

Metody Dirichleta-Neumanna równoległego rozwiązywania dyskretyzacji zagadnień eliptycznych

Michał Bernardelli

Autoreferat rozprawy doktorskiej

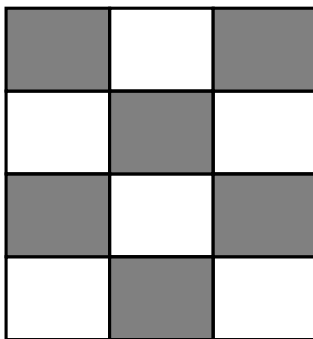
1 Wprowadzenie

Do modelowania wielu zagadnień współczesnej nauki i techniki używane są równania różniczkowe. Napotykamy na nie przy badaniach w naukach przyrodniczych, takich jak fizyka, chemia czy biologia, lecz również w ekonomii, medycynie, elektronice czy teorii chaosu deterministycznego, a przede wszystkim w zastosowaniach praktycznych – na przykład budownictwie, poszukiwaniach złóż czy pracach geologicznych. Zagadnień różniczkowych w rozpatrywanych modelach na ogół nie potrafimy rozwiązywać analitycznie. Jest to powodem, dla którego numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych jest tak potrzebnym narzędziem w rękach praktyków. W miarę rozwoju nauki rozpatrywane zjawiska stały się na tyle skomplikowane, że mimo wzrostu mocy obliczeniowej komputerów, niezbędne okazują się prace nad bardziej efektywnymi metodami znajdowania rozwiązań równań różniczkowych. Rośnie także zapotrzebowanie na algorytmy wykorzystujące zalety systemów komputerowych opartych na maszynach równoległych lub rozproszonych (patrz [2]). Przy odpowiednio zaprojektowanych obliczeniach numerycznych oraz efektywnej implementacji mają one wyraźną przewagę nad tradycyjnymi maszynami sekwencyjnymi. Właśnie połączenie rozległej wiedzy matematycznej z dobrą praktyką informatyczną, leżące u podstaw *matematyki stosowanej*, stanowi jedno z największych wyzwań dla współczesnych i przyszłych naukowców.

Metoda Dirichleta-Neumanna równoległego rozwiązywania dyskretyzacji zagadnień eliptycznych należy do klasy metod dekompozycji obszaru (ang. *Domain Decomposition Methods*). Metody dekompozycji obszaru polegają na rozbięciu zagadnienia różniczkowego cząstkowego określonego na pewnym obszarze na możliwie słabo ze sobą powiązane zagadnienia na mniejszych podobzariach (rozłącznych lub nie). Dekompozycja może nastąpić na poziomie zagadnień różniczkowych bądź na etapie rozwiązywania układów rów-

nań algebraicznych (liniowych lub nieliniowych) powstałych z aproksymacji rozpatrywanych dyskretyzacji. Stosując różne dekompozycje otrzymujemy różne metody, charakteryzujące się różnorodnymi własnościami. Dostępna jest obszerna literatura poświęcona metodzie dekompozycji obszaru. Z monografii, w których zebrane zostały jej podstawy z pewnością należy wymienić [14] i [16], a przede wszystkim najnowszą spośród wydanych pozycji [17]. Ich uzupełnienie stanowią artykuły konferencyjne (ang. *proceedings*) opublikowane w formie książkowej (www.ddm.org). Międzynarodowe konferencje poświęcone metodom dekompozycji obszaru odbywają się od roku 1987 (patrz www.ddm.org/conferences.html). Ostatnia konferencja, oznaczona numerem 18, odbyła się w styczniu 2008 roku w Izraelu (www.cs.huji.ac.il/conferences/dd18).

Jedną z najczęściej stosowanych metod dyskretyzacji, ze względu na jej szybkość zbieżności, jest MES – *metoda elementu skończonego* (patrz np. [5]). Właśnie dlatego dyskretyzacje rozważane w pracy są dokonywane tą metodą. Prowadzą one do układów równań o bardzo dużej liczbie niewiadomych oraz złym uwarunkowaniu (patrz [3], [4], [7]). Rozwiązywanie tych układów równań jest centralnym problemem przy numerycznym rozwiązywaniu równań różniczkowych cząstkowych. Ze względu na wymienione powyżej własności konieczne jest równoległe rozwiązywanie tych układów, na ogół w procesach iteracyjnych o niewielkiej liczbie iteracji. Kryterium to spełniają właśnie metody dekompozycji obszaru – w szczególności metody Dirichleta-Neumanna. Opierają się one na podziale obszaru wyjściowego przypominającym wizualnie wzór szachownicy (w dwóch wymiarach), porównaj rys. 1. Przy tym podziale każda iteracja sprowadza się do niezależnych obliczeń na podobszarach (polach) typu Dirichleta („białych”) i Neumanna („czarnych”).



Rysunek 1: Przykładowy podział obszaru w dwóch wymiarach na podobszary Neumanna (czarne) i Dirichleta (białe).

