oblast Ω

Celkový počet čtverců na Ω je dán hodnotou M a počet uzlů je označen jako N .

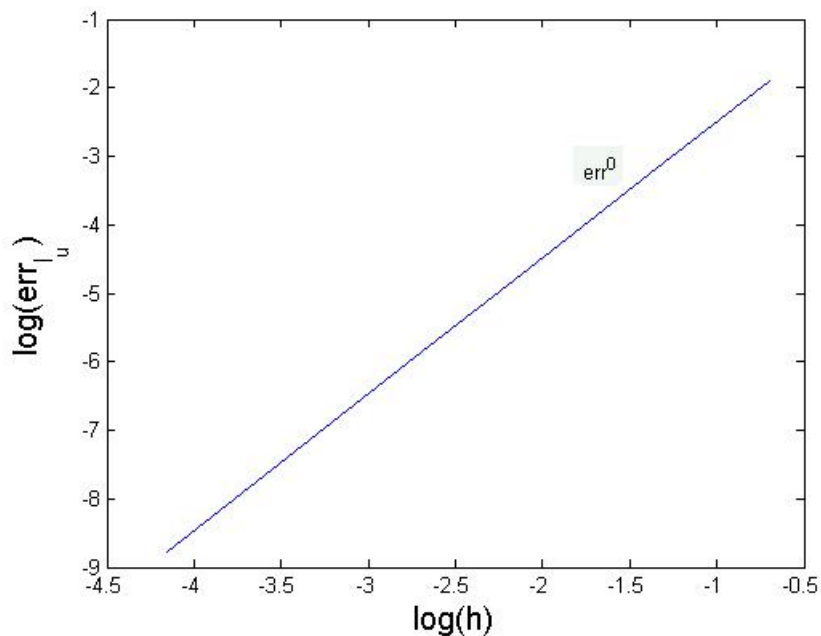
5.2 Konvergence bilineární interpolace

V této části experimentů jsem nejprve sestavil bilineární interpolační funkci $I_u^h(x, t)$. Poté jsem spočítal hodnoty funkce $\text{err}_{I_u}^0(h)$ (8) pro jednotlivé úrovně L . Při výpočtu $\text{err}_{I_u}^0$ bylo zvoleno jemnější dělení Gaussovy kvadratury než byla diskretizace časo-prostorové oblasti. Konkrétně $h_{GK} = h/2$. Řád kvadratury byl zvolen $k = 2$. Výsledky jsou zpracovány v tabulce 3.

L	h	M	N	$\ u - I_h^u\ _{L_2(\Omega)}$
1	$\frac{1}{2}$	8	15	1.144-1
2	$\frac{1}{4}$	32	45	3.376-2
3	$\frac{1}{8}$	128	153	9.500-3
4	$\frac{1}{16}$	512	561	2.400-3
5	$\frac{1}{32}$	2048	2145	5.944-4
6	$\frac{1}{64}$	8192	8385	1.486-4

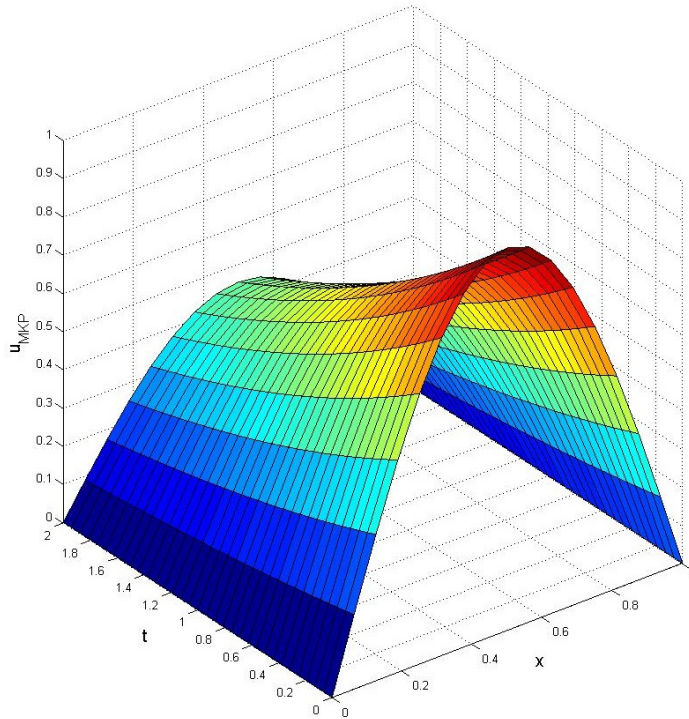
Tabulka 3: Chyba řešení úlohy pomocí interpolace

Na obrázku 6 se nachází konvergenční křivka pro $I_u^h(x, t)$. Můžeme vidět že pro jednotku v ose $\log(\text{err}_{I_u})$ se konvergenční křivka err^0 posune o 1/2 jednotky v ose $\log(h)$. Směrnice asymptoty této křivky je tedy $r = 2$. podle (10) můžeme určit, jde o konvergenci řádu 2. Výsledná konvergence je dle očekávání kvadratická.