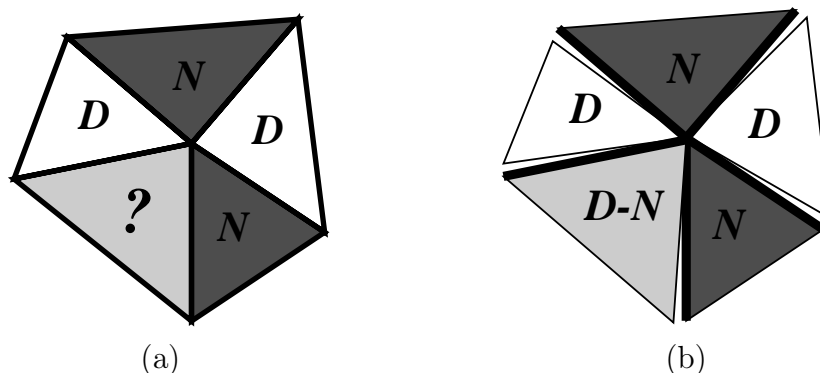
Wiele lat pracy nad metodami dekompozycji obszaru zaowocowało powstaniem ogólnej teorii tworzenia i analizy wielu starych i nowych metod iteracyjnych (addytywnych, multiplikatywnych i hybrydowych) opartych na tej metodzie. Określa się je wspólnym mianem (patrz np. [8], [9], [17, roz. 2]) *Abstrakcyjnej Teorii Metod Schwarza*. W rozprawie, ze względu na największą efektywność zrównoleglenia, ograniczono się tylko do operatorów addytywnych i związanej z nimi AMS – *Abstrakcyjnej Teorii Addytywnych Metod Schwarza*. Metody Schwarza polegają na zbudowaniu *macierzy preconditionera*, użycie której zastępuje duży i źle uwarunkowany układ liniowych równań algebraicznych układem lepiej uwarunkowanym. Taki układ równań jest następnie rozwiązywany iteracyjnie. Abstrakcyjna teoria addytywnych metod Schwarza precyzuje poszczególne etapy tworzenia takiego preconditionera. Wszystkie metody opisane w pracy były konstruowane i analizowane właśnie w oparciu o tę teorię.

Od metod dekompozycji obszaru wymagana jest między innymi optymalność, to jest brak zależności szybkości zbieżności od liczby podobszarów. Niestety wymaganie to jest na ogół zbyt rygorystyczne. Zamiast tego wprowadza się określenie metody *prawie optymalnej*, to znaczy takiej, której wskaźnik uwarunkowania rośnie jak potęga logarytmu wraz ze wzrostem liczby podobszarów. Potęga przy logarytmie powinna być oczywiście jak najmniejsza – w praktyce równa jeden lub dwa. W większości metod osiągnięcie prawie optymalności, wiąże się z wprowadzeniem dodatkowych poziomów obliczeń na podziale wyjściowego obszaru na podobszary, co wpływa istotnie na przyspieszenie procesu iteracyjnego. Tego typu metody noszą nazwę dwupoziomowych i zostały już dość dobrze zbadane i opisane (zob. [17], [16]). Zainteresowanie metodami jednopoziomowymi nie było takie duże, gdyż uważano je za mniej efektywne ze względu na często towarzyszącą im zależnością od liczby podobszarów. Wyjątkiem okazuje się jednopoziomowa metoda Dirichleta-Neumanna dekompozycji obszaru przedstawiona w [6], która stanowi podstawę badań zawartych w pracy. W ostatnich latach powrócono do badań nad metodami jednopoziomowymi w związku z nowymi klasami metod dekompozycji obszaru określanymi jako FETI-DP (ang. *Dual-Primal Finite Element Tearing and Interconnecting*). Są one bardziej efektywną wersją metod FETI, które po raz pierwszy zostały opisane w [11], a podstawowe informacje o nich zebrane zostały w rozdziale 6 monografii [17]. Pomysł, na którym opierają się metody FETI polega na dopuszczeniu w kolejnych iteracjach nieciągłości na brzegach podobszarów. Zbieżność do ciągłego rozwiązania następuje wraz ze zbieżnością procesu iteracyjnego. Szczególnie duży nakład pracy został włożony w metody FETI-DP, z którymi to jednopoziomowa metoda Dirichleta-Neumanna okazuje się mieć bardzo ścisły związek (zob. [12], [13]). Istotne jest w nich odpowiednie zrównoważenie pomiędzy

jak najmniejszą liczbą więzów ciągłości między sąsiadującymi podobszarami a szybkością zbieżności procesu iteracyjnego tak, by obliczenia mogły być przeprowadzane niezależnie na poszczególnych podobszarach z zachowaniem braku zależności od liczby podobszarów. Więzy mogą określać na przykład równość wartości funkcji, należącej do podprzestrzeni rozwiązań, w niektórych punktach brzegu lub równość wartości średnich całkowych na ścianach (w trzech wymiarach) czy krawędziach (w dwóch i trzech wymiarach). Więcej na temat tych metod można przeczytać w [17, str. 160].

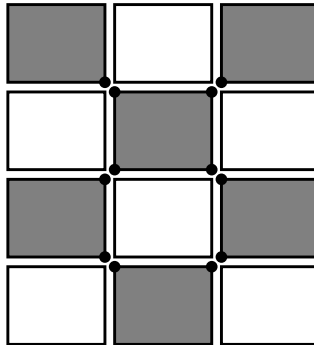
2 Motywacja i cele

Za punkt wyjścia rozprawy można uznać opisaną w [6] jednopoziomową metodę Dirichleta-Neumanna dekompozycji obszaru w dwóch wymiarach. Ciężar obliczeń w tej metodzie związany jest w głównej mierze z podobszarami typu Neumanna, które to są powiązane ze sobą co najwyżej poprzez wierzchołki, zwane *punktami krzyżowymi*. Powiązania są zatem słabe i rozwiązanie zadania można sprowadzić do niezależnych obliczeń na poszczególnych podobszarach oraz rozwiązania jednego globalnego zagadnienia wymiaru liczby punktów krzyżowych. W metodzie tej przyjęto jednak ograniczające założenie istnienia takiego przyporządkowania każdemu z podobszarów odpowiedniego typu albo Dirichleta, albo Neumanna, aby żadne dwa podobszary tego samego rodzaju nie miały wspólnych krawędzi (patrz rys. 1). Oczywiście w ogólnym przypadku takie przyporządkowanie może nie istnieć. Przykład takiej sytuacji jest przedstawiony na rysunku 2a.



Rysunek 2: (a) Przykładowy podział obszaru w dwóch wymiarach na podobszary, dla którego nie istnieje przyporządkowanie typu Neumanna i Dirichleta. (b) Podział na podobszary typu Neumanna (czarne), Dirichleta (białe) i mieszane Neumanna-Dirichleta (szare).

Podstawowym celem pracy jest uogólnienie jednopoziomowej metody Dirichleta-Neumanna równoległego rozwiązywania dyskretyzacji zagadnień eliptycznych z dwóch na trzy wymiary. Uogólnienie polega na zaprojektowaniu algorytmu i przeprowadzeniu pełnej analizy jego zbieżności. Oprócz tego w pracy znajduje się opis szeregu modyfikacji metod jednopoziomowych, zarówno w dwóch, jak i w trzech wymiarach. Kluczową modyfikacją z całą pewnością jest rezygnacja z ograniczającego założenia o istnieniu przyporządkowania typów Dirichleta lub Neumanna każdemu z podobszarów. Zostało to osiągnięte poprzez wprowadzenie mieszanych elementów Neumanna-Dirichleta (patrz rys. 2b). Pozostałe modyfikacje związane są z globalnym zagadnieniem związanym ze współdzielonymi przez podobszary typu Neumanna punktami. Rozważany jest przypadek rezygnacji z założenia ciągłości w tych punktach, kosztem wprowadzenia w nich większej liczby wartości (patrz rys. 3), jak również wprowadzenie dodatkowego poziomu obliczeń związanego z tak zwaną *grubą siatką* opartą na podziale wyjściowego obszaru Ω na podobszary. Integralną częścią pracy jest również implementacja części opisanych algorytmów oraz symulacje obliczeń równoległych na maszynie jednoprocessorowej mające na celu potwierdzenie uzyskanych rezultatów teoretycznych.



Rysunek 3: Nieciągła w punktach krzyżowych (oznaczonych kółkami) jednopoziomowa metoda Dirichleta-Neumanna.

Wszystkie opisane w pracy metody były konstruowane dla zagadnień eliptycznych dla równania drugiego rzędu z zerowym warunkiem brzegowym typu Dirichleta:

dla danego ograniczonego obszaru $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, dla $d = 2, 3$ znaleźć $u^* \in H_0^1(\Omega)$ takie, że:

$$a(u^*, v) = l(v) \quad \forall v \in H_0^1(\Omega), \quad (1)$$

gdzie

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^d a_{ij}(x) D_i u D_j v \, dx \quad (2)$$

jest symetryczną, $H^1(\Omega)$ -eliptyczną formą dwuliniową określoną nad $H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$, prawa strona (1) jest funkcjonałem

$$l(v) = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad (3)$$

natomiast $f \in L^2(\Omega)$. Symetryczność formy dwuliniowej wynika z równości:

$$a_{ij}(x) = a_{ji}(x) \quad \forall_{i,j=1,\dots,d} \quad \forall_{x \in \Omega}. \quad (4)$$

Zakładamy, że funkcje a_{ij} są ciągłe. Dla uproszczenia zapisu metody przedstawione zostały tylko dla obszarów Ω będących wielokątami w dwóch, a wielościanami w trzech wymiarach. Można rozpatrywać obszary, o których brzegu zakładamy tylko, iż jest lipschitzowsko ciągły (zob. [1]), ale wymagałoby to wprowadzania triangulacji opartych na krzywoliniowych elementach (patrz np. [5]). Wprowadzenie odpowiedniej dla takich triangulacji notacji, wpłynęłoby z pewnością negatywnie na klarowność przedstawiania idei algorytmów, które stanowią centralny punkt rozprawy. Przedstawioną teorię można uogólnić na obszary w przestrzeniach dla $d > 3$, ale przypadki dwuwymiarowy i trójwymiarowy są najczęściej spotykane w praktyce i dlatego właśnie one zostały opisane w pracy dokładnie. Zaprojektowanych w rozprawie metod Dirichleta-Neumanna można również użyć do rozwiązywania ogólniejszych dyskretyzacji zagadnień eliptycznych, wliczając w to równania eliptyczne z różnymi warunkami brzegowymi, inne warianty MES czy siatki niezgodne. Wystarczy skorzystać z opisanej w pracy analizy oraz szeroko rozbudowanej teorii dostępnej w specjalistycznej literaturze.

Do dyskretyzacji zagadnienia różniczkowego (1) została użyta, jako jedna z najczęściej stosowanych, metoda elementu skończonego. Na obszarze Ω wprowadzamy rodzinę konforemnych i quasi-jednostajnych triangulacji $\mathcal{T}^h(\Omega)$, parametryzowanych parametrem h , której elementami są trójkąty w 2D, a simpleksy w 3D. Wprowadzamy również zgodną z nimi konforemną i regularną triangulację $\mathcal{T}^H(\Omega)$ złożoną z N rozłącznych podobszarów Ω_i (porównaj np. [7, roz. 10.3] lub [5, roz. 2.1]). Następnie definiujemy ciąg skończenie wymiarowych przestrzeni $V_h(\Omega) \subset H_0^1(\Omega)$ funkcji kawałkami liniowych i ciągłych na triangulacji, zerujących się na brzegu obszaru Ω , to jest

$$V_h(\Omega) = \{v \in C_0(\bar{\Omega}), v|_K \in \mathcal{P}^1(K) : K \in \mathcal{T}^h(\Omega)\}, \quad (5)$$

gdzie $\mathcal{P}^1(K)$ oznacza zbiór wielomianów dwóch w przypadku dwuwymiarowym, zaś trzech zmiennych w przypadku trzech wymiarów, stopnia co najwyżej jeden określonych na elemencie triangulacji K . W ten sposób dostajemy zagadnienie dyskretne dla zagadnienia różniczkowego (1):

znaleźć $u_h^* \in V_h(\Omega)$ takie, że:

$$a(u_h^*, v_h) = l(v_h) \quad \forall v_h \in V_h(\Omega). \quad (6)$$

Jego rozwiązania szukamy w postaci

$$u_h^* = \mathcal{H}u_h^* + \mathcal{P}u_h^*, \quad (7)$$

gdzie

$$\mathcal{H}u_h = \left\{ \mathcal{H}_i(u_h|_{\partial\Omega_i}) \right\}_{i=1}^N \quad i \quad \mathcal{P}u_h = \left\{ \mathcal{P}_i(u_h|_{\partial\Omega_i}) \right\}_{i=1}^N \quad (8)$$

są odpowiednio symbolicznymi oznaczeniami na funkcje dyskretnie harmoniczne na podobszarach Ω_i oraz rzuty funkcji u_h na wszystkie $V_h(\Omega)|_{\Omega_i}$ (patrz [17]). $\mathcal{H}_i u_h$ oznacza dyskretnie harmoniczne rozszerzenie funkcji na podobszar Ω_i w sensie formy $a_i(\cdot, \cdot)$ z u_h daną na $\partial\Omega_i$, zaś $\mathcal{P}_i u_h$ rzutu ortogonalnego w sensie tej formy. Część $\mathcal{P}u_h^*$ rozwiązania można obliczyć równoległe rozwiązując szereg niezależnych, lokalnych zagadnień z formami dwuliniowymi $a_i(\cdot, \cdot)$ z zerowymi warunkami brzegowymi Dirichleta. Kluczowe pozostaje zatem rozwiązanie zagadnienia określonego na *szkielecie*

$$\Gamma = \bigcup_{i=1}^N \Gamma_i = \bigcup_{i=1}^N (\partial\Omega_i \setminus \partial\Omega) \quad (9)$$

tak zwanego *zagadnienia Schura*:

znaleźć $u^* \in \mathcal{H}V_h(\Omega)$ takie, że:

$$s(u^*, v) = g(v) \quad \forall v \in \mathcal{H}V_h(\Omega), \quad (10)$$

gdzie

$$\begin{aligned} s(u, v) &= \sum_{i \in \mathcal{N}} s_i(u, v) = \sum_{i \in \mathcal{N}} a_i(\mathcal{H}_i(u|_{\partial\Omega_i}), \mathcal{H}_i(v|_{\partial\Omega_i})), \\ g(v) &= l(\mathcal{H}v), \end{aligned} \quad (11)$$

Zadanie (10) ma mniejszy wymiar od zadania (6) oraz lepszy wskaźnik uwarunkowania, dlatego właśnie w oparciu o nie konstruowane były metody opisane w rozprawie.

3 Metody Dirichleta-Neumanna w 2D

Konstrukcja jednopoziomowej metody Dirichleta-Neumanna w dwóch wymiarach, wraz z analizą została zaprezentowana w [6]. Dekompozycja wyjściowej przestrzeni składa się w tym przypadku tylko z jednej przestrzeni, zaś odpowiadająca jej forma dwuliniowa określona jest wzorem:

$$b(u, v) = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} s_i(u, v) \quad \forall u, v \in \mathcal{H}V_h(\Omega)|_{\Gamma}, \quad (12)$$

gdzie \mathcal{N}_N oznacza zbiór indeksów podobszarów typu Neumanna. Z analizy opartej na abstrakcyjnej teorii addytywnych metod Schwarz'a wynika

Twierdzenie 1

Operator T określony równaniem

$$b(Tu, v) = s(u, v)$$

jest odwracalny oraz

$$\text{cond}(T) \leq C \left(1 + \log \frac{H}{h} \right)^2,$$

gdzie C jest stałą niezależną od h i H .

Dzięki temu rozwiązanie problemu (10) można zastąpić szukaniem rozwiązania równania operatorowego

$$\mathbf{T} \mathbf{u}_h = \mathbf{g}_h, \quad (13)$$

gdzie \mathbf{g}_h odpowiada wektorowi prawej strony (10). Operator T jest symetryczny, dodatnio określony (patrz lemat 2.1 w [17]) oraz dobrze uwarunkowany, a przede wszystkim układ równań (13) można rozwiązać znacznie bardziej efektywnie czasowo i numerycznie, ze względu na możliwość zrównoleglenia obliczeń, od rozwiązania układu z macierzą Schur'a.

Oprócz wyprowadzenia macierzowej postaci preconditionera

$$\mathbf{S}_N = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} \mathbf{R}_i^T \mathbf{S}^{(i)} \mathbf{R}_i, \quad (14)$$

gdzie $\mathbf{S}^{(i)}$ jest macierzą odpowiadającą formie dwuliniowej $s_i(\cdot, \cdot)$, zaś \mathbf{R}_i jest macierzą operatora obcięcia przestrzeni $\mathcal{H}V_h(\Omega)$ do podprzestrzeni związanej z podobszarem Ω_i , w pracy opisana jest także macierzowa postać algorytmu Dirichleta-Neumanna. Szczególny nacisk jest przy tym położony na

jak największe zrównoleglenie obliczeń, przy czym w przypadku braku punktów krzyżowych obliczenia mogą być przeprowadzone całkowicie niezależnie na poszczególnych podobszarach. Dla dużej liczby podobszarów, kiedy to punkty krzyżowe są obecne, rozwiązanie układu z macierzą preconditionera wyznacza się najczęściej za pomocą metody iteracyjnej. W eksperymentach numerycznych, ze względu na szybkość zbieżności, użyta została metoda gradientów sprzężonych (patrz [15]) z \mathbf{S}_N jako macierzą preconditionera. Dla czytelności opisu algorytmu są jednak przedstawione na podstawie metody iteracyjnej Richardsona (patrz na przykład [17, str. 399]) z parametrem relaksacji τ .