Obrázek 6: Konvergenční křivka interpolace v logaritmické stupnici

5.3 Konvergence MKP-řešení



Obrázek 7: Graf řešení MKP pro $L = 4$

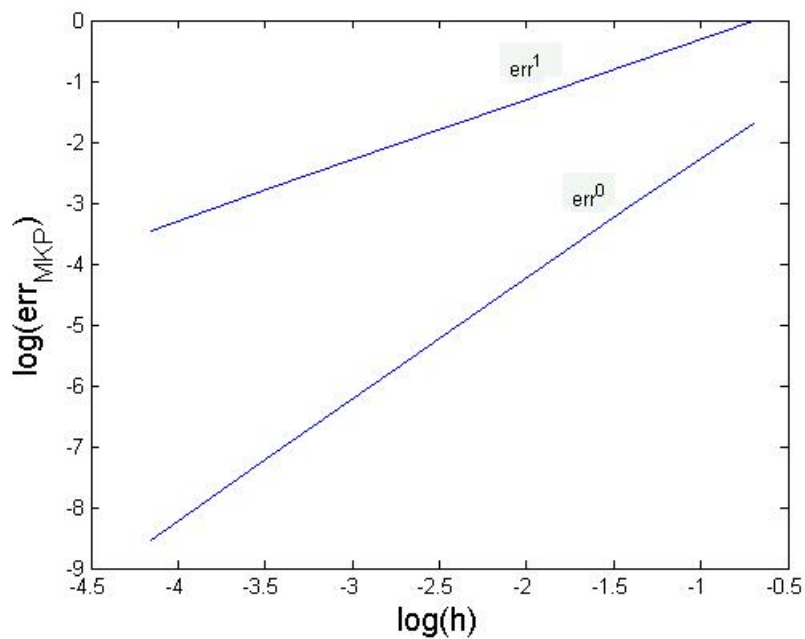
Zde se budeme zabývat řešením úlohy pomocí MKP, příklad takového řešení pro $L = 4$ je ukázán na obrázku 7.

Experiment se skládal ze sestavení funkce u_{MKP} , která aproximuje řešení zkoumané úlohy pomocí MKP. Dále jsem vypočetl hodnoty chyb $err_{MKP}^0(h)$ a $err_{MKP}^1(h)$ pro všechny úrovně L , viz tabulka 4. Při výpočtech chyb bylo opět zvolen jemnější krok Gaussovy kvadratury: $h_{GK} = h/2$, řád kvadratury byl $k = 2$.

L	h	M	N	$\ u - u_{MKP}\ _{L_2(\Omega)}$	$\ \nabla(u - u_{MKP})\ _{L_2(\Omega)}$
1	$\frac{1}{2}$	8	15	1.809-1	9.811-1
2	$\frac{1}{4}$	32	45	4.890-2	5.016-1
3	$\frac{1}{8}$	128	153	1.240-2	2.521-1
4	$\frac{1}{16}$	512	561	3.100-3	1.262-1
5	$\frac{1}{32}$	2048	2145	7.814-4	6.313-2
6	$\frac{1}{64}$	8192	8385	1.954-4	3.157-2

Tabulka 4: Chyba MKP-řešení

Obrázek 6 ukazuje konvergenční křivky err_{MKP}^0 a err_{MKP}^1 , viz (8), (9). Pro křivku err^0 pozorujeme stejně jako při řešení interpolací v uzlech sítě kvadratickou konvergenci. Pro křivku err^1 , znázorňující konvergenci derivací, vidíme, že za jednotku v ose $\log(err_{MKP})$ se posune err^1 o jednotku i v ose $\log(h)$, směrnice asymptoty této křivky je tedy podle (10) $r = 1$ a jedná se o lineární konvergenci.