Najważniejsza z przedstawionych modyfikacji metody Dirichleta-Neumanna w dwóch wymiarach polega na rezygnacji z założenia istnienia takiego przyporządkowania podobszarom typów Dirichleta lub Neumanna, żeby żadne dwa podobszary tego samego typu nie miały wspólnych krawędzi (porównaj rys. 2b). W takim przypadku możemy wprowadzić podobszary mieszanego typu, które z punktu widzenia sąsiadów typu Neumanna reprezentują typ Dirichleta, a są typu Neumanna dla sąsiadujących z nim podobszarów typu Dirichleta. W metodzie tej forma dwuliniowa została określona następująco:

$$b(u, v) = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} s_i(u, v) + \sum_{i \in \mathcal{N}_M} s_i(I^h \theta_i^M(u - u_{\nu_i}), I^h \theta_i^M(v - v_{\nu_i})) \quad (15)$$

gdzie \mathcal{N}_M oznacza zbiór indeksów podobszarów typu mieszanego, u_{ν_i} i v_{ν_i} to wartości funkcji u i v w ustalonym dla każdego podobszaru Ω_i wierzchołku ν_i , zaś θ_i^M jest kawałkami liniową i ciągłą na szkieletcie funkcją, która znika we wszystkich punktach nodalnych Γ_h poza tymi, które należą do części brzegu $\Gamma_i^M \subset \partial\Omega_i$. Do Γ_i^M należą te krawędzie wraz z ich wierzchołkami, którym przypisany został typ Neumanna. W pracy pokazane jest, że oszacowanie wskaźnika uwarunkowania operatora T określonego równaniem

$$b(Tu, v) = s(u, v), \quad (16)$$

zależy tylko, jak w twierdzeniu 1 dla wyjściowej metody, polilogarytmicznie od stosunku H/h . Potęgą przy logarytmie jest równa cztery.

Zasadniczą częścią każdej iteracji wzorcowej metody z [6], jest rozwiązanie globalnego układu równań z niewiadomymi w punktach krzyżowych. Modyfikacja polegająca na rezygnacji z warunków ciągłości w punktach krzyżowych (patrz rys. 3) przedstawiona w rozprawie prowadzi do dekompozycji przestrzeni:

$$V(\Gamma) := \mathcal{H}V_h(\Omega)|_\Gamma = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} R_i^T V_i(\Gamma_i), \quad (17)$$

gdzie $V_i(\Gamma_i)$ są przestrzeniami lokalnymi:

$$V_i(\Gamma_i) = V(\Gamma)|_{\Gamma_i}. \quad (18)$$

Dla $i \in \mathcal{N}_N$ formy dwuliniowe $b_i(\cdot, \cdot)$ określone są wzorami dla każdych u, v należących do $V_i(\Gamma_i)$:

$$b_i(u, v) = \widehat{a}_i \left(\widehat{H}_i(\mu_i u), \widehat{H}_i(\mu_i v) \right), \quad (19)$$

gdzie $\widehat{H}_i u_h$ jest dyskretnie harmonicznym rozszerzeniem funkcji u_h na podobszar Ω_i w sensie formy

$$\widehat{a}_i(u, v) = s_i(u, v) + \frac{1}{H^2} (u, v)_{L^2(\Omega_i)} \quad (20)$$

z u_h daną na $\partial\Omega_i$. μ_i jest kawałkami liniową i ciągłą na brzegu podobszaru Ω_i funkcją o wartościach w punktach nodalnych $x \in \Gamma_i$ równych liczbie podobszarów typu Neumanna, do których dany punkt należy. Przy tak sprecyzowanej dekompozycji addytywny operator Schwarz'a T jest dany wzorem

$$T = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} R_i^T \widetilde{T}_i, \quad (21)$$

gdzie \widetilde{T}_i dla $i \in \mathcal{N}_N$ są zdefiniowane następująco:

$$b_i(\widetilde{T}_i u, v_i) = s(u, R_i^T v_i), \quad \forall v_i \in V_i(\Gamma_i). \quad (22)$$

W rozprawie podana jest analiza wraz z dowodem szybkości zbieżności tak skonstruowanej metody, której podsumowaniem jest

Twierdzenie 2

Operator $T = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} T_i$ określony w (21) jest odwracalny oraz

$$\text{cond}(T) \leq CH^{-2} \left(1 + \log \frac{H}{h} \right)^2,$$

gdzie C jest stałą niezależną od h i H . Dla podziałów bez punktów krzyżowych wyraz H^{-2} nie występuje.

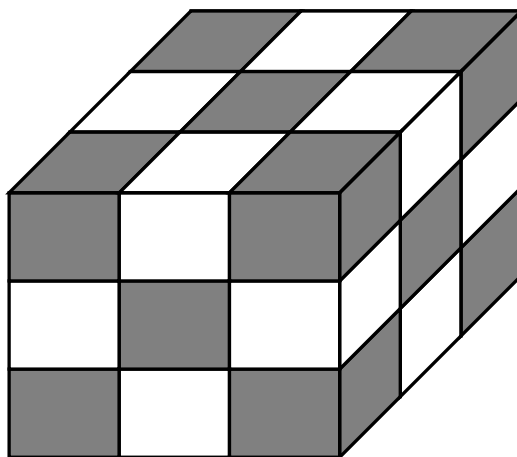
W porównaniu z metodą wyjściową (porównaj tw. 1) wskaźnik uwarunkowania różni się czynnikiem H^{-2} , czyli zależnością od liczby podobszarów. Jest to cena jaką musimy zapłacić, za usunięcie powiązań między podobszarami typu Neumanna. Wymiana informacji pomiędzy podobszarami w tym przypadku

następuje bowiem w każdym kroku iteracji tylko pomiędzy sąsiadującymi ze sobą podobszarami. Zatem przesłanie informacji pomiędzy dwoma odległymi podobszarami wymaga wykonania liczby iteracji porównywalnej (z dokładnością do czynnika logarytmicznego) z liczbą podobszarów.

Dla pełności opisu rozprawa zawiera również krótkie opisy kilku metod dwupoziomowych. Charakteryzują się one brakiem zależności szybkości zbieżności od liczby podobszarów, ale konieczne jest wprowadzenie dodatkowego poziomu obliczeń związanych z grubą siatką. Większość z tych metod została już dość dobrze zbadana i opisana w dostępnej literaturze (zob. [16], [17]).

4 Metody Dirichleta-Neumanna w 3D

Głównym celem pracy było uogólnienie jednopoziomowej metody Dirichleta-Neumanna z dwóch na trzy wymiary. Założenie, aby żadne dwa podobszary tego samego typu nie miały wspólnych krawędzi, zostało zastąpione wymaganiami braku wspólnych ścian (patrz rys. 4). Rozprawa zawiera dokładny opis



Rysunek 4: Przykładowy podział prostopadłościennego obszaru na podobszary typu Neumanna (czarne) i Dirichleta (białe).

algorytmu Dirichleta-Neumanna dla wielu podobszarów w 3D, jego pełną analizę teoretyczną oraz postać macierzową i implementację. Do konstrukcji i analizy zbieżności algorytmu D-N wykorzystano abstrakcyjną teorię addytywnych metod Schwarz'a. W analogii do dwóch wymiarów, nie była dokonywana dekompozycja przestrzeni, a forma dwuliniowa $b(\cdot, \cdot)$ określona została

wzorem

$$b(u, v) = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} s_i(u, v) = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} a_i(\mathcal{H}_i(u|_{\partial\Omega_i}), \mathcal{H}_i(v|_{\partial\Omega_i})) \quad (23)$$

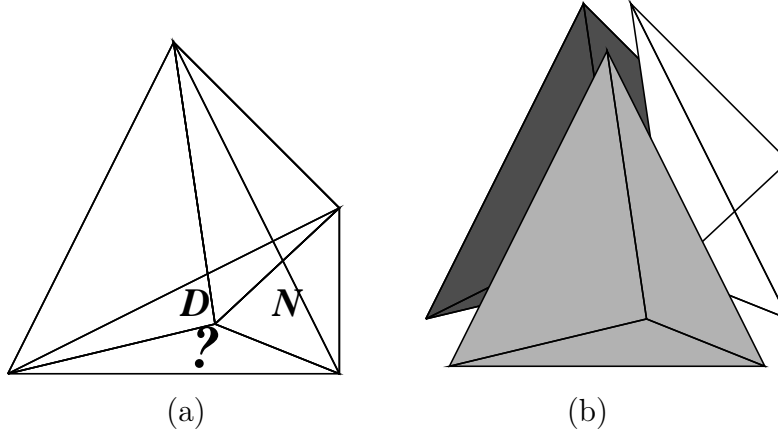
dla każdych $u, v \in V(\Gamma)$. Mimo większego wymiaru, udało się uzyskać takie samo oszacowanie jak w twierdzeniu 1 dotyczącym metody w 2D. W tym celu jednak konieczne było zastosowanie całkowicie innej techniki dowodowej opartej na definicji quasi-interpolantu \tilde{I}_i^H określonego dla funkcji $v \in V(\Gamma)$ na punktach nodalnych ν szkieletu następująco:

$$\left(\tilde{I}_i^H v\right)(\nu) = \max_{j \in \mathcal{N}_i \cap \mathcal{N}_N} \bar{v}_{\partial\Omega_j} = \max_{j \in \mathcal{N}_i \cap \mathcal{N}_N} \frac{1}{|\partial\Omega_i|} \int_{\partial\Omega_j} v(x) dx. \quad (24)$$

Przez \mathcal{N}_i oznaczony został zbiór indeksów podobszarów, których brzegi mają części wspólne z brzegiem podobszaru Ω_i , zaś $|\partial\Omega_i|$ oznacza miarę zbioru $\partial\Omega_i$. Opisana macierzowa postać metody sprowadza się do szeregu niezależnych lokalnych obliczeń na podobszarach oraz rozwiązania układu równań z niewiadomymi związanymi z punktami nodalnymi krawędzi i wierzchołkami szkieletu. Wymiar tego układu jest zatem zdecydowanie mniejszy od wymiaru macierzy Schura \mathbf{S} , która to obejmuje jeszcze punkty nodalne ścian szkieletu, ale znacznie większy od wymiaru odpowiadającej macierzy w dwóch wymiarach. Tam bowiem uwzględnione były tylko punkty krzyżowe, a w trzech wymiarach również punkty krawędzi. Oba układy – w 2D i 3D – pełnią rolę pośrednika przy wymianie informacji pomiędzy podobszarami typu Neumanna.

Rozprawa obejmuje również modyfikację jednopoziomowej metody Dirichleta-Neumanna w trzech wymiarach, uogólniającą ją na przypadki podziałów, dla których nie istnieje przyporządkowanie podobszaram typów Neumanna bądź Dirichleta takie, aby żadne dwa podobszary tego samego typu nie miały wspólnej ściany. Przykład takiego podziału podany jest na rysunku 5a. Pomysł polega na wprowadzeniu mieszanych elementów Neumanna-Dirichleta (rys. 5b), których wspólnym z podobszarami typu Neumanna ścianom przypisany jest typ Dirichleta, a ściany współdzielone z podobszarami typu Dirichleta traktowane są jako typu Neumanna. Dzięki modyfikacji formy dwuliniowej udało się zachować brak zależności szybkości zbieżności od liczby podobszarów.