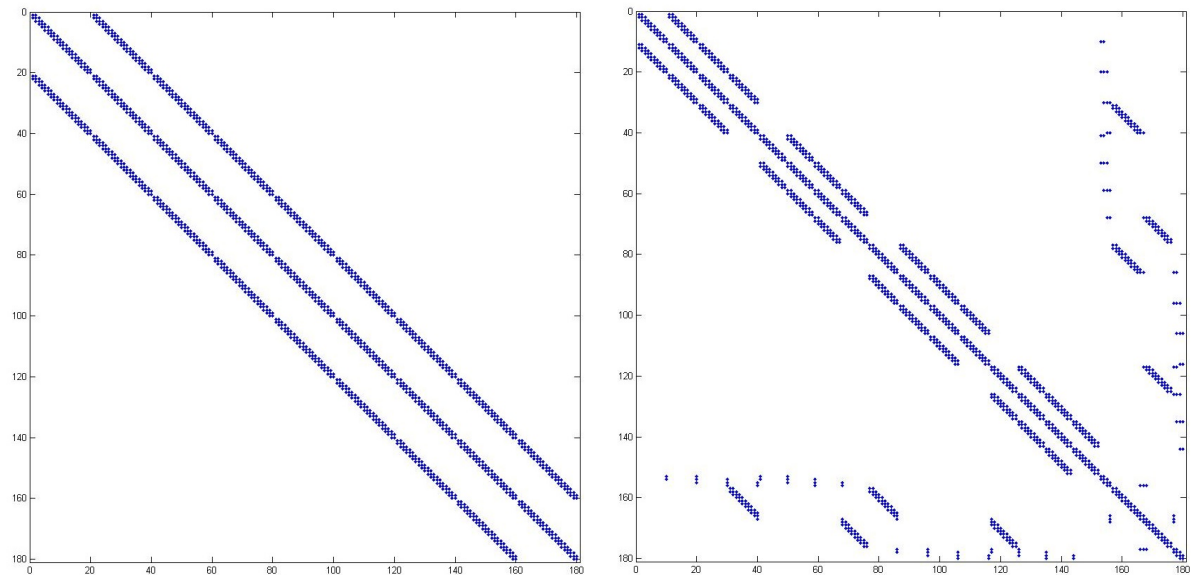
Obrázek 8: Konvergenční křivky MKP v logaritmické stupnici

5.4 Ověření principu metody Schurova doplňku

Následujícím experimentem bylo praktické aplikování metody Schurova doplňku a porovnání výsledného vektoru u_{SD} s řešením pouze pomocí MKP u_{MKP} . Pro tento experiment jsem zvolil diskretizaci Ω s krokem $h = \Delta t = 1/10$. Na síti uzlů jsem dle kapitoly 2.3 sestavil matici A a vektor pravých stran. Dalším krokem bylo již rozdělení úlohy do podoblastí, jejich počet pro náš experiment bude 4. Kroky pro rozdělení vezmeme tyto:

$$H_{1,2} = 5 \quad \Delta T_{1,2} = 10$$

Tím získám příslušné indexové množiny I_1, I_2, I_3, I_4, I_S a můžu přeuspořádat matici A a vektor pravých stran podle kapitoly 3.1. Struktura přeuspořádané matice je zobrazena na obrázku 7.



Obrázek 9: Struktura matice A v levo, v pravo struktura přeuspořádané matice

Nyní již jen zbývá spočítat výsledný vektor u_{SD} podle 3.2 a porovnat jej s vektorem u_{MKP} . Ukažme si rozdíl mezi těmito dvěma řešeními pomocí vektorové normy:

$$\|u_{SD} - u_{MKP}\| = 3.9993 \times 10^{-15}.$$

Rozdíl je tedy zanedbatelný, neboť se pohybuje přibližně na úrovni přesnosti s jakou zpracováváme čísla v počítači.

6 Závěr

V této práci jsem se zabýval řešením jednodimenzionální nestacionární úlohy vedení tepla v časo-prostorové doméně pomocí numerického řešení založeného na MKP, které vedlo na soustavy lineárních rovnic. Dále jsem navrhl jak lze řešení získaných soustav lineárních rovnic paralelizovat. Zjistil jsem, že MKP řešení konverguje kvadraticky. To potvrdilo předpoklad, že konvergenci aproximace řešení užitím MKP lze odhadnout konvergencí bilineární intepolace. Také konvergence derivací byla dle očekávání lineární.

Upozornil jsem na slabé místo mého návrhu paralelizace, které by při budoucí paralelní implemntaci úlohy mělo být lépe promyšleno.

7 Literatura

- [1] M. Neumüller, *Space-Time Methods: Fast Solvers and Applications*. Dissertation, Graz University of Technology, June 2013.
- [2] O. Steinbach: *Space-time finite element methods for parabolic problems*. Comput. Meth. Appl. Math. 15 (2015) 551-566.
- [3] VEIT, Alexander; MERTA, Michal; ZAPLETAL, Jan; LUKÁŠ, Dalibor. *Efficient solution of time-domain boundary integral equations arising in sound-hard scattering*, 24 Mar 2015 arXiv:1503.07221 [math.NA]
- [4] Blaheta Radim, *Matematické modelování a metoda konečných prvků*, VŠB-TU Ostrava, 2011.

8 Přílohy

Zdrojové kódy vytvořené v praktické části této bakalářské práce jsou přiloženy na DVD+R v kapse desek.