Sytuacja okazuje się gorsza w przypadku drugiej modyfikacji polegającej na dopuszczeniu nieciągłości na krawędziach współdzielonych przez podobszary typu Neumanna (patrz rys. 6). W tym przypadku zastosowana została dekompozycja na przestrzenie związane z podobszarami typu Neumanna,



Rysunek 5: (a) Przykładowy podział obszaru w trzech wymiarach na podobszary, dla którego nie istnieje przyporządkowanie typu Neumanna i Dirichleta. (b) Podział na podobszary typu Neumanna (czarne), Dirichleta (białe) i mieszane Neumanna-Dirichleta (szare).

a odpowiadające im formy dwuliniowe zostały zdefiniowane następująco:

$$b_i(u, v) = \begin{cases} \hat{a}_i(\hat{H}_i(\mu_i u), \hat{H}_i(\mu_i v)) & \bar{\Omega}_i \cap \bar{\Omega} = \emptyset \\ a_i(H_i(\mu_i u), H_i(\mu_i v)) & \bar{\Omega}_i \cap \bar{\Omega} \neq \emptyset \end{cases} \quad (25)$$

dla $u, v \in V_i(\Gamma_i)$. μ_i , jak w 2D, jest kawałkami liniową i ciągłą na $\partial\Omega_i$ funkcją o wartościach w punktach nodalnych $x \in \Gamma_i$ równych liczbie podobszarów typu Neumanna, do których dany punkt należy. $\hat{H}_i u_h$ i $H_i u_h$ są (patrz (11) i (20)) dyskretnie harmonicznymi rozszerzeniami funkcji na podobszar Ω_i w sensie formy dwuliniowej odpowiednio $\hat{a}_i(\cdot, \cdot)$ i $a_i(\cdot, \cdot)$ z u_h daną na $\partial\Omega_i$.

Twierdzenie 3

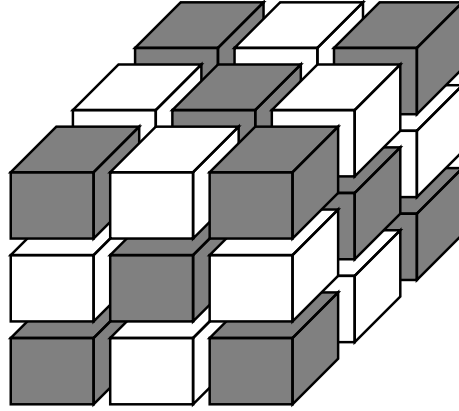
Addytywny operator Schwarza $T = \sum_{i \in \mathcal{N}_N} R_i^T \tilde{T}_i$, gdzie \tilde{T}_i określone są dla $i \in \mathcal{N}_N$ przez równanie

$$b_i(\tilde{T}_i u, v_i) = s(u, R_i^T v_i) \quad \forall v_i \in V_i(\Gamma_i), \quad (26)$$

jest odwracalny oraz

$$\text{cond}(T) \leq \begin{cases} C (1 + \log \frac{H}{h})^2 & \forall i \in \mathcal{N}_N \bar{\Omega}_i \cap \bar{\Omega} \neq \emptyset \\ CH^{-2} (1 + \log \frac{H}{h})^2 & \text{w przeciwnym razie} \end{cases},$$

gdzie C jest stałą niezależną od h i H .



Rysunek 6: Nieciągła na krawędziach jednopoziomowa metoda Dirichleta-Neumanna.

W pracy zawarte są również opisy (porównaj [10] i [17]) paru metod dwupoziomowych, zawierających dodatkowy poziom obliczeń związany z grubą siatką, jak również metoda oparta na dekompozycji na podprzestrzenie związane ze ścianami.

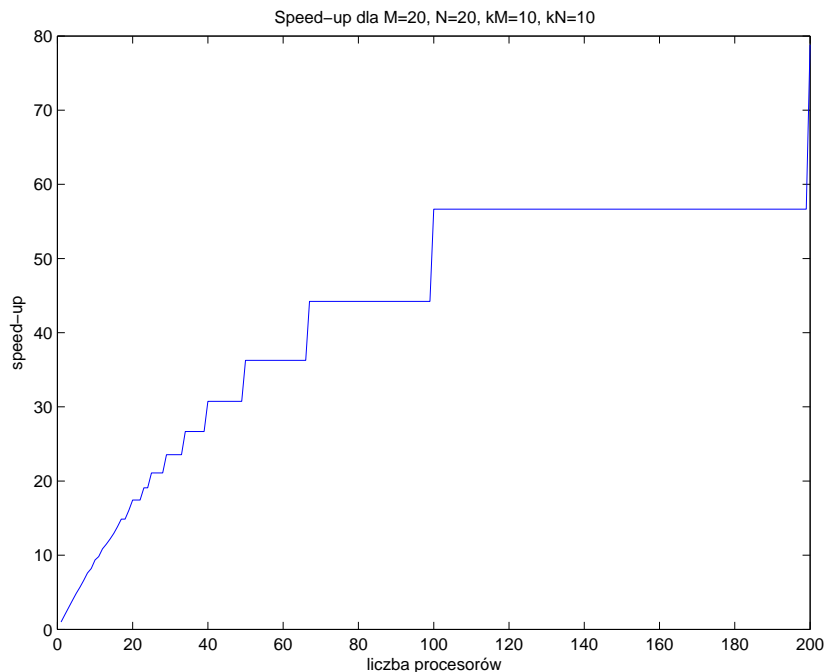
5 Eksperymenty numeryczne

Integralną część rozprawy stanowią eksperymenty numeryczne potwierdzające uzyskane rezultaty teoretyczne analizowanych metod w dwóch i trzech wymiarach. Zaimplementowana została nie tylko jednopoziomowa metoda Dirichleta-Neumanna z punktami krzyżowymi z pracy [6] oraz jej uogólnienie na trzy wymiary, lecz również modyfikacje tych metod dopuszczające nieciągłości na brzegach sąsiadujących podobszarów typu Neumanna, a w przypadku 2D również algorytm z elementami mieszanymi. Implementacja wszystkich metod oparta była na metodzie gradientów sprzężonych (ang. the **C**onjugate **G**radient method). Przeprowadzone zostały między innymi serie eksperymentów:

- przy ustalonym stosunku $\frac{H}{h}$,
- przy stałej liczbie podobszarów ($H=\text{const}$) i malejącym kroku h drobnej triangulacji,
- przy stałym kroku h drobnej triangulacji i zmniejszającej się liczbie podobszarów (rosnącym H).

Porównane zostały wskaźniki uwarunkowania, dokładność i czas obliczeń oraz liczba iteracji poszczególnych metod i ich modyfikacji. Dodatkowo wszystkie

algorytmy zbadane zostały pod kątem zrównoleglenia. W tym celu mierzony był czas obliczeń na jednym procesorze oraz przewidywany czas obliczeń na większej liczbie procesorów oraz zależność stosunku tych czasów od liczby procesorów, określane często jako *speed-up*. Wykres przykładowych wyników pomiaru funkcji *speed-up* przedstawiony został na rysunku 7. Potwierdza on bardzo dobrą podatność na zrównoleglenie analizowanych w rozprawie metod – szybkość obliczeń rośnie co najmniej liniowo wraz z liczbą użytych procesorów.



Rysunek 7: Speed-up jednopoziomowej metody Dirichleta-Neumanna w 2D.

6 Podsumowanie

Rozprawa stanowi przekrojowe opracowanie dotyczące metod Dirichleta-Neumanna równoległego rozwiązywania dyskretyzacji zagadnień eliptycznych, ze szczególnym uwzględnieniem metod jednopoziomowych. Opisy zawartych w niej metod obejmują nie tylko dokładną charakterystykę algorytmów i ich pełną analizę teoretyczną, lecz również postacie macierzowe, wraz z implementacją. Wprowadzono szereg uogólnień i modyfikacji do znanej już

z [6] jednopoziomowej, dwuwymiarowej metody Dirichleta-Neumanna. Najważniejsze z nich, to z pewnością konstrukcja i analiza metody w trzech wymiarach oraz uwolnienie się od ograniczającego założenia istnienia przyporządkowania każdemu z podobszarów typu Dirichleta bądź Neumanna w taki sposób, aby żadne dwa podobszary tego samego typu nie miały wspólnych krawędzi w dwóch, a ścian w trzech wymiarach. Oprócz tego zostały opisane nieciągłe na brzegach sąsiadujących ze sobą podobszarów typu Neumanna metody, w których obliczenia mogą być przeprowadzone całkowicie niezależnie na poszczególnych podobszarach, bez potrzeby rozwiązywania jakiegokolwiek problemu globalnego. Dla małej liczby podobszarów rząd zbieżności tych metod jest taki sam jak metod z nałożonymi warunkami ciągłości na szkielecie Γ . Każda z opisanych metod została zaimplementowana w programie Matlab, dzięki czemu uzyskana została możliwość łatwej i efektywnej graficznej prezentacji wyników. Ważną część pracy stanowią serie eksperymentów numerycznych, które potwierdziły rezultaty teoretyczne udowodnione w rozprawie.

Literatura

- [1] R. A. Adams:
Sobolev spaces,
Academic Press, New York, 1975r.
- [2] M. Ben-Ari:
Podstawy Programowania współbieżnego i rozproszonego,
Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa, 1996r.
- [3] D. Braess:
Finite elements. Theory, fast solvers, and applications in solid mechanics,
Second Edition, Cambridge University Press, 2001r.
- [4] S. C. Brenner:
The condition number of the Schur complement in domain decomposition,
Numer. Math. 83: 187-203, 1999r.
- [5] P. G. Ciarlet:
The Finite Element Method For Elliptic Problems,
North-Holland Publishing Company Amsterdam-New York-Oxford,
1978r.

- [6] M. Dryja, W. Proskurowski, O. Widlund:
Method of domain decomposition with cross points for elliptic finite element problems,
 Blagovest Sendov, editor „Optimal Algorithms”, pages 97-111, Sofia, Bulgaria, 1986. Bulgarian Academy of Sciences.
- [7] M. Dryja, J. i M. Jankowscy:
Przegląd metod i algorytmów numerycznych. Część 2.
 Wydanie drugie poprawione. Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 1988r.
- [8] M. Dryja, O. B. Widlund:
Some domain decomposition algorithms for elliptic problems
 In L. Hayes and D. Kincaid, editors, *Iterative Methods for Large Linear Systems* pages 273-291.
 Academic Press, San Diego, California, 1989r.
- [9] M. Dryja, O. B. Widlund:
Towards a unified theory of domain decomposition algorithms for elliptic problems
 In T. Chan, R. Glowinski, J. Périaux and O. Widlund, editors, *Third International Symposium on Domain decomposition Methods for partial Differential Equations* pages 3-21.
 SIAM, Philadelphia, 1990r.
- [10] M. Dryja, B. F. Smith, O. B. Widlund:
Schwarz analysis of iterative substructuring algorithms for elliptic problems in three dimensions
 SIAM J. Numer. Anal., Vol. 31, No. 6. pp. 1662-1694, December 1994r.
- [11] Ch. Farhat, F. X. Roux:
A Method of Finite Element Tearing and Interconnecting and its Parallel Solution Algorithm.,
 Internat. J. Numer. Methods Engrg., 32, str. 1205-1227, 1991r.
- [12] A. Klawonn, O. Widlund:
FETI and Neumann-Neumann iterative substructuring methods: connections and new results,
 Technical Report TR1999-796, Department of Computer Science, Courant Institute, December 22, 1999r.
- [13] A. Klawonn, O. Widlund, M. Dryja:
Dual-primal FETI methods for three-dimensional elliptic problems with

- heterogeneous coefficients.*
SIAM J. Numer. Anal., 40(1), str. 159-179, April 2002r.
- [14] A. Quarteroni, A. Valli:
Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations,
Clarendon Press, Oxford 1999r.
- [15] Y. Saad:
Numerical Methods For Sparse Linear Systems,
Second Edition 2000r.
- [16] B. F. Smith, P. E. Bjorstad, W. D. Groop:
*Domain Decomposition. Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial
Differential Equations,*
Cambridge University Press, Cambridge 1996r.
- [17] A. Toselli, O. Widlund:
Domain Decomposition Methods: Algorithms and Theory,
April 2004r